

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАГРЕВА УГЛЕРОДНОЙ НАНОЧАСТИЦЫ C94 В СРЕДЕ АРГОНА ПРИ АТМОСФЕРНОМ ДАВЛЕНИИ

В.П. Дан, Д.И. Терентьев.

Уральский институт ГПС МЧС России, г. Екатеринбург.

Н.М. Барбин.

Уральский государственный аграрный университет, г. Екатеринбург.

С.Г. Алексеев.

Научно-исследовательский центр «Надежность и ресурс больших систем и машин» Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург

Рассмотрено поведение углеродной наночастицы при нагревании в среде аргона при давлении 10^5 Па в температурном диапазоне от 473 К до 3973 К. Установлены основные физико-химические процессы, протекающие при нагреве C94.

Ключевые слова: углеродные нанотрубки, термодинамическое моделирование, C94-Ar

THERMODYNAMIC MODELING OF HEATING CARBON NANOPARTICLES C94 IN ARGON AT ATMOSPHERIC PRESSURE

V.P. Dan; D.I. Terenitev.

Ural institute of State fire service of EMERCOM of Russia, Yekaterinburg.

N.M. Barbin. Urals state agrarian university, Yekaterinburg.

S.G. Alexeev.

Science and engineering centre «Reliability and safety of large systems» of Ural branch of Russian academy of sciences, Yekaterinburg

The behavior of carbon nanoparticles when heated in argon at pressure 10^5 PA in the temperature range from 473 K To 3973 K was considered. the basic physico-chemical processes occurring during the heating C94 was established.

Keywords: carbon nanotubes, thermodynamic modeling, C94-Ar

Углеродные нанотрубки (УНТ) обладают рядом уникальных свойств, таких как: электропроводность (причем в зависимости от структуры УНТ могут быть проводниками или изоляторами), большая прочность в сочетании с высокими значениями упругой деформации, диамагнитные свойства [1]. Наличие данных свойств определяется высокой прочностью углерод-углеродных связей, колоссальной прочностью упаковки атомов, отсутствием (или незначительно малой плотностью) дефектов структуры. При внедрении твердого заполнителя возможно образование наностержня в полости нанотрубки, что расширяет спектр ее практического применения [2].

Композитные материалы на основе УНТ в сто раз прочнее стали и при этом вдвое легче алюминия. Тяжелая металлургия, авиация, космическая техника, медицина, наноэлектроника – это далеко не полный список возможных областей применения УНТ. Создание углеродной нанонити достаточной длины позволило бы реализовать идеи космического лифта, искусственных мышц и т.д.

Однако углеродные наноматериалы, и УНТ в частности, еще недостаточно хорошо изучены с точки зрения пожарной опасности. Нельзя предсказать поведение углеродных наноматериалов при нагревании в различных средах.

В настоящей работе изучалось поведение наноуглерода C94 при нагревании в атмосфере инертного газа (аргона) при давлении 10^5 Па. Исследования проводились методом термодинамического моделирования.

Термодинамическое моделирование заключается в термодинамическом анализе равновесного состояния системы в целом (полный термодинамический анализ) [3, 4]. Расчетные методы развиты на основе вариационных принципов термодинамики.

Одной из наиболее развитых и эффективных программ, реализующих такие термодинамические расчеты, является программный комплекс TERRA, представляющий собой этап дальнейшего развития пакета программ ASTRA [5].

Расчеты состава фаз и характеристик равновесия проводятся с использованием справочной базы данных по свойствам индивидуальных веществ [6, 7].

Зависимость состава газовой фазы от температуры в системе C94-Ar представлена на рис. 1.

В температурном диапазоне от 2 473 К до 4 273 К наблюдается появление в системе более значимых компонентов – C3 (достигает максимальную концентрацию при температуре 4 073 К, а далее концентрация уменьшается), концентрация которого превышает 10^{-1} мол. дол., C, C2, концентрация которых превышает 10^{-2} мол. дол., C5 и C4, концентрация которых превышает 10^{-3} мол. дол. при достижении температуры 3 973 К (при дальнейшем нагревании концентрация уменьшается). В температурном диапазоне от 3 673 К до 4 273 К в газовую фазу переходят менее значимые компоненты – C+, e-, C2-, концентрация которых превышает 10^{-6} мол. дол. и C2+, концентрация которого достигает 10^{-7} мол. дол.

Зависимость состава конденсированной фазы от температуры в системе C94-Ar представлена на рис. 2.

В температурном диапазоне от 473 К до 3 573 К преобладают следующие компоненты: C2 и C, концентрация которых превышает 10^{-1} мол. дол., C3, C5 и C4, концентрация которых превышает 10^{-2} мол. дол.

В температурном диапазоне от 3 373 К до 3 973 К резко возрастает концентрация следующих компонентов: C94, концентрация которого в данном температурном диапазоне превышает 10^{-1} мол. дол., C84 и C90, концентрация которых превышает 10^{-2} мол. дол., C76, C70, концентрация которых превышает 10^{-3} мол. дол., C60, C56, C50, концентрация которых превышает 10^{-4} мол. дол., C44, C32 и C28 с концентрацией более 10^{-5} мол. дол.

Проанализировав полученные данные, можно сделать вывод, что изменение температуры приводит к увеличению числа аллотропных элементов в системе.

Балансовый график углерода в системе C94-Ar представлен на рис. 3.

При давлении 10^5 Па углерод в системе распределяется следующим образом: в температурном интервале от 473 К до 773 К наблюдается резкое уменьшение процентной доли элемента C(c) и переход его в C(s1), содержание которого достигает 99 мол. %. При температуре от 773 К до 3473 К наблюдается уменьшение содержания C(s1) до 50 мол. %. При этом в системе появляются такие элементы, как C2(s1), содержание которого достигает 28 мол. %, C3(s1) с концентрацией 9 мол. %, C4(s1) и C5(s1), концентрация которых не превышает 3 мол. %.

При дальнейшем повышении температуры от 3473 К до 3673 К в системе наблюдается уменьшение содержания всех вышеуказанных элементов и вместе с тем появление следующих элементов: C94(s1), концентрация которого достигает 53 мол. %, C84(s1) с концентрацией 7 мол. %, C90(s1) с концентрацией 6 мол. %, C76(s1) с концентрацией 1 мол. %.

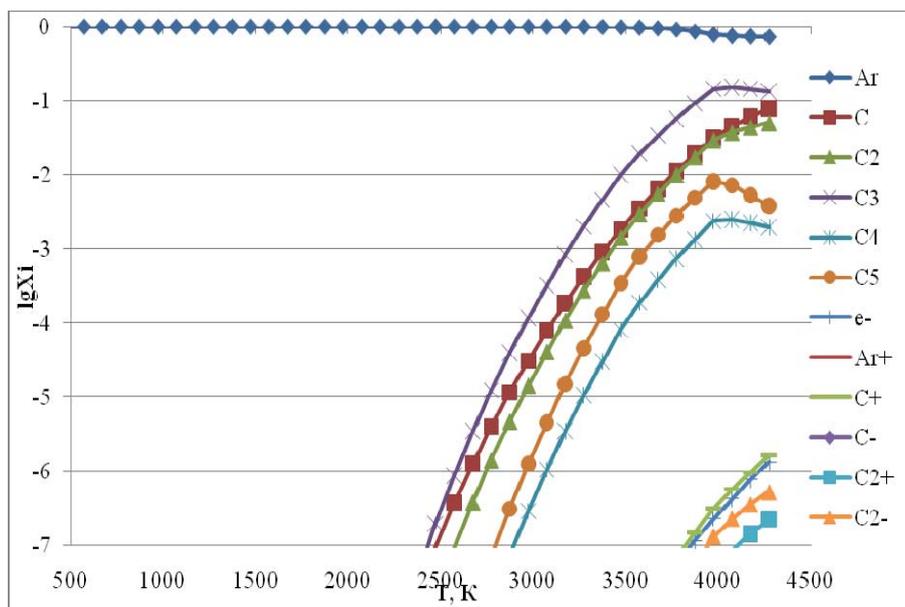


Рис. 1. Зависимость состава газовой фазы от температуры в системе при давлении 10^5 Па

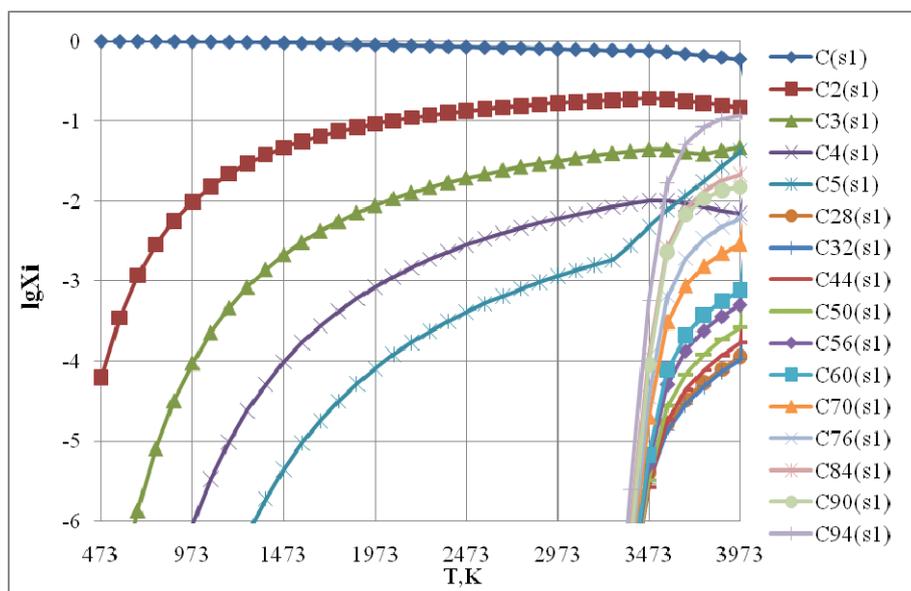


Рис. 2. Зависимость состава конденсированной фазы от температуры в системе при давлении 10^5 Па

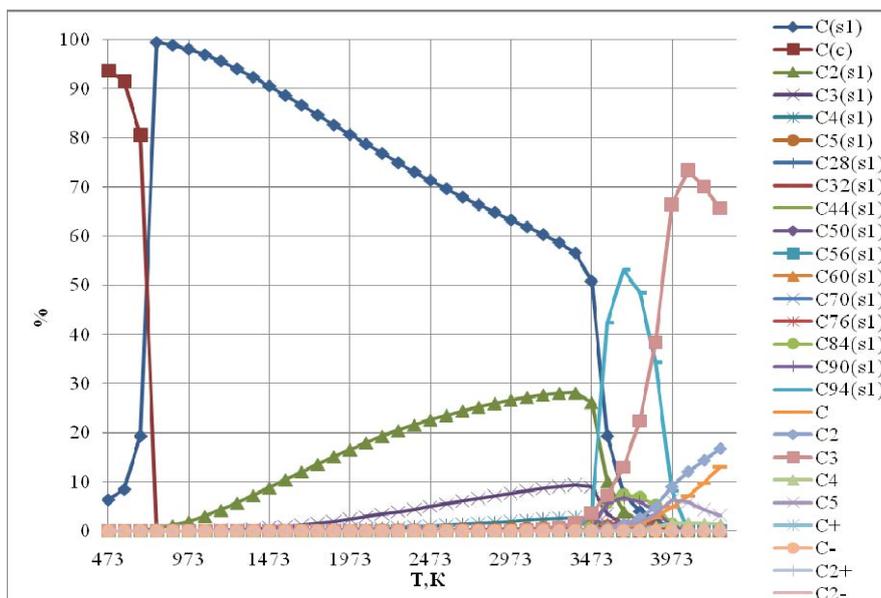


Рис. 3. Баланс углерода в системе C94-Ar

При температуре от 3 673 К до 3 973 К содержание элементов C94(s1), C84(s1), C90(s1), C76(s1) уменьшается, что способствует появлению и переходу в газовую фазу таких элементов, как C2 с концентрацией 9 мол. %, C5 с концентрацией 6 мол. %, C с концентрацией 4 мол. %, C4, C3, C+, C-, C2+ и C2- с концентрацией 1 мол. % и менее.

Литература

1. Убеллоде А.Р., Льюис Ф.А. Графит и его кристаллические соединения: пер. с англ. Е.С. Головина, О.А. Цуханова. М.: Мир, 1965. 257 с.
2. Колокольцев С.Н. Углеродные материалы. Свойства, технологии, применения: учеб. пособие. Долгопрудный: Изд. дом «Интеллект», 2012. 296 с.
3. Barbin N.M., Terentiev D.I., Alekseev S.G., Tuktarov M.A., Romenkov A.A. Modeling of radioactive graphite oxidation in molten salts. Book of abstracts // The 33rd international symposium «Scientific basis for nuclear waste management». St.-Petersburg, 2009. P. 133.
4. Barbin N.M., Terentiev D.I., Alekseev S.G., Tuktarov M.A., Romenkov A.A. Modeling of radioactive graphite oxidation in molten salts: computer experiment // Material research society symposium proceeding. 2009. 1193. P. 359–366.
5. Ватолин Н.А., Моисеев Г.К., Трусков Б.Г. Термодинамическое моделирование в высокотемпературных системах. М.: Металлургия, 1994. 352 с.
6. Гуревич Л.В., Вейц И.В., Медведев В.А. Термодинамические свойства индивидуальных веществ: справ.: в 4-х т. М.: Наука, 1982. 8 540 с.
7. Алемасов В.Е., Дергалин А.Ф., Тишин А.П. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания: справ.: в 5-и т. М.: ВНИИТИ, 1971. 6 350 с.