

01;02;03

Термическая устойчивость фуллеренов

© В.И. Бородин, В.А. Трухачева

Петрозаводский государственный университет

E-mail: borvi@karelia.ru

Поступило в Редакцию 14 января 2004 г.

Исследуется вопрос о термической устойчивости фуллеренов, по которому в литературе наблюдаются разногласия. С помощью термодинамических расчетов определяется температура термической устойчивости фуллеренов C_{60} и C_{70} , а также ее зависимость от давления и соотношения в смеси углерода и буферного газа, в качестве которого выступают гелий и аргон.

Знание температуры устойчивости фуллеренов необходимо как для разработки технологий производства и очистки фуллеренов, так и для их применения. Вопрос о термической устойчивости фуллеренов рассматривался во многих работах, однако однозначного вывода из них сделать нельзя.

В работе [1] со ссылкой на [2] говорится, что молекула C_{60} сохраняет стабильность в инертной атмосфере аргона вплоть до температур ~ 1200 К. В ряде работ [3–5], со ссылкой в конечном итоге на одну и ту же статью [6], отмечается, что молекула C_{60} сохраняет свою термическую стабильность при температурах до 1700 К.

В других работах приводятся существенно более высокие температуры устойчивости фуллеренов. Так, в работе [7] со ссылкой на [8] утверждается, что разрушение молекул C_{60} и C_{70} в газовой фазе начинается при температурах 2650 и 2440 К соответственно. В упомянутой работе [3], со ссылками на [9,10], отмечается аномально высокая термическая стабильность C_{60} , которая теряет свою химическую структуру лишь при нагреве до температур выше 3000 К.

Для решения вопроса о термической устойчивости фуллеренов можно использовать их термодинамические характеристики. В настоящей работе были проведены термодинамические расчеты состояний смесей углерода с аргоном и гелием, основанные на достаточно надежных термодинамических данных для фуллеренов C_{60} и C_{70} , приведенных в статье [7].

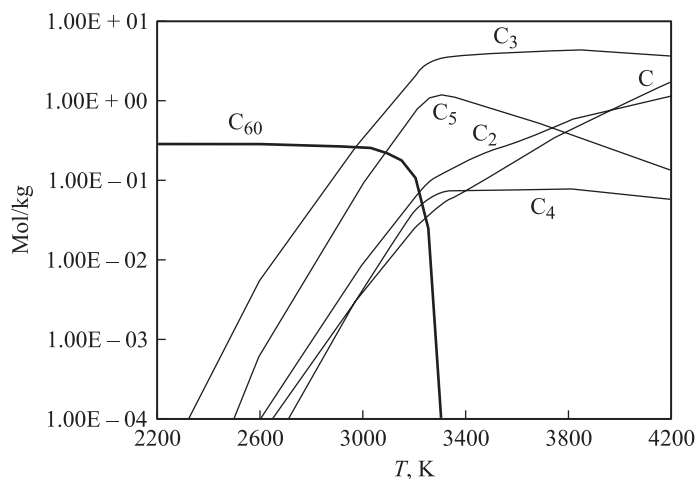


Рис. 1. Результаты термодинамического расчета квазиравновесного состава смеси углерода и аргона ($P = 0.1$ МПа, массовое соотношение C:Ar = 1:4).

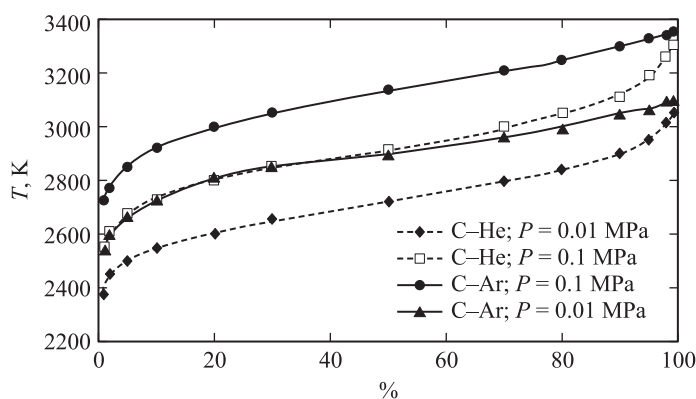


Рис. 2. Зависимость температуры устойчивости фуллера C_{60} от давления и соотношения масс углерода и буферного газа в смеси.

С использованием программы „АСТРА“ [11] были рассчитаны различные варианты состава квазиравновесной (без учета конденсированного углерода) газофазной системы, включающей первые кластеры углерода и фуллерен C_{60} , а также буферный газ (аргон, гелий).

Типичные результаты термодинамических расчетов температурной зависимости состава указанных смесей приведены на рис. 1. Видно, что при высоких температурах первые кластеры являются термически более устойчивыми по сравнению с фуллереном C_{60} , который, однако, в такой смеси оказывается устойчив до высокой температуры, превышающей 3000 К.

Результаты проведенных термодинамических расчетов показали, что температура устойчивости фуллеренов не является постоянной, а зависит от параметров смеси углерода и буферного газа. На рис. 2 приведены значения температуры устойчивости фуллерена C_{60} в зависимости от давления и соотношения в смеси углерода и буферного газа, в качестве которого выступают гелий и аргон.

В качестве температуры устойчивости бралась температура, при которой распад (диссоциации) подвергается 10% общего количества фуллерена (т.е. степень диссоциации фуллерена равна 0.1).

Видно, что с ростом содержания углерода в смеси термическая устойчивость фуллеренов возрастает, а при равных условиях в среде аргона она выше, чем в среде гелия.

Проведенные расчеты для фуллерена C_{70} приводят к результатам, отличающимся от аналогичных результатов для фуллерена C_{60} на несколько десятков градусов.

Работа выполнена при поддержке НОЦ „ПЛАЗМА“.

Список литературы

- [1] Елецкий А.В., Смирнов Б.М. // УФН. 1993. Т. 163. № 2. С. 33–60.
- [2] Millican J. et al. // Chem. Mater. V. 3. P. 386.
- [3] Елецкий А.В., Смирнов Б.М. // УФН. 1995. Т. 165. № 9. С. 977–1009.
- [4] Чурилов Г.Н. // ПТЭ. 2000. № 1. С. 5–15.
- [5] Сидоров Л.Н. // Соросовский образовательный журнал. 1998. № 3. С. 65.
- [6] Kolodney E., Tsipinyuk B., Budrevich A. // J. Chem. Phys. 1994. V. 100. P. 8542.
- [7] Дикий В.В., Кабо Г.Я. // Успехи химии. 2000. Т. 69. № 2. С. 107–117.
- [8] Sommer T., Kruse T., Roth P. // J. Phys. B. 1996. V. 29. P. 4955.
- [9] Zhang B.L. et al. // Phys. Rev. B. 1993. V. 48. P. 11381.
- [10] Kim S.G., Tomanek D. // Phys. Rev. Lett. 1994. V. 72. P. 2418.
- [11] Низкотемпературная плазма. Т. 3: Химия плазмы. Новосибирск: Наука, 1991. 428 с.