



UvA-DARE (Digital Academic Repository)

Подготовка задачи численного моделирования синтеза фуллеренов в углеродсодержащей плазме дугового разряда

Afanasieva, A.S.; Ponyaev, S.A.; Krzhizhanovskaya, V.V.

Publication date

2011

Document Version

Final published version

Published in

XL Неделя науки СПбГПУ

[Link to publication](#)

Citation for published version (APA):

Afanasieva, A. S., Ponyaev, S. A., & Krzhizhanovskaya, V. V. (2011). Подготовка задачи численного моделирования синтеза фуллеренов в углеродсодержащей плазме дугового разряда. In E. V. Vochagina (Ed.), *XL Неделя науки СПбГПУ: материалы международной научно-практической конференции* (Vol. 6, pp. 129-131). Sankt-Peterburgskii gosudarstvennyi politekhnicheskii universitet. <https://docplayer.ru/41761987-XI-nedelya-nauki-spbgpu-materialy-mezhdunarodnoy-nauchno-prakticheskoy-konferencii-ch-vi-spb-izd-vo-politehn-un-ta-s.html>

General rights

It is not permitted to download or to forward/distribute the text or part of it without the consent of the author(s) and/or copyright holder(s), other than for strictly personal, individual use, unless the work is under an open content license (like Creative Commons).

Disclaimer/Complaints regulations

If you believe that digital publication of certain material infringes any of your rights or (privacy) interests, please let the Library know, stating your reasons. In case of a legitimate complaint, the Library will make the material inaccessible and/or remove it from the website. Please Ask the Library: <https://uba.uva.nl/en/contact>, or a letter to: Library of the University of Amsterdam, Secretariat, Singel 425, 1012 WP Amsterdam, The Netherlands. You will be contacted as soon as possible.

XL Неделя науки СПбГПУ : материалы международной научно-практической конференции. Ч. VI. – СПб. : Изд-во Политехн. ун-та, 2011. – 144 с.

В сборнике публикуются материалы докладов студентов, аспирантов, молодых ученых и сотрудников Политехнического университета, вузов Санкт-Петербурга, России, СНГ, а также учреждений РАН, представленные на научно-практическую конференцию, проводимую в рамках ежегодной XL Недели науки Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Доклады отражают современный уровень научно-исследовательской работы участников конференции в области фундаментальных, технических, экономических, социальных и гуманитарных наук.

Представляет интерес для специалистов в различных областях знаний, учащихся и работников системы высшего образования и Российской академии наук.

Печатается по решению редакционно-издательского совета
Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

Редакционная коллегия факультета технологии и исследования материалов:

*Г.А. Туричин (декан ФТИМ), Е.В. Бочагина (отв. ред.),
П.В. Ковалев, В.М. Голод, С.И. Выступов,
Е.В. Богомолова, А.А. Григорьев, С.А. Ермаков, А.Ф. Липаев*

© Санкт-Петербургский государственный
политехнический университет, 2011

ПОДГОТОВКА ЗАДАЧИ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ СИНТЕЗА ФУЛЛЕРЕНОВ В
УГЛЕРОДСОДЕРЖАЩЕЙ ПЛАЗМЕ ДУГОВОГО РАЗРЯДА.

В рамках данной работы планируется провести численное моделирование процесса синтеза фуллеренов методом дугового разряда с целью оптимизации технологических параметров. Расчет проводится с помощью открытого программного пакета для численного моделирования задач механики сплошной среды OpenFOAM (Open Field Operation and Manipulation) [1].

Анализ стоимости фуллеренов, при которой возможно их широкое применение в различных областях промышленности, проведен в [2]. Первыми областями применения фуллеренов могут стать фармацевтическая промышленность, производство алмазов и катализаторов. Но даже в этих областях для успешной конкуренции с существующими продуктами цены на фуллерены должны быть снижены на порядок. Высокие цены на фуллерены связаны с большой себестоимостью их производства с помощью дугового разряда [3], который является на данный момент основным поставщиком фуллеренов на рынок [4]. Для снижения себестоимости фуллеренов, необходимо произвести исследование дугового способа производства фуллеренов, а также механизма их образования в плазме дугового разряда. Численное моделирование является удобным инструментом для таких исследований.

Сущность электродугового метода заключается в генерации плазмы в дуговом разряде между графитовыми электродами в гелиевой атмосфере при давлении 100-200 тор (схема установки на рис.1.). Основная роль гелия, по-видимому, связана с охлаждением фрагментов, которые имеют высокую степень колебательного возбуждения, что препятствует их объединению в стабильные структуры. Кроме того, атомы гелия уносят энергию, выделяющуюся при объединении фрагментов.

Из угольного конденсата, полученного таким путем, можно выделить фуллереновую смесь, количество которой составляет около 10 %. После этого полученные фуллерены экстрагируют из продуктов термического разложения графита (фуллеренсодержащей сажи), затем производится сепарация и очистка фуллеренов, основанная на использовании растворителей и сорбентов. Выпаривание полученного таким образом раствора фуллеренов приводит к образованию черного поликристаллического порошка, представляющего собой смесь фуллеренов различного сорта. Масс-спектр подобного продукта показывает, что экстракт фуллеренов на 80-90 % состоит из C₆₀ и на 10-15% - из C₇₀. Сепарация фуллеренов, входящих в состав экстракта, основана на идеях жидкостной хроматографии [5].

Существует несколько технологических параметров, путем оптимизации которых можно достичь максимального содержания экстрагируемых фуллеренов в

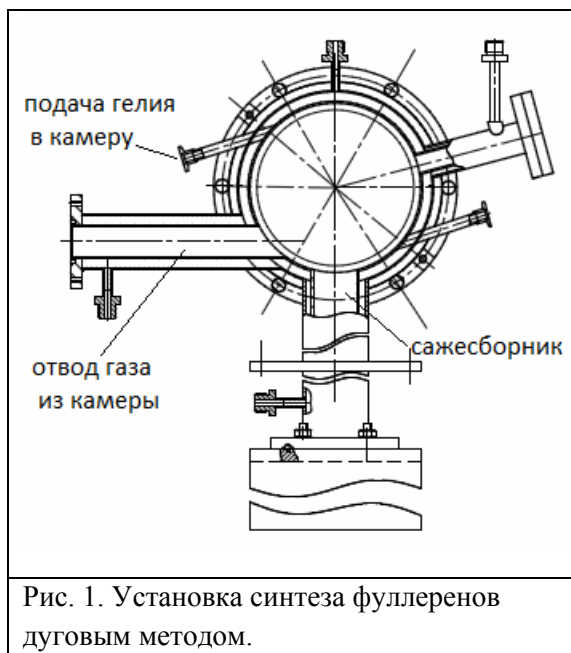


Рис. 1. Установка синтеза фуллеренов дуговым методом.

фуллереносодержащей саже. Кроме геометрических параметров камеры, два главных параметра для контроля выхода фуллеренов это давление гелия в камере и значение тока дуги. В работе [6] авторы сообщают о достижении максимального выхода фуллеренов 13 % при давлении гелия в камере 2,6 кПа и значениях тока дуги порядка 220-250 А, а в работе [7] сообщалось о получении 20 % выхода фуллеренов при давлении гелия 13,3 кПа и токе дуги (при фиксированном межэлектродном расстоянии) 65 А.

Фуллерены образуются в разлетающемся углеродном паре при последовательном росте углеродных кластеров. Такой рост сопровождается одновременным отжигом кластеров в буферном газе. Таким образом, эффективность образования фуллеренов определяется концентрацией углерода, температурой газа, скоростью потока, вытекающего из межэлектродного промежутка, а также распределением этих величин по пространству.

Предполагается следующая качественная картина взаимодействия и взаимопревращения кластеров: при формировании как нейтральных, так и заряженных кластеров проходит определенная последовательность конфигураций: атомы → молекулы → цепочки → кольца → многокольцевые системы → фуллерены [8], то есть топологии заряженных и нейтральных кластеров идентичны.

Очевидно, что рассмотрение процессов в сильноточной дуге, включающих синтез фуллеренов как составную часть, исключительно сложно. При таком рассмотрении необходимо учитывать эрозию электродов, плазмообразующие процессы в межэлектродном зазоре, заполненном гелием, вынос струи газа в окружающее пространство и реакции между углеродными кластерами в этой струе.

На данный момент проведены расчеты тестовой задачи по течению гелия в камере дугового разряда. Подготовка задачи (построение геометрии рабочей области и сетки) производилась в открытом пакете пре- и пост- обработки численных расчетов Salome-Meca 3.2 [10], расчет производился в пакете OpenFOAM 2.0 [1].

Для расчета турбулентного течения была выбрана k-ε модель турбулентности, задано условие прилипания для скорости ($U=0$) в качестве граничного, на вдув задана скорость гелия 56,8 м/с (рассчитана из известного значения для расхода гелия - 25 л/с). При расчете турбулентного потока используется система уравнений Навье-Стокса, для решения уравнений используется численный метод конечных объемов.

В ходе дальнейшей работы планируется:

- разработка солвера с учетом кинетики химических реакций кластеризации углерода в плазме дугового разряда, а также газодинамики турбулентного течения;
- улучшение расчетной сетки (измельчение в пристеночной области), расчет задачи на базе разработанного солвера;
- сравнение результатов численного расчета с экспериментальными данными, полученными в лаборатории ФТИ им. Иоффе, а также с результатами других исследователей.

ЛИТЕРАТУРА:

1. The Open Source Computational Fluid Dynamics (CFD) Toolbox: <http://www.openfoam.com/>
2. Yadav T. Proc. Symp. on Recent Advances in Chemistry and Physics of Fullerenes and Related Materials / Ed. R. Ruoff, K. Kadish. The Electrochemical Society Proceedings Series, 1994. Vol. PV94-24. P. 111–119.
3. Yadav T. // Ibid. P. 120–131.
4. Withers J.C., Loutfy R.O., Lowe T.P. // Fullerene Sci. Technol. 1997. Vol. 5. N 1. P. 1–31.
5. Чурилов Г.Н. К вопросу о переходе углеродной плазмы в фуллереновое состояние углерода // Красноярск: Институт физики СО РАН. 2000. – 18 с.
6. Saito Y., Inagaki M., Shinohara H., Nagoshima H., Okhohchi M., Anda Y., Chem. Phys. Lett., 200 (1992) 643.
7. Huczko A., Lange H., Byszewski, Full. Sci. & Technol., 4(3) (1996) 385.
8. Hunter J.M., Fye J.L., Jarrold M.F. // J. Chem. Phys. 1993. Vol. 3. P. 1785–1795. Hunter J.M., Fye J.L., Roskamp E.J.

9. Афанасьев Д., Блинов И., Богданов А. // ЖТФ. 1994. Т. 64. Вып. 10. С. 76–90.
10. Salome-Меса: <http://www.salome-platform.org/>