

Математическая модель с сосредоточенными параметрами для процесса терморасширения интеркалированных частиц

Соболев С.К.

МГУ им. М.В. Ломоносова, Химический факультет

Терморасширение соединений внедрения в графит (СВГ) является фазовым переходом, в результате которого из-за высокого давления происходит многократное увеличение объема интеркалированного графита вдоль рентгенографической оси «с». На малых временах деинтеркалирование является обратимым процессом благодаря конденсации интеркалята при охлаждении, но при резком нагревании процесс становится необратимым.

СВГ являются технологически значимыми для многих отраслей. Благодаря СВГ получают высокотемпературные уплотнительные материалы, набивки и прокладки, огнеупорные и изоляционные материалы, электроды, защитные слои для тиглей и др. Несмотря на огромную технологическую важность соединений внедрения, в литературе представлено крайне мало исследовательских работ в области процессов вспенивания и природы деинтеркалирования.

Цель исследования - на основе математической модели и теории разрушения Гриффитса оценить взаимозависимость внутреннего напряжения и процесса терморасширения (обратимого и необратимого) интеркалированной частицы.

В данной работе за основу принята модель интеркалированной частицы по Доуэллу (Dowell), в соответствии с которой основная масса интеркалята сосредоточена в доменно-кристаллической фазе. В ходе роста температуры происходит многократное увеличение внутреннего давления (до нескольких десятков атмосфер), что приводит к разрушению материала. Процесс терморасширения описывается системой кинетических уравнений первого порядка:

$$\begin{cases} \frac{d(1-\varepsilon)c_1}{dt} = -\kappa_1(T) (1-\varepsilon) [c_2^{eq} - c_2] \\ \frac{d(\varepsilon c_2)}{dt} = \kappa_1(T) (1-\varepsilon) [c_2^{eq} - c_2] - k_2(T) \varepsilon c_2 \end{cases}$$

Данная математическая модель вполне приемлемо описывает литературные экспериментальные данные по обратимому терморасширению СВГ.

Автор работы выражает огромную благодарность своему научному руководителю доктору физико-математических наук, профессору Хейфецу Л.И.