

# بررسی اثرات مشتقات بنزامیدازول به عنوان بازدارنده‌های خوردگی برای فولاد ساده کربنی در محیط HCl

پژوهش‌نفت

سال نوزدهم  
شماره ۵۹  
صفحه ۳۵-۲۷، ۱۳۸۸

جعفر الجورانی، کیوان رئیسی\* و محمدعلی گل‌عذار

دانشگاه صنعتی اصفهان، دانشکده مهندسی مواد

k\_raeissi@cc.iut.ac.ir

است. با توجه به شیب‌های منحنی تافل و پتانسیل‌های تعادلی، مکانیزم حفاظتی هر دو بازدارنده از نوع مختلط تعیین شد.

واژه‌های کلیدی: بنزامیدازول، بازدارنده، خوردگی، فولاد ساده کربنی

## مقدمه

خوردگی یکی از مشکلات عمده و پرهزینه صنایع نفت، گاز و پتروشیمی به شمار می‌آید. فولاد ساده کربنی در این صنایع بسیار استفاده می‌شود [۱ و ۲]. امروزه مطالعه خوردگی فولاد ساده کربنی از جمله موضوع‌های مهم صنایع و مراکز علمی است [۳]. خوردگی اسیدی فولاد ساده کربنی در صنعت و به‌خصوص در مرحله اسید شویی از جمله مشکلات صنعتی است [۱، ۲ و ۴]. اسید کلریدریک یکی از پرکاربردترین مواد برای اسیدشویی است. محلول اسیدشویی به شدت خورنده است لذا این فرایند با افزودن بازدارنده‌ها انجام می‌شود [۳]. استفاده از بازدارنده‌های خوردگی یکی از راه‌های مهم و مؤثر برای جلوگیری از

## چکیده

فولاد ساده کربنی در صنایع نفت و پتروشیمی بسیار استفاده می‌شود و خوردگی آن در محیط‌های اسیدی از جمله مشکلات و معضلات این صنایع است. استفاده از بازدارنده‌های خوردگی یکی از راه‌های مهم برای جلوگیری از خوردگی تجهیزات صنعتی محسوب می‌شود. مشتقات بنزامیدازول یکی از ترکیبات آلی هتروسیکلیک هستند که به‌عنوان بازدارنده‌های خوردگی فولاد ساده کربنی در محیط‌های اسیدی به خوبی عمل می‌کنند. در این تحقیق اثرات بازدارندگی خوردگی و توانایی جذب دو مشتق ۲- مرکاپتوبنزامیدازول و ۲- متیل‌بنزامیدازول بر سطح فولاد در محلول ۱ مولار HCl بررسی شد. آزمون‌های پلاریزاسیون پتانسیودینامیک در محلول ۱ مولار HCl در غلظت‌های ۰، ۵۰، ۱۰۰، ۱۵۰، ۲۰۰ و ۲۵۰ ppm این بازدارنده‌ها انجام شدند. نتایج نشان دادند که مشتق ۲- مرکاپتوبنزامیدازول بازده بیشتری از ۲- متیل‌بنزامیدازول دارد. ۲- مرکاپتوبنزامیدازول با غلظت ۲۵۰ ppm تا ۸۸ درصد و ۲- متیل‌بنزامیدازول در غلظت ۲۵۰ ppm تا ۵۴ درصد موجب کاهش خوردگی شد. جذب هر دو مشتق روی سطح فولاد با ایزوترم لانگمیر مطابقت داشت. محاسبه انرژی آزاد استاندارد جذب نشان داد که جذب هر دو مشتق روی سطح فولاد از نوع شیمیایی

خود تغییر مقدار جذب و بازدارندگی ملکول می‌شود. به عبارت دیگر سطح فلز اشغال شده با بازدارنده، تابع سطح ملکول و وضعیت فضایی آن است [۷]. اثرات القایی و رزونانس جانشین‌ها باعث تغییر چگالی الکترونی مرکز جذب ملکول می‌شوند. علاوه بر این، با بررسی پارامترهای کوانتوم شیمیایی مشتقات بنزامیدازول، مانند  $E_{LUMO}$ ،  $E_{HOMO}$  و TNC<sup>۳</sup> ارتباطی بین ساختار الکترونی ملکول و مقدار بازدارندگی ایجاد می‌گردد [۷ و ۹-۱۱].

در این تحقیق، عملکرد و خاصیت بازدارندگی خوردگی دو مشتق بنزامیدازول روی فولاد ساده کربنی در محلول ۱ مولار اسید کلریدریک بررسی شد. آزمون‌های پلاریزاسیون Tafel در محلول حاوی غلظت‌های ۰، ۵۰، ۱۰۰، ۱۵۰، ۲۰۰ ppm از هر دو بازدارنده انجام و اثرات ساختار الکترونی و ساختار شیمیایی مشتقات بر بازده بازدارندگی و مقایسه تأثیر جانشین‌های مختلف ارزیابی شد.

### روش تحقیق

#### آماده کردن نمونه‌ها

نمونه‌های فولاد ساده کربنی دیسکی به مساحت  $0.8 \text{ cm}^2$  در رزین اپوکسی مانت سرد و سپس با کاغذ سمباده شماره ۸۰ تا ۱۲۰۰ پولیش و بعد از شستشو با آب مقطر و الکل با هوای گرم خشک و تا موقع استفاده به عنوان الکتروود کار در دسیکاتور نگهداری شدند. ترکیب شیمیایی فولاد ساده کربنی در جدول (۱) ارائه شده است.

جدول ۱- ترکیب شیمیایی فولاد ساده کربنی

عناصر	C	Al	Mn	Si	Fe
درصد وزنی	۰/۰۷۲	۰/۵۳	۰/۵۵۴	۰/۶۶۶	مابقی

#### بازدارنده‌ها و مواد

محلول ۱ مولار HCl از اسید HCl ۳۷٪ و آب مقطر تهیه شد. بازدارنده‌های ۲- مرکاپتوبنزامیدازول و ۲- متیل بنزامیدازول از شرکت مرک تهیه شدند (جدول ۲). بازدارنده‌های لازم با ترازوی دقیق تا (۰/۰۰۱ گرم) توزین شدند.

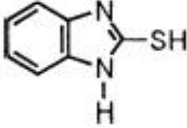
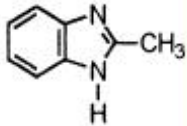
خوردگی فولاد کربنی در محیط‌های اسیدی و محیط‌های بسیار خورنده است [۱-۶]. کمی بازدارنده به سیستم افزوده می‌شود تا واکنش شیمیایی را کند یا متوقف کند. معمولاً بازدارنده‌های خوردگی به شکل تجربی شناخته و اصلاح و با نام‌های تجاری به بازار عرضه می‌شوند. مشتقات بنزامیدازول ترکیبات آلی هتروسیکلیک حاوی اتم‌های نیتروژن، گوگرد یا اکسیژن هستند که به عنوان بازدارنده در محیط اسیدی به کار می‌روند [۱ و ۳-۶]. اولین مرحله بازدارندگی این مشتقات، جذب در فصل مشترک محلول- فلز و جایگزینی ملکول‌های بازدارنده با ملکول‌های آب است [۲، ۷ و ۸]:



سپس یک پیوند شیمیایی بین مرکز جذب ملکول و اوربیتال d- پر نشده در آهن تشکیل می‌شود [۳ و ۷]. در خوردگی اسیدی، جذب بازدارنده لایه دوگانه را تغییر می‌دهد. بنابراین انجام واکنش‌های الکتروشیمیایی (واکنش آندی انحلال فلز و واکنش کاتدی احیای هیدروژن) کاهش می‌یابد [۷]. تحقیقات نشان می‌دهند که توانایی جذب بازدارنده‌های آلی در سطح فلز به ترکیب شیمیایی محیط، ساختار فضایی ملکول، خواص فیزیکی- شیمیایی ملکول، گروه عاملی، چگالی الکترونی اتم دهنده و برهمکنش‌های  $\pi$  بستگی دارد [۳ و ۷-۹]. ساختار شیمیایی و الکترونی مشتقات بنزامیدازول باعث ایجاد خاصیت بازدارندگی و جذب خوب روی سطح فولاد می‌شود [۷ و ۸]. دلایل انتخاب این مشتقات به عنوان بازدارنده، داشتن ساختار شیمیایی و الکترونی مناسب، قیمت ارزان و عدم آلاینده‌گی محیط زیست است [۵]. به طور کلی بنزامیدازول سه مکان ترجیحی برای جذب روی سطح فلز دارد: ۱- اتم نیتروژن با هیبرید  $sp^2$  (اتم در موقعیت ۳)، ۲- لبه  $C_{(4)}-H-C_{(5)}-H$  و ۳- حلقه آروماتیک [۱، ۳ و ۹]. گروهی از محققان اتم نیتروژن با هیبرید  $sp^2$  را به عنوان مرکز جذب ملکول معرفی می‌کنند [۷ و ۹]. جانشین‌های آلی موجب تغییر چگالی الکترونی مرکز جذب ملکول و به نوبه خود تغییر بازده بازدارندگی می‌شوند [۱، ۷ و ۹]. تغییر ساختار شیمیایی و وضعیت فضایی سه بعدی ملکول موجب تغییر سطح ملکول و به نوبه

1. Highest Occupied Molecular Orbital Energy  
2. Lowest Unoccupied Molecular Orbital Energy  
3. Total Negative Charge

جدول ۲- مشخصات مشتقات بنزامیدازول استفاده شده

نام ترکیب	فرمول ساختاری	اختصار	جرم مولکولی (g/mol)
۲- مرکاپتوبنزامیدازول		2-SH-BI	۱۵۰/۲۰
۲- متیل بنزامیدازول		CH <sub>3</sub> -BI-2	۱۳۲/۱۰

### آزمایش پلاریزاسیون

آزمون‌های پلاریزاسیون تافل بر اساس سیستم سه الکترودی بودند و اندازه‌گیری‌ها با دستگاه پتانسیو استات EG&G مدل A ۲۶۳ انجام شدند. از الکتروود مرجع از نوع کالومل اشباع (SCE) و الکتروود کمکی سیم پلاتین استفاده شد. تمام پتانسیل‌های ارائه شده و نتایج با الکتروود مرجع کالومل ارزیابی می‌شوند. محدوده پتانسیل انتخابی ۲۵۰- تا ۲۵۰ میلی ولت نسبت به کالومل اشباع و مقدار روبش ۱ mV/s و دمای آزمایش‌ها ۲۵±۱°C است. زمان غوطه‌ور شدن نمونه‌ها برای رسیدن به حالت تعادل ۳۰ min است. آزمایش‌ها در غلظت‌های ۰، ۵۰، ۱۰۰، ۱۵۰، ۲۰۰ و ۲۵۰ ppm از هر دو بازدارنده انجام و سه بار تکرار و میانگین و انحراف استاندارد محاسبه شدند.

### نتایج و بحث

شکل‌های ۱ و ۲ منحنی‌های به‌دست آمده از آزمون پلاریزاسیون تافل را برای فولاد ساده کربنی در محلول ۱ مولار اسید کلریدریک با استفاده از غلظت‌های ۰، ۱۵۰ و ۲۵۰ ppm از هر دو بازدارنده 2-SH-BI و 2-CH<sub>3</sub>-BI در دمای ۲۵°C نشان می‌دهند. مقادیر  $i_{corr}$ ،  $E_{corr}$ ،  $\beta_a$  و  $\beta_c$  با روش برون‌یابی به‌دست آمدند. بازده بازدارندگی (IE%) از رابطه (۲) محاسبه می‌شود:

$$IE\% = \left( \frac{i_{corr}^0 - i_{corr}}{i_{corr}^0} \right) * 100 \quad (2)$$

$i_{corr}^0$  چگالی جریان خوردگی در غیاب بازدارنده و  $i_{corr}$  چگالی جریان خوردگی در حضور بازدارنده است.

درجه پوشاندگی سطحی  $\theta$  از رابطه زیر به دست آمد:

$$\theta = 1 - \frac{i_{corr}}{i_{corr}^0} \quad (3)$$

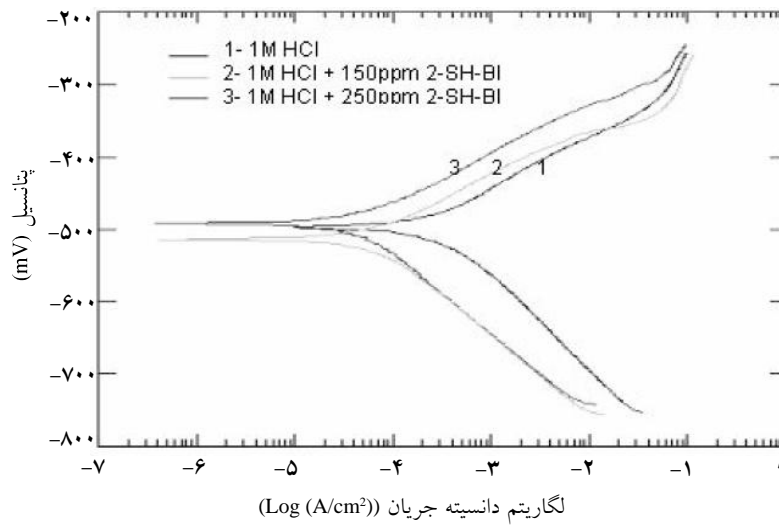
و مقدار خوردگی برحسب (mpy) محاسبه شد:

$$mpy = \frac{0.129 \cdot a \cdot i_{corr}}{n \cdot D} \quad (4)$$

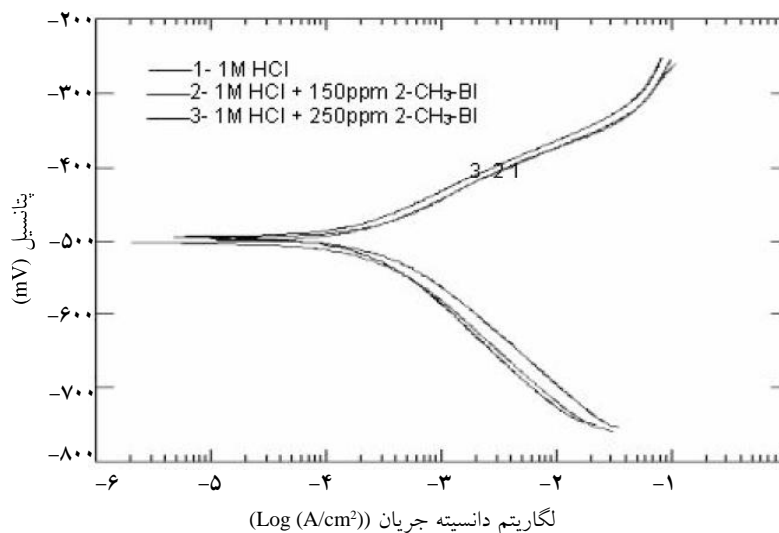
$a$  وزن اتمی فلز بر حسب گرم،  $i$  چگالی جریان بر حسب میکروآمپر بر سانتیمتر مربع،  $n$  تعداد الکترون‌های از دست رفته (تغییر ظرفیت فلز:  $Fe = Fe^{2+} + 2e^-$ ) و  $D$  چگالی فلز بر حسب گرم بر سانتیمتر مکعب است.

کلیه پارامترهای حاصل از شکل‌های ۱ و ۲ و مقادیر حاصل از اعمال رابطه‌های (۲) تا (۴) در جداول ۳ و ۴ مرتب شده‌اند.

با توجه به جداول ۳ و ۴، با افزایش غلظت بازدارنده، بازده بازدارندگی و درجه پوشاندگی سطحی افزایش می‌یابد. هر دو بازدارنده 2-SH-BI و 2-CH<sub>3</sub>-BI از نوع مختلط هستند؛ یعنی روی هر دو واکنش آندی انحلال فلز و واکنش کاتدی احیای هیدروژن اثر می‌گذارند. با این وجود تأثیر بر واکنش آندی بیشتر مشخص است. به عبارت دیگر مقدار افزایش انرژی انحلال آندی از مقدار افزایش انرژی احیای هیدروژن بیشتر است. علاوه بر این، پتانسیل خوردگی با افزایش غلظت کمی تغییر می‌کند که حاکم بودن مکانیزم مختلط را نشان می‌دهد. بازدارنده 2-SH-BI، در غلظت‌های یکسان، بازده بیشتری از 2-CH<sub>3</sub>-BI دارد. بازده 2-SH-BI در حداکثر غلظت، ۸۸٪ و بازده 2-CH<sub>3</sub>-BI در این غلظت ۵۴٪ است (شکل ۳).



شکل ۱- منحنی‌های پلاریزاسیون Tafel برای فولاد ساده کربنی در محیط ۱مولار اسید کلریدریک حاوی غلظت‌های مختلف ۲- مرکاپتوبنزامیدازول در دمای ۲۵°C



شکل ۲- منحنی‌های پلاریزاسیون Tafel برای فولاد ساده کربنی در محیط ۱مولار اسید کلریدریک حاوی غلظت‌های مختلف ۲- متیل بنزامیدازول در دمای ۲۵°C

جدول ۳- نتایج آزمون‌های پلاریزاسیون فولاد کربنی در محیط ۱مولار اسید کلریدریک حاوی غلظت‌های مختلف ۲- مرکاپتوبنزامیدازول در دمای ۲۵°C

IE %	$\theta$	mpy	$\beta_c$ (mV/dec)	$\beta_a$ (mV/dec)	$i_{corr}$ ( $\mu\text{A}/\text{cm}^2$ )	$-E_{corr}$ (mV)	غلظت بازدارنده (ppm)
-	-	۹۸	$10.8 \pm 6/9$	$82 \pm 6/8$	$215 \pm 27/4$	$498 \pm 1/9$	۰
۷۲/۶	۰/۷۲۶	۲۷	$10.7 \pm 5/1$	$67 \pm 7/7$	$59 \pm 6/9$	$510 \pm 9/2$	۵۰
۷۷/۷	۰/۷۷۷	۲۲	$10.9 \pm 4/2$	$70 \pm 3/1$	$48 \pm 9/2$	$508 \pm 5/7$	۱۰۰
۸۱/۴	۰/۸۱۴	۱۸	$10.1 \pm 6/3$	$65 \pm 3/6$	$40 \pm 1/0$	$513 \pm 3/2$	۱۵۰
۸۲/۸	۰/۸۲۸	۱۷	$9.8 \pm 3/8$	$58 \pm 7/5$	$37 \pm 3/9$	$512 \pm 4/2$	۲۰۰
۸۸	۰/۸۸۰	۱۲	$10.2 \pm 3/3$	$66 \pm 3/7$	$26 \pm 2/1$	$506 \pm 9/3$	۲۵۰



2-SH-BI و 2-CH<sub>3</sub>-BI به هم نزدیک و در حدود ۵۳-۴۴ انگسترم مربع است [۷]، لذا پارامتر سطح بر بازده بازدارنده‌ها چندان مؤثر نخواهد بود. به بیان دیگر سطح فلز اشغال شده با هر دو بازدارنده تقریباً یکسان است.

نحوه توزیع غلظت بازدارنده بین توده و سطح فلز با استفاده از ایزوترم‌های جذب تعیین می‌شود. در این تحقیق ایزوترم لانگمیر بررسی شد. رابطه ریاضی این ایزوترم به شکل زیر است [۱]:

$$\frac{C}{\theta} = \frac{1}{K_{ads}} + C \quad (5)$$

K<sub>ads</sub> ثابت جذب، θ درجه پوشاندگی سطحی و C غلظت مولی بازدارنده است.

علاوه بر این، رابطه ثابت جذب و انرژی آزاد استاندارد جذب به صورت زیر است [۱]:

$$K_{ads} = \frac{1}{55.5} \exp\left(\frac{-\Delta G_{ads}^0}{RT}\right) \quad (6)$$

ΔG<sub>ads</sub><sup>0</sup> انرژی آزاد استاندارد جذب و ۵۵/۵ غلظت آب بر حسب (mol.dm<sup>-3</sup>) است.

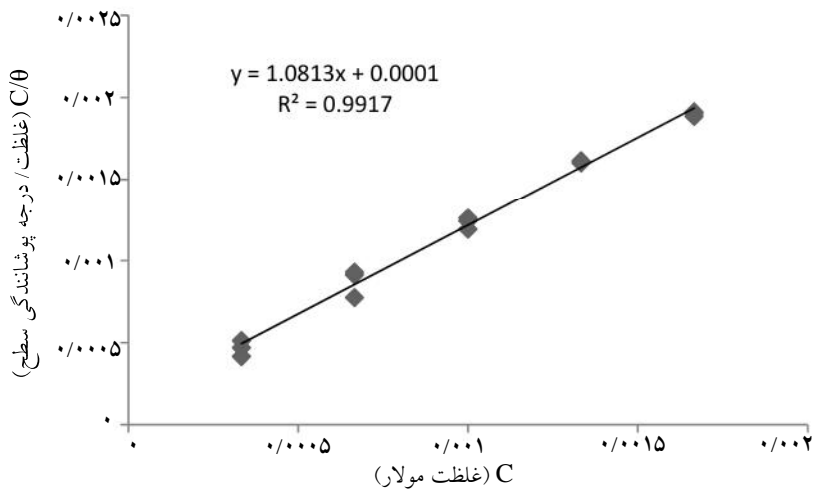
جذب 2-SH-BI و 2-CH<sub>3</sub>-BI روی سطح فولاد کربنی از ایزوترم لانگمیر پیروی می‌کند (شکل‌های ۵ و ۶). با استفاده از این نمودارها و با اعمال رابطه (۶)، ثابت جذب و انرژی آزاد استاندارد جذب برای این دو بازدارنده تعیین شد (جدول ۵). اگر قدر مطلق انرژی آزاد استاندارد جذب کمتر از ۲۰ KJ/mol باشد، جذب فیزیکی است و اگر قدر مطلق انرژی آزاد جذب نزدیک به ۴۰ KJ/mol باشد، جذب شیمیایی است [۱].

با توجه به نتایج جدول ۵، روش جذب هر دو بازدارنده شیمیایی است. واضح است که جذب 2-SH-BI روی سطح فولاد کربنی قویتر از جذب 2-CH<sub>3</sub>-BI است. چگالی الکترونی مرکز جذب ملکول 2-SH-BI بیشتر از چگالی الکترونی 2-CH<sub>3</sub>-BI و در نهایت پیوند شیمیایی 2-SH-BI و آهن محکم‌تر از پیوند 2-CH<sub>3</sub>-BI و آهن است.

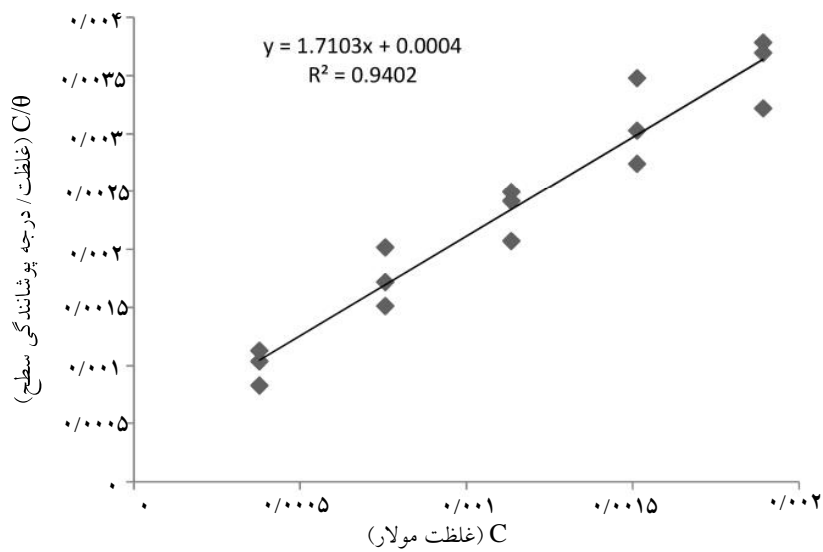
توانایی جذب بازدارنده 2-SH-BI روی سطح فولاد کربنی و پوشاندگی آن بیشتر از توانایی جذب 2-CH<sub>3</sub>-BI است زیرا چگالی الکترونی مرکز جذب ملکول در حضور گروه SH بیشتر از چگالی الکترونی مرکز جذب ملکول در حضور گروه CH<sub>3</sub>- است. مشتقات بنزامیدازول حاوی هر دو اتم نیتروژن و گوگرد، بازدارندگی بهتری از مشتقات حاوی فقط اتم نیتروژن دارند [۱]. از نظر تئوریک تأثیر ساختار الکترونی مشتقات بر واکنش‌پذیری آن با اثرات القایی (I<sub>n</sub>) و اثرات رزونانس (M) تعیین می‌شود. گروه SH دارای I<sub>n</sub> و M با علامت منفی است بنابراین SH- می‌تواند الکترون را پس بگیرد این امر موجب افزایش بار مثبت روی مرکز جذب مشتق می‌شود؛ در صورتی که گروه CH<sub>3</sub>- دارای I<sub>n</sub> و M با علامت مثبت و دهنده الکترون است. بنابراین بار منفی روی مرکز جذب افزایش می‌یابد [۷]. از این رو گروه CH<sub>3</sub>- باید باعث بهتر شدن خاصیت بازدارندگی از گروه SH- شود که نتایج تجربی عکس این موضوع را نشان دادند. یعنی اثرات القایی و رزونانس در مقایسه با پارامترهای کوانتوم شیمیایی ناچیزاند.

برخی از محققان مقدار E<sub>LUMO</sub>، E<sub>HOMO</sub> و TNC را با روش کوانتوم شیمیایی نیمه تجربی محاسبه کرده‌اند که برای مشتق 2-SH-BI، E<sub>LUMO</sub> = -۰/۱۲۴ (eV)، E<sub>HOMO</sub> = -۸/۵۱۷ (eV) و TNC = -۱/۰۶۳ و برای مشتق 2-CH<sub>3</sub>-BI، E<sub>LUMO</sub> = -۸/۸۲۸ (eV)، E<sub>HOMO</sub> = -۰/۰۷۳ (eV) و TNC = -۰/۶۹۸ است [۱۰ و ۱۱]. با کاهش مقدار مثبت (E<sub>LUMO</sub> - E<sub>HOMO</sub>) و با افزایش مقدار منفی TNC، بازده بازدارنده افزایش می‌یابد. انرژی یونیزاسیون ملکول (ΔE<sub>IP</sub>) که بیانگر سهولت و توانایی حرکت الکترون است با رابطه ΔE<sub>IP</sub> = E<sub>HOMO</sub> × -۰/۹۲ محاسبه شد [۷]. انرژی یونیزاسیون 2-SH-BI برابر با ۷/۸۳ (eV) و برای 2-CH<sub>3</sub>-BI برابر با ۸/۱۲ (eV) است. با کاهش انرژی یونیزاسیون، بازده بازدارنده افزایش می‌یابد زیرا حرکت و اهدای الکترون‌ها به راحتی اتفاق می‌افتد.

نتایج به دست آمده از پارامترهای کوانتوم شیمیایی با نتایج تجربی مطابقت دارند. اثرات ساختار شیمیایی با بررسی سطح یا حجم ملکول بررسی می‌شوند. هرچه سطح ملکول یا به عبارت دیگر سطح فلز اشغال شده با بازدارنده بیشتر باشد، بازدارندگی بیشتر خواهد شد. مساحت دو مشتق



شکل ۵- ایزوترم لانگمیر برای جذب ۲- مرکاپتوبنزامیدازول روی فولاد کربنی در محلول ۱ مولار اسید کلریدریک در دمای ۲۵°C



شکل ۶- ایزوترم لانگمیر برای جذب ۲- متیلبنزامیدازول روی فولاد کربنی در محلول ۱ مولار اسید کلریدریک در دمای ۲۵°C

جدول ۵- ثابت جذب و انرژی آزاد استاندارد جذب برای ۲- مرکاپتوبنزامیدازول و ۲- متیلبنزامیدازول

بازدارنده	ثابت جذب (mol <sup>-1</sup> )	انرژی آزاد استاندارد جذب (kJ.mol <sup>-1</sup> )
2-SH-BI	۱×۱۰ <sup>۴</sup>	- ۳۲/۵۳
2-CH <sub>3</sub> -BI	۰/۲۵×۱۰ <sup>۴</sup>	- ۳۰/۳۱

## نتیجه گیری

- ۱- هر دو مشتق بنزامیدازول 2-SH-BI و 2-CH<sub>3</sub>-BI از خوردگی فولاد ساده کربنی در محلول ۱ M HCl جلوگیری می‌کنند.
- ۲- بازدارنده 2-SH-BI که هر دو اتم نیتروژن و گوگرد را دارد از بازدارنده 2-CH<sub>3</sub>-BI که فقط اتم نیتروژن دارد، بازده بیشتری داشت که به کوچکتر بودن انرژی یونیزاسیون آن ربط داده شد.
- ۳- مکانیسم بازدارندگی هر دو بازدارنده از نوع مختلط تعیین شد. بازدارنده‌ها روی هر دو واکنش آندی و کاتدی تأثیر گذارند.
- ۴- جذب هر دو بازدارنده از نوع شیمیایی است که با ایزوترم لانگمیر تطابق دارد.
- ۵- مقادیر ثابت جذب و قدر مطلق انرژی آزاد استاندارد جذب برای بازدارنده 2-SH-BI بیشتر از بازدارنده 2-CH<sub>3</sub>-BI است؛ بنابراین پیوند شیمیایی 2-SH-BI و آهن محکم‌تر از پیوند بین 2-CH<sub>3</sub>-BI و آهن است.

## تشکر و قدردانی

بدین وسیله از تحصیلات تکمیلی و معاونت پژوهشی دانشگاه صنعتی اصفهان، برای تأمین هزینه‌های انجام این تحقیق تشکر و قدردانی می‌شود.

## علائم و نشانه‌ها

- a*: وزن اتمی فلز (گرم بر مول)  
*C*: غلظت مولی  
*D*: چگالی فلز (گرم بر سانتیمتر مکعب)  
 $\Delta G_{ads}^0$ : انرژی آزاد استاندارد جذب (ژول)  
*i*: چگالی جریان (میکروآمپر بر سانتیمتر مربع)  
*IE*: بازده بازدارندگی  
 $K_{ads}$ : ثابت جذب  
*n*: تعداد الکترون‌های از دست رفته  
 $\theta$ : درجه پوشانندگی سطحی



