

**Моделирование динамики массопереноса в начальной стадии вспенивания
интеркалированного графита**
Маринчук Андрей Игоревич¹

студент

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

E-mail: RadMAI@yandex.ru

Пенографит, образующийся при вспенивании интеркалированного графита, получил широкое практическое применение при производстве различных технологических материалов: от графитовой фольги, до токопроводящей резины [1]. В литературе представлены различные теории, объясняющие процесс вспенивания, однако описания конкретных моделей не были предложены, несмотря на значительный массив полученных экспериментальных данных [2,3].

Процесс вспенивания, также называемый в англоязычной литературе «расслаиванием» (exfoliation), возможен только при использовании образцов с высокой степенью ориентации z-осей (перпендикулярных графеновым слоям) кристаллитов. В зависимости от температуры, при которой проводится процесс, он может быть как обратимым, так и необратимым. При обратимом вспенивании (температура нагрева до 300-350°C) образец удлиняется вдоль оси z в 20-30 раз, а при охлаждении кратность удлинения относительно первоначального размера, уменьшается до 2-3. Если вновь произвести нагревание образца, то кривая зависимости относительного расширения от температуры выйдет на кривую, полученную при первом цикле нагревания-охлаждения. При нагревании до более высоких температур (как правило, от 600 до 1200°C), может наблюдаться увеличение размера в несколько сотен раз, однако последующего значительного уменьшения размеров при охлаждении не происходит. Этот процесс называют необратимым вспениванием. В направлениях, перпендикулярных z, образец не расширяется [1].

Экспериментальные данные показывают, что при изменении количества интеркалята в пределах 3-10 стадий, степень расширения при вспенивании практически не изменяется [2], что позволяет разработать модель на основе следующих предположений: выходе части интеркалята из образца, нерасширение интеркалята в доменах кристаллической решетки, а также расширение интеркалята в зернограничной фазе (т.е., в пространстве между доменами) по закону идеального газа (в качестве упрощения). Построенная модель описывает обратимое вспенивание и основана на предположении о неизменности объема фазы доменов кристаллической решетки, напряжение упругой деформации (вдоль z-направления) которой компенсирует давление испаренного интеркалята.

Литература

1. Chung D.D.L. (1987) Review. Exfoliation of graphite // Journal of materials science **22**, pp. 4190-4198
2. Guy Furdin (1997) Exfoliation process and elaboration of new carbonaceous materials // Fuel Vol. 77, No. 6, pp. 479-485, 1998
3. Anderson S.H., Chung D.D.L. (1983) Exfoliation of intercalated graphite // Carbon Vol. 22, No. 3, pp. 253-263, 1984

¹ Автор выражает признательность с.н.с. Зеленко В.Л. за помощь в подготовке тезисов.