Жалында күйе бөлшектерінің және фуллерендердің түзілу механизмдері

Көміртек кластерлерінің пайда болуы, өсуі және құрылымдық өзгеруі

Негізгі ұғымдар

Күйе

Жалынның оттегі аз аймағында түзілетін көміртекке бай қатты бөлшектер. Құрамында ретсіз және графиттенген қабаттар болады.

Фуллерендер

Көміртек атомдары бесбұрышты және алтыбұрышты сақиналардан құралған жабық тор түзеді. Ең белгілі өкілі: C_{60}.

Ортақ негіз

Екі өнім де көмірсутектердің жоғары температурада ыдырауынан туған көміртек фрагменттері мен ароматты аралық бөлшектерден басталады.

Жалындағы реакциялық аймақтар

Төменнен жоғары қарай температура мен оттегі мөлшері өзгереді

1. Пиролиз аймағы	Отын мол, O_2 аз Көмірсутек радикалдары түзіледі
2. Нуклеация аймағы	ПАҚ молекулалары бірігеді Алғашқы ядролар пайда болады
3. Өсу аймағы	Бетке C_2H_2 және ПАҚ қосылады Бөлшек массасы артады
4. Тотығу аймағы	O_2 және OH бөлшектерді тотықтырады Күйенің бір бөлігі жойылады

Жалын бойымен қозғалыс

Бастапқы кезең: пиролиз және радикалдар

Көмірсутек

CH_4, C_2H_4, бензол және т.б.

жоғары T

Белсенді бөлшектер

H• CH_3• C_2H_3• C_2H_2 C_2 ұсақ кластерлер

қайта құралу

Ароматты сақиналар

бензол → ПАҚ

Маңызды шарт

Температура шамамен 1000–2000 K аралығына көтерілгенде C–C және C–H байланыстары үзіліп, радикалдық тізбектер жылдамдайды. Нақты шама отын түрі мен жалын режиміне тәуелді.

ПАҚ түзілуі: күйеге апаратын молекулалық жол

Ацетилен

C_2H_2

Бірінші сақина

C_6H_6

ПАҚ

2–6 сақина

Үлкен ПАҚ

жазық қабат

HACA механизмі

H жұлынып шығады → бос белсенді орын пайда болады → ацетилен қосылады → жаңа ароматты сақина жабылады.

HACA: Hydrogen-Abstraction / C_2H_2-Addition

Күйе ядросының пайда болуы

Үлкен ПАҚ молекулалары соқтығысып, тұрақты бастапқы бөлшек түзеді



Өлшемдік шек

Молекулалық кластер тұрақтанып, газ фазасынан қатты бөлшек күйіне өткен сәтте нуклеация аяқталады.

Күйе бөлшегінің өсуі және агрегатталуы

Беттік өсу

C_2H_2 және ПАҚ бөлшек бетіне қосылады

Коагуляция

Екі бөлшек соқтығысып, бір ірі бөлшекке айналады

Агрегатталу

Бастапқы сфералар тізбектелген құрылым түзеді

Карбонизация

H мөлшері азайып, көміртек қабаттары реттеледі

Нәтиже: өлшемі ондаған нанометр болатын бастапқы бөлшектер және олардың ірі агрегаттары

Күйенің тотығуы және эмиссиясы

Түзілу

Пиролиз
ПАҚ нуклеациясы
Беттік өсу
Коагуляция

теңгерім

Жойылу

O_2 арқылы тотығу
OH радикалымен шабуыл
Беткі көміртектің CO/CO_2-ге айналуы

Жалыннан шығатын күйе мөлшері түзілу жылдамдығы мен тотығу жылдамдығының айырмасына тәуелді.

Фуллерендердің түзілу механизмі

1

Көміртек буы

C, C_2 және шағын кластерлер

2

Тізбек пен сақина

Көміртек фрагменттері бірігеді

3

Иілген тор

Бесбұрыштар қабатты иеді

4

Тордың жабылуы

Қуысты көміртек қаңқасы түзіледі

5

Тұрақтану

C_{60}, C_{70} және басқа фуллерендер

Жабық тордың тұрақтылығы 12 бесбұрыштың болуына және алтыбұрыштардың санымен анықталатын өлшемге байланысты.

Күйе мен фуллерен түзілу жолдарын салыстыру

Көрсеткіш	Ортақ бастама	Күйе	Фуллерен
Негізгі аралық өнім	Радикалдар, ПАҚ	Үлкен ПАҚ, бөлшек ядросы	C_2 және көміртек кластерлері
Құрылым	Көміртек торы	Ретсіз/графиттенген қабаттар	Жабық бесбұрышты-алтыбұрышты тор
Қолайлы жағдай	Жоғары температура	Отынға бай жалын, баяу салқындау	Көміртек буы, тез салқындау
Соңғы өнім	Нанокөміртек	Агрегатталған қатты бөлшек	Жеке молекула тәрізді қуысты тор

Қорытынды

Көміртек өнімдерінің бағытын жалынның температурасы, оттегі мөлшері және салқындау жылдамдығы анықтайды.

01	**Күйе жолы**	Пиролиз → ПАҚ → нуклеация → беттік өсу → агрегат
02	**Фуллерен жолы**	Көміртек кластері → сақина → иілген тор → жабық қаңқа
03	**Практикалық мән**	Күйені азайту жану тиімділігін арттырады; фуллерен синтезі наноматериал алуға мүмкіндік береді

Назарларыңызға рақмет!