КИНЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ КОНВЕРСИИ УГЛЕВОДОРОДОВ В ОБЪЕМЕ ПЛАЗМЕННОЙ СТРУИ ПРИ СИНТЕЗЕ ГРАФЕНА [[1]](#footnote-1)\*)

Филимонова Е.А., Шавелкина М.Б.,Амиров Р.Х.,Иванов П.П.

Объединенный институт высоких температур РАН, г. Москва, Россия, helfil@mail.ru

Одним из распространенных методов получения нанокристаллических порошков является газофазный синтез. В этом случае химические процессы происходят вблизи или на холодной поверхности, что ограничивает производительность метода и делает зависимыми свойства продуктов синтеза от материала подложки. Для повышения качества наноструктур и производительности метода предлагается использовать в качестве среды газоразрядную плазму. Метод основан на разложении углеводородов в плазменных струях, создаваемых плазмотроном постоянного тока, при давлении несколько ниже атмосферного. Чтобы синтезировать конкретную углеродную наноструктуру в данных условиях, необходимо определить ключевые химические реакции, интервал температур для их эффективного протекания, состав промежуточных продуктов конверсии и температурный профиль.

Цель данной работы состояла в нахождении ведущих реакций для разных начальных составов газа; конечного состава смеси; зависимости газофазных продуктов от природы несущего газа и профиля температуры вдоль плазменного потока. Состав конечных и промежуточных (вдоль струи) продуктов, полученных в результате кинетического подхода, сравнивался с результатами, полученными в рамках термодинамического подхода. Рассматривалось три состава: I - CH4/N2, II - C3H8/C4H10/He и III - CH4/Ar при одинаковом давлении *P*=350 Торр. Максимальная температура на срезе сопла изменялась в диапазоне 8000-10000 К, конверсия в струе проходила в течение ~1 с, профили температуры были разные (разная скорость охлаждения струи). В экспериментах [1] для указанных выше условий для смеси III на выходе из реактора образуются малодефектные наноструктуры с латеральным размером до 2000 нм, что намного больше, чем при синтезе для других смесей.

В результате кинетических расчетов были выявлены различия в конверсии для трех смесей. Для смеси II концентрация электронов на срезе сопла была почти на порядок меньше, чем для смесей I и III. Это связано с тем, что потенциал ионизации гелия значительно выше, чем для азота и аргона. Ион-молекулярные и электрон-ионные реакции играют роль в течение первых нескольких миллисекунд. Основные химические реакции, которые влияют на появление зародышей из молекул C2 в результате образования перенасыщенного пара и выпадения твердой фазы, происходят в диапазоне *T*=4000-2500 К с участием радикала C2H [2]. Конечными продуктами в газовой фазе являются H2 и C2H2. Для смеси III струя имела резкую скорость охлаждения, и смесь уже к *t*=35 мс имела *T*~4000 K. Диапазон температур 4000-2500 К длился ~200 мс. Для смесей I и II длительность указанного диапазона была приблизительно такая же, однако, момент с *Т*~4000 К наступал к 380 мс. В результате, для смеси III оставалось значительно больше времени для роста твердых наночастиц, т.к. первые зародыши образовались значительно раньше. Аналогичным образом ведут себя C2H, С2 и углеродная твердая фаза (суммарно, включая графен) в термодинамическом расчете, где их рост начинался при *Т*~3200 К и прекращался при *Т*=2500 К, т.е. когда из объема исчезает C2H, и соответственно, С2, однако при *T*=4000-2500 К для достижения термодинамического равновесия не хватает времени.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Госзадание № 075-01056-22-00).

Литература

1. Shavelkina M. et al. J. Materials, 2020, v.13, p.1728.
2. Shavelkina M.B., Filimonova E.A., Amirov R.Kh. PSST, 2020, v.29, 025024.
1. \*) [DOI – тезисы на английском](http://www.fpl.gpi.ru/Zvenigorod/L/Pt/en/GC-Filimonova_e.docx) [↑](#footnote-ref-1)