

# A GAS-DYNAMIC TECHNIQUE OF EXTRACTING OF FULLERENS FROM CARBON SOOT

N.M. Lototsky, Ye.V. Klochko\*, V.V. Solovey

A.N. Podgorny Institute for Mechanical Engineering Problems of National Academy of Science of the Ukraine, 2/10 Pozharsky Str., Kharkov, 61046 Ukraine

## Introduction

In many technologies of manufacturing of fullerenes an intermediate product is carbon soot. Besides fullerenes this soot contains carbon clusters and particles of amorphous carbon. So the extracting fullerenes from the soot is problem. The individual fraction of fullerenes cleared of extraneous impurity has higher functional value and has higher market cost. However, only methods of analytical chemistry are used for extracting of fullerenes now. Usually they need highly qualified personnel and low productivity resides in these techniques.

The new technique of extracting of fullerenes has been proposed in this paper. Flow-3D Flow Scientist company has been used for computational simulation. The realizability of this technique is shown. The fields of velocities and pressures of gas flow have been calculated for planned physical experiment.

## Results and discussion

In this problem the nozzle flow of gas into shell was considered. High of the shell is 150 mm and its diameter is 50 mm. Diameter of nuzzle is 5 mm. It has been calculated the flow of Newton's viscous fluid by use Naue-Stokes [1]. Applied to suspension carbon particles (clusters, fullerenes, microparticle of soot)  $F_{drag}$  aerodynamic drag force has been calculated in concordance with [2]:

$$F_{drag} = C_D \cdot N \cdot m \cdot v_d^2 \cdot \pi \cdot d^2 / 2 \quad (1)$$

where  $C_d$  – coefficient of aerodynamic drag;  $N$  – density of gas;  $m$  – mass of gas atom or gas molecule;  $v_d$  – drift velocity of suspension carbon particle;  $d$  – diameter of suspension carbon particle.

It was shown [3], that motion of suspension carbon microparticles in gas flow is described as motion of macroscopic body. Fulleren's coefficient of aerodynamic drag is:

$$C_D(S) = \frac{e^{-S^2}}{\sqrt{\pi}S^3} (1 + 2S^2) + \frac{4S^4 + 4S^2 - 1}{2S^4} \operatorname{erf}(S) \quad (2)$$

where:  $S = \frac{V_d}{V_{mp}}$ ;  $V_{mp} = \sqrt{2kT / m_{gas}}$ ;

$k$  – Boltzmann constant,  $T$  – working gas temperature,  $m_{gas}$  – mass of gas molecule.

Pressure varied in a range from 1 kPa to 2 kPa. Outflow velocity was within from 2 m/s to 68 m/s. Hydrogen or helium was chosen as working gas. It have been calculated the fields of flow velocity and pressure. Fig. 1 sows the obtained distribution of velocity. The results of these calculations have been used for calculation of carbon particle motion. The particle mixture consists of fine graphite powder,  $C_{60}$ ,  $C_{70}$ ,  $C_{90}$ .

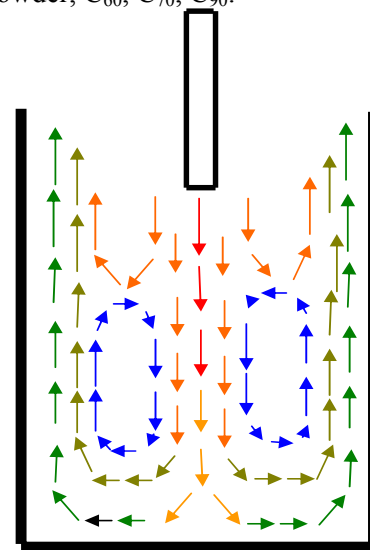


Fig 1. The calculated gas flow velocity field.

Modes of flow in which  $C_{60}$  are concentrated in the area of lowered pressure have been obtained. Fig. 2 shows typical distributions of carbon particles in different areas of the gas dynamic separator. Area 1 is area of convective gas motion with closed line of flow. Area 2 is section of output annual channel between the nuzzle and shall wall.

As can be seen on fig. 2, the concentration of graphite powder particles in reduced pressure area

\*Tel: 38 (0572) 944716 E-mail: klochko@ipmach.kharkov.ua

(area 2) is less than one percent. Whereas the concentrations of  $C_{60}$ ,  $C_{70}$ ,  $C_{90}$  are 93%, 5% and 2% respectively. Remaining  $C_{60}$  particles accumulated on the wall. And only insignificant share of  $C_{60}$  (less than one percent) is flies out.

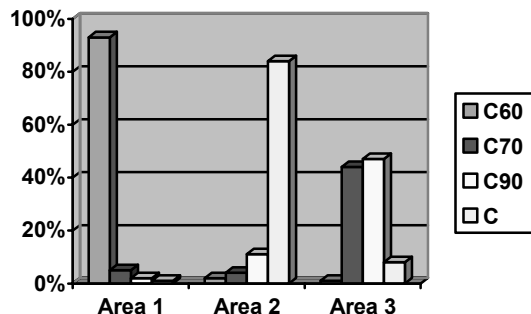


Fig. 2. Distributions of  $C_{60}$ ,  $C_{70}$ ,  $C_{90}$  and particles of graphite powder in different areas of gas dynamic separator.

The concentrations of graphite powder particles,  $C_{90}$ ,  $C_{70}$  on the wall of shell are 84%, 11%, and 4% respectively. The concentrations of graphite powder particles,  $C_{90}$ ,  $C_{70}$  in outflowing jet respectively equal 8%, 47%, 44%. This result has been obtained in following mode of gas flow: velocity of nozzle flow of gas into shell  $V=8$  m/s, at pressure of gas  $P=10$  Pa in case using of hydrogen as working gas. Some results have been obtained in case using of helium as working gas in following modes:  $p=24$  Pa and  $V=18$  m/s or  $P=5$  Pa and  $V=6$  m/s. The added histograms

show that  $C_{60}$  target yield are concentrated in the area of reduced pressure (area 1 in fig. 2).

Then it has been found a mode of flow of hydrogen in which  $C_{70}$  are accumulated in area of reduced pressure:  $V=5.5$  m/s,  $P=113$  Pa. In this case concentrations  $C_{60}$ ,  $C_{90}$  and  $C_{70}$  in the reduced pressure area are 5%, 3% and 92% respectively.

### Conclusion

It has been simulated the gas dynamic extracting of  $C_{60}$  fullerenes from other attendant fullerenes and microparticle of soot. The modes of gas flow in which concentration of target yield achieves to 93% has been found. A capability of a selective separation of fullerenes other mass has been shown. This technique is proposed as basis of extracting technology for industrial production of carbon nano materials.

### References

1. Lojtsansky L.G. Mechanics of fluids and gas. M: Nauka, 1970, (in Russian)
2. S.A. Schaaf and P.L. Chambre, in Fundamentals of gas dynamics, ed. by H.W. Emmons Princeton University Press, Princeton, 1958.
3. K. Nanbu, G. Wakayama. Drift velocity of  $C_{60}$  in gases follows rarefied gas dynamics. Proceedings int. Conf on Phenomena in ionized gases. XXV ICPIG. Ed by T. Goto Nagoya university Nagoya, Japan, 2001, vol. 3, p. 223-224.

# ГАЗОДИНАМИЧЕСКИЙ МЕТОД ИЗВЛЕЧЕНИЯ ФУЛЛЕРЕНОВ ИЗ УГЛЕРОДНОЙ САЖИ

**Н.М. Лотоцкий, Е.В. Клочко\*, В.В. Соловей**

Институт проблем машиностроения им. А.Н. Подгорного НАН Украины.  
ул. Дм. Пожарского, 2/10, Харьков, 61046 Украина

## Введение

Одной из актуальных тем стала тема разделения фуллеренов, так как при многих способах получения фуллеренов образуется сажа, содержащая наряду с фуллеренами аморфный и графитизированный углерод. Очищенная от посторонних примесей индивидуальная фракция фуллерена имеет более высокую функциональную ценность и обладает более высокой рыночной стоимостью. Однако, в настоящее время для выделения фуллеренов используют методы аналитической химии. Они требуют высококвалифицированного персонала и обладают низкой производительностью. Вследствие чего эти методы выделения фуллеренов из сажи не приспособлены для промышленного производства фуллеренов.

В данной статье предложен метод газодинамического разделения фуллерено-содержащей сажи. Для предварительной вычислительного эксперимента использовалась программа для газодинамических расчетов Flow-3D компании Flow Scientist. Показана реализуемость данного метода, а также рассчитаны газодинамические параметры планируемого физического эксперимента.

## Результаты и обсуждение

В задаче рассматривалось течение газа из сопла в стакан. Высота стакана 150 мм, диаметр дна стакана 50 мм, диаметр сопла 5 мм. Рассчитывалось течение вязкой ньютоновской жидкости, с использованием системы уравнений Навье – Стокса [1]. Сила аэродинамического сопротивления -  $F_{drag}$  взвешенных углеродных частиц (кластеров, различных типов фуллеренов, микрочастиц сажи) рассчитывалась с использованием формулы[2]

$$F_{drag} = C_D \cdot N \cdot m \cdot v_d^2 \cdot \pi \cdot d^2 / 2 \quad (1)$$

где  $C_d$  – коэффициент аэродинамического сопротивления;  $N$  – плотность газа;  $m$  – масса молекулы или атома газа;  $v_d$  – дрейфовая

скорость взвешенной в газе микрочастицы;  $d$  – диаметр микрочастицы.

Как было показано в работе [3], движение фуллеренов в газовых потоках можно описывать так, как если бы они были макроскопическими телами. Коэффициент сопротивления среды кластерам фуллерена, выражался формулой

$$C_D(S) = \frac{e^{-S^2}}{\sqrt{\pi}S^3} (1 + 2S^2) + \frac{4S^4 + 4S^2 - 1}{2S^4} \operatorname{erf}(S) \quad (2)$$

где  $S = \frac{V_d}{V_{mp}}$ ;  $V_{mp} = \sqrt{2kT / m_{gas}}$ ;

$k$  – постоянная Больцмана,  $T$  – температура рабочего газа,  $m_{gas}$  – молекулярная масса газа.

Давления варьировались в диапазоне от 2 Па до 1 кПа, скорости истечения газовой струи из сопла варьировались от 2 м/с до 68 м/с, рабочими газами брались водород или гелий, рассчитывались поля давлений и скоростей. Были получены поля скоростей и давлений (рис 1). Полученные поля давлений и скоростей были использованы для расчета движения взвешенных частиц различных типов. В смесь входили графитовый порошок, кластеры  $C_{60}$ ,  $C_{70}$ ,  $C_{90}$ .

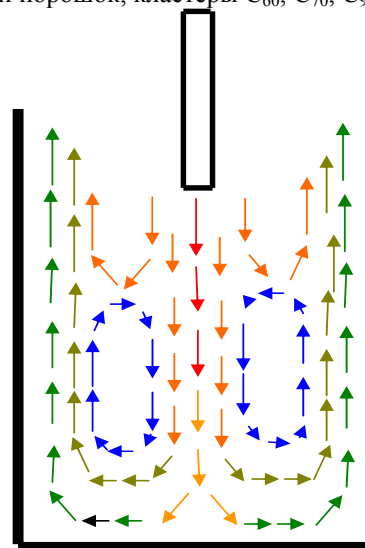


Рис 1. Поле скоростей газового потока.

\*Тел: 38 (0572) 944716 E-mail: klochko@ipmach.kharkov.ua

Были получены режимы течения в которых кластеры  $C_{60}$ , собираются в областях с пониженным давлением. На рис 2 показаны характерные распределения углеродных частиц в различных областях газодинамического сепаратора. Область 1 соответствует области замкнутых линий тока течения газа (рис 1). Область 2 соответствует стенкам стакана газодинамического сепаратора. Область 3 соответствует выходному сечению кольцевого канала между входным соплом и стаканом.

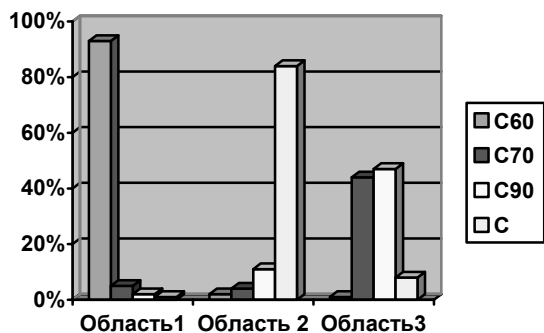


Рис 2. Концентрации фуллеренов и графитового порошка, в различных областях сепаратора.

Из приведенных на рис 2 гистограмм видно, что концентрация в области пониженного давления (Область 1) графитового порошка – меньше одного процента, 2% -  $C_{90}$ , 5% -  $C_{70}$ , 93% -  $C_{60}$ . Остальные частицы оседают на стенках (область 2). Концентрация на стенках графитового порошка 84%, 11% -  $C_{90}$ , 4% -  $C_{70}$ , 2% -  $C_{60}$ . В выходящем из газодинамического сепаратора потоке (область 3) присутствуют следующие концентрации компонентов смеси графитового порошка 8 %, 47% -  $C_{90}$ , 44% -  $C_{70}$ ,  $C_{60}$  – меньше одного процента. Эти режимы наблюдались при следующих параметрах: Для водорода при  $p = 10$  Па, и скорости  $V = 8$  м/с, При  $p = 24$  Па, и скорости  $V = 18$  м/с, для гелия при  $p = 5$  Па, и скорости  $V = 6$  м/с. Приведенные гистограммы свидетельствуют о том, что целевой продукт (кластер  $C_{60}$ )

концентрируются в области пониженного давления (Область 1, рис 2).

Был также проведен расчет для концентрации других типов фуллеренов в областях пониженного давления. Для  $C_{70}$  в атмосфере водорода был найден режим при котором в области пониженного давления концентрируется  $C_{70}$  (концентрация в области пониженного давления графитового порошка – меньше одного процента, 3 % -  $C_{90}$ , 5% -  $C_{60}$ , 92% -  $C_{70}$ ) при  $p = 113$  Па, и скорости  $V = 5,5$  м/с.

## Выводы

Проведено компьютерное моделирование процесса газодинамической сепарации углеродных фуллеренов  $C_{60}$  от сопутствующих фуллеренов других масс и микрочастиц сажи. В результате расчета найдены режимы в которых концентрация целевого продукта в области пониженного давления составляет 93%. Продемонстрирована возможность избирательной сепарации фуллеренов другой массы путем варьирования газодинамическими параметрами. Данный метод предлагается в качестве основы технологического процесса выделения фуллеренов  $C_{60}$  в условиях промышленного производства углеродных наноматериалов.

## Литература

1. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. М. :Наука, 1970.
2. S.A. Schaaf and P.L. Chambre, in Fundamentals of gas dynamics, ed. by H.W. Emmons Princeton University Press, Princeton, 1958.
3. K. Nanbu, G. Wakayama. Drift velocity of  $C_{60}$  in gases follows rarefied gas dynamics. Proceedings int. Conf on Phenomena in ionized gases. XXV ICPIG. Ed by T. Goto Nagoya university Nagoya, Japan, 2001, vol.3, p. 223-224.