Исследование влияния азота на изменение состава ПРОПАН-БУТАН/ гелиевой плазмы ВДОЛЬ ОСИ квазиодномерной СТРУИ [[1]](#footnote-1)\*)

Шавелкина М.Б., Иванов П.П., Амиров Р.Х., Бочаров А.Н.

Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, [mshavelkina@gmail.com](mailto:mshavelkina@gmail.com)

Наноразмерные материалы, синтезированные при конверсии в плазме углеродсодержащих соединений различных классов, имеют конкретные составы или фазовые структуры [1].

Настоящая работа посвящена экспериментальному и теоретическому исследованию условий синтеза в плазменных струях графена, допированного атомами азота (N-графена), и изучению их состава.

Для генерирования плазменной струи применен плазмотрон постоянного тока мощностью 28-35 кВт с вихревой стабилизацией дуги. Конверсия смеси, состоящей из плазмообразующего газа (гелия с примесью азота) и прекурсора в виде смеси пропана и бутана, осуществлялась при давлении 350 Торр. Изменением соотношений расходов азота и гелия при массовом соотношении пропана и бутана 65:35 и при постоянной силе тока дуги, равной 350А, получены оптимальные условия синтеза N-графена с максимальным выходом.

Численное моделирование процесса проведено с помощью квазиодномерного подхода к описанию течения и предположения о локальном термодинамическом равновесии. Алгоритм расчета равновесия основан на минимизации функции Гиббса в пространстве координат реакций с учетом всех возможных состояний вещества - газового (включая ионизацию) и конденсированного (жидкого, твердого) методом последовательного приведения реакций, дополненным схемой оптимизации базиса. На каждом шаге решается уравнение закона действующих масс для одной реакции. Газовая фаза рассматривается как смесь идеальных химически реагирующих и ионизирующихся газов. Для конденсированного состояния используется модель нерастворимых чистых веществ. Термодинамические свойства индивидуальных веществ импортируются из банка ИВТАНТЕРМО [2].

В качестве исходного численного эксперимента принята конфигурация: расход гелия – 0.75 г/с, расход пропан-бутана – 0.097 г/с, давление – 350 Торр. По мере охлаждения плазмы пары углерода конденсируются в молекулы С60 и С80, которые известны как фуллерен и сажа. Их свойства, как индивидуальных веществ, можно импортировать из [3], где они идентифицированы как фуллерен и сажа.

Введение азота в среду гелия с прекурсором изменяет состав плазмы. Вместо С60 и С80 наблюдается появление молекул цианополиинов HC9N и HC11N, содержащие много атомов углерода.

При сравнении расчета с экспериментом, в котором формируются ,содержащие азот, графен и углеродные нанотрубки, возникает некоторое несоответствие, связанное с отсутствием набора этих индивидуальных веществ как в банке ИВТАНТЕРМО, так и в [3].

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант№ 18-08-00081.

Литература

1. TiwariJ.N. etal. Progress in Materials Science, 2012, 57, 724.
2. Belov G.V. et al. High Temperature, 2000, 38, 191.
3. Esfarjani S.A. PhD thesis, University of Toronto, 2013.

1. \*) [DOI – тезисы на английском](http://www.fpl.gpi.ru/Zvenigorod/XLVII/Pt/en/GB-Shavelkina_e.docx) [↑](#footnote-ref-1)