

气相爆轰数值分析及碳与碳包铁纳米材料合成

闫鸿浩, 赵铁军, 李晓杰, 吴林松

(大连理工大学 工业装备结构分析国家重点实验室, 辽宁 大连 116024)

摘 要: 从理论上分析了气相爆轰反应中爆轰产物组分与形成稳定爆轰的条件。通过以氧气与苯、氧气与溶有二茂铁的苯为原料, 用气相爆轰形式制备了碳纳米材料与碳包铁纳米颗粒。爆炸产物经 XRD 与 TEM 表征发现, 碳纳米材料呈球或准球状, 颗粒尺寸在 10~30 nm, 分散性较差。团簇区主要以无定型碳为主, 分散区有少量洋葱状富勒烯。游离态碳与铁物质的量比对碳包铁的形貌结构有影响, 其比值在 10~28 时, 碳包铁纳米颗粒呈球状, 核/壳结构明显, 分散性较好; 大于 50 时, 其形貌结构发生变化, 部分碳以片状结构存在。

关键词: 碳纳米材料; 气相爆轰法; 氧气与苯; 碳包铁

中图分类号: O389

文献标识码: A

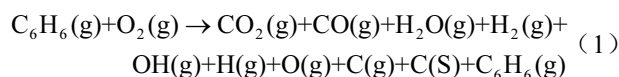
文章编号: 1002-185X(2018)02-0612-06

碳纳米材料包括碳纳米球、纳米金刚石、石墨烯、碳纳米管、碳包覆金属纳米颗粒等, 这类纳米材料具有某些特殊性能, 例如碳纳米球与纳米金刚石的润滑作用、碳纳米管的储氢功能^[1]、石墨烯在新能源方面的应用^[2]。一些碳包覆金属纳米材料可应用于电磁领域^[3,4]、生物医学领域的探索^[5,6]等。这就需要一种操作简单、控制容易、成本较低、产物纯净的制备方法。2008 年, Sun 等^[7]用石墨、硝酸、硝基甲烷制成液体炸药, 制备的纳米石墨烯片的表面积比原料石墨大 8 倍, 表明爆轰法是可以实现碳纳米材料制备的方法。2013 年, Nepal 等^[8]以乙炔作为反应气体用气相爆轰法合成了纳米石墨烯片, 发现其大小随着缺陷的减小而增大, 氧气含量增大时, 比表面积呈增大趋势。Yan 等^[9,10]以氢气/氧气、氢气/空气作为爆源, 二茂铁作为碳源与铁源, 制备了比凝固态炸药爆轰法更纯净的碳包铁纳米颗粒。由于二茂铁中碳与铁原子个数是一定的, 无法调节二者的比值, 对研究游离态碳与铁的物质的量比对碳包铁的影响造成一定的困难。因为二茂铁易溶于苯, 二者均易于升华, 所以, 按照 Nepal 与 Yan 的研究结果^[8-10], 用氧气与苯有可能制备出碳纳米材料, 用氧气与二茂铁的苯溶液也有可能制备出碳包覆铁纳米颗粒。为此, 本研究对气相爆轰反应的数值进行分析, 计算反应后爆炸产物中的游离态碳的量, 并通过控制二茂铁的用量, 来研究游离态碳与铁的物质的量比对碳包铁制备的影响。

1 气相爆轰的数值分析

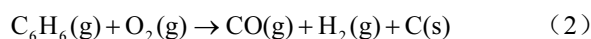
1.1 用 STANJAN 程序对爆轰产物组分的分析

用气相爆轰法合成纳米材料时, 需预先掌握爆轰产物的平衡组分。以苯与氧气爆轰反应为例, 采用美国斯坦福大学开发的 STANJAN 程序^[11]计算爆轰产物的平衡组分。该程序以吉布斯最小自由能原理计算产物各组分。运用该程序, 需给出初试条件。为此, 假定初始压强 P_0 为 0.05 MPa、温度 T_0 为 428.15 K, 苯的物质的量 $n(\text{C}_6\text{H}_6)$ 为 1 mol。平衡时压强 P 为 3 MPa、温度 T 为 3000 K。假设化学反应方程式为:



用 $V(\text{O}_2)/V(\text{C}_6\text{H}_6)$ 表示初始状态下反应的化学计量比, $V(i)/V(\text{C}_6\text{H}_6)$ 表示生成物组分 i 与初始状态下苯的化学计量比。图 1 为反应后生成物各组分相对初始状态苯的含量。

从图 1 中发现, $\text{H}(\text{g})$ 、 $\text{OH}(\text{g})$ 、 $\text{O}(\text{g})$ 相对生成量很少; $\text{C}(\text{g})$ 、 $\text{C}_6\text{H}_6(\text{g})$ 相对生成量极少。当 $V(\text{O}_2)/V(\text{C}_6\text{H}_6)=3$ 时, 爆炸产物的变化曲线有明显的拐点, 随着氧含量的减小, $\text{H}_2(\text{g})$ 的相对产量保持不变, $\text{CO}(\text{g})$ 的相对产量从最高值直线下降, $\text{C}(\text{s})$ 的相对含量从零开始直线上升。因此, 该化学方程式可简化为:



可见, 要想合成碳纳米材料, 必须使产物中存在

收稿日期: 2017-02-20

基金项目: 国家自然科学基金 (10872044, 10602013, 1097205, 10902023)

作者简介: 闫鸿浩, 男, 1974 年生, 博士, 副研究员, 大连理工大学工业装备结构分析国家重点实验室, 辽宁 大连 116024, 电话: 0411-84708397, E-mail: yanh2010@qq.com

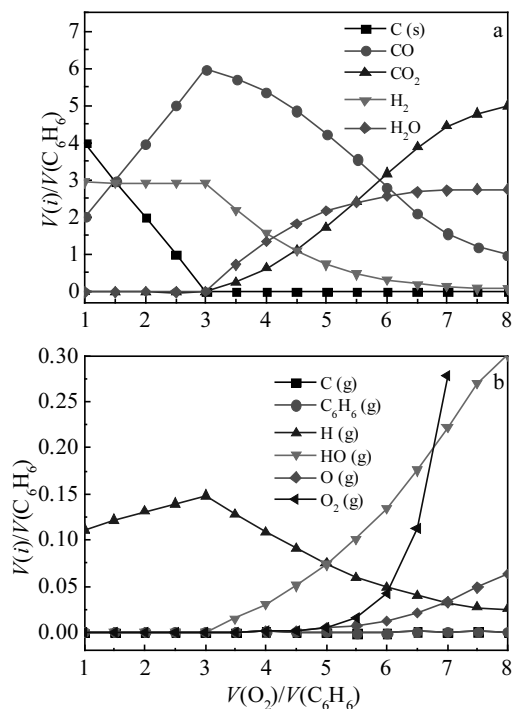


图1 燃烧气体与燃烧产物平衡组分的关系

Fig.1 Relationship of combustion gas and combustion products

游离态碳，因此，反应物的化学计量须满足 $V(\text{O}_2)/V(\text{C}_6\text{H}_6) < 3$ 。

为了考察压强与温度对反应产物的影响，设定初始压强 P_0 为 0.05 MPa、温度 T_0 为 428.15 K、 $n(\text{C}_6\text{H}_6)$ 为 1 mol、 $n(\text{O}_2)$ 为 2.5 mol，计算 $\text{CO}(\text{g})$ 、 $\text{H}_2(\text{g})$ 、 $\text{C}(\text{s})$ 、 $\text{CO}_2(\text{g})$ 、 $\text{H}_2\text{O}(\text{g})$ 相对含量随温度、压强的变化，见图 2。

可见，固定 P 不变，当 $T < 1500$ K 时，随着化学反应区温度的降低，化学反应中的 $\text{CO}_2(\text{g})$ 、 $\text{H}_2\text{O}(\text{g})$ 、 $\text{C}(\text{s})$ 含量将越来越多，而 $\text{CO}(\text{g})$ 、 $\text{H}_2(\text{g})$ 的生成量相应不断减少以至逐渐消失。当 $T > 1500$ K 时，生成物的含量相对稳定，而 $\text{H}_2(\text{g})$ 含量的降低是由于高温时被分解为 $\text{H}(\text{g})$ 、 $\text{OH}(\text{g})$ 。此外，当 T 不变时，压强 P 的改变对生成物的含量影响非常小。

因此，在气相爆轰（燃）合成碳纳米材料的实验中，要生成游离态碳，并形成稳定的化学反应，初始气体必须满足 $V(\text{O}_2)/V(\text{C}_6\text{H}_6) < 3$ ，爆炸反应区的温度（爆温）应该满足 $T > 1500$ K 的条件。

1.2 爆轰参数的计算

由于爆轰反应瞬间完成，因而可近似当作定容过程，一般用定容热效应 Q_v 来表示爆热。根据热力学第一定律，可知定容热效应 Q_v 和 Q_p 的关系：

$$Q_v = Q_p + p(V_j - V_i) \quad (3)$$

假设气体爆炸前后温度不变，由理想气体状态方

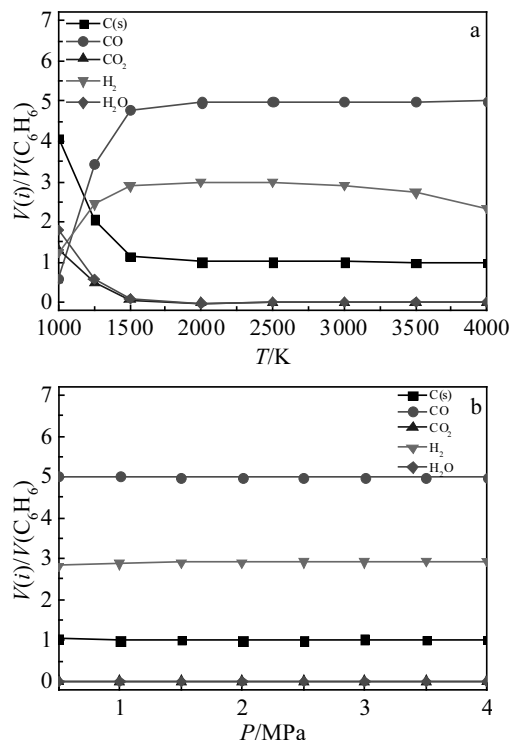


图2 平衡状态的温度和压力对爆炸产物的影响

Fig.2 Effects of equilibrium temperature (a) and pressure (b) on explosion products

程得：

$$P(V_j - V_i) = (n_j - n_i)RT \quad (4)$$

式中， R 是理想气体的普适常数 ($8.314 \text{ J/mol}\cdot\text{K}$)， n_i 、 n_j 特指反应前后的气态组分的摩尔数。取 $T = 298 \text{ K}$ ，将式 (4) 代入式 (3) 则有：

$$Q_v = Q_p + 2.478(n_j - n_i) \quad (5)$$

爆炸气体的定压热效应 Q_p 可由系统的焓增计算：

$$Q_p = -\Delta H = -(\sum n_j \Delta_f H_m^\ominus(\text{pro}) - \sum n_j \Delta_f H_m^\ominus(\text{rea})) \quad (6)$$

爆温计算时，假设爆炸过程是绝热的，所释放的热量全部用来加热爆炸产物。假设定压热容 C_v 仅是温度 T 的函数，则定压爆热可表示为：

$$Q_v = \int_{T_0}^{T_j} C_v dT = t \bar{C}_v = (T_j - T_0) \sum n_j \bar{C}_{vj} \quad (7)$$

式中， $t = T_j - T_0$ 为净增温度； $\bar{C}_{vj}$ 是第 j 爆炸产物从 T_0 加热到 T_j 过程中的平均摩尔定压热容，单位是 $\text{J/mol}\cdot\text{K}$ ； $\bar{C}_v = \sum n_j \bar{C}_{vj}$ 是全部爆轰产物的平均热容。对于常见的爆炸产物，在温度低于 4000°C 时，可近似使用卡斯特平均摩尔定容热容式：

$$\bar{C}_v = a_i + b_i t \quad (8)$$

由式 (7) 可知，全部爆轰产物的平均摩尔定容热容可写为：

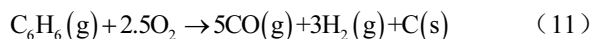
$$\bar{C}_v = A + Bt \quad (9)$$

其中, $A = \sum n_i a_i$, $B = \sum n_i b_i$ 。将式 (8), (9) 代入式 (7) 中, 可解得:

$$T_j - T_0 = \frac{-A + \sqrt{A^2 + 4BQ_v}}{2B} \quad (10)$$

用式 (5)、(6) 可计算定压爆热; 然后用式 (10) 可计算体系的爆温。

若 $n(\text{C}_6\text{H}_6) = 1 \text{ mol}$ 、 $n(\text{O}_2) = 2.5 \text{ mol}$, 则氧气与苯的化学反应方程式为:



在 400 K 时的化学反应, 由无机材料热力学数据知, $\Delta_f H_m^\ominus(400 \text{ K}) = -628.33 \text{ kJ/mol}$ 。反应气体的摩尔质量为 $45.17 \times 10^{-3} \text{ kg/mol}$ 。那么此时的爆热、爆温计算结果如下:

$$Q_v = 639.48 \text{ kJ/mol}; T_j = 3203.7 \text{ K}.$$

从爆温的计算可知, 氧气与苯的爆轰过程的化学反应方程式即为 (1) 式, 满足有游离态碳生成且能保证爆轰时化学反应稳定。

2 实 验

实验所用设备与 Yan 等^[12]气相爆轰法制备二氧化钛相同, 气体控制方法与之相似。

2.1 碳纳米材料的制备

本实验是以氧气与苯的混合物作为爆源及前驱体, 其用量、初始条件见表 1。实验步骤如下:

将气相爆轰管加热到 120 °C 后, 抽真空并通入一定量氧气, 使其压强达到设计的数值; 用注射器抽取一定量的苯溶液注入爆轰管内; 继续加热 20 min, 以使苯蒸气扩散均匀, 之后引爆气体; 爆炸产物沉积 30 min 后, 收集附着在管壁的产物。

2.2 碳包铁纳米材料的制备

该实验所用材料为苯、二茂铁与氧气。初始温度为 150 °C 左右, 分别将溶有 0.190、0.200、0.500、0.900 g 二茂铁的 2.7 mL 苯溶液用注射器注入爆轰管。其他操作与碳纳米材料的制备相似。各材料用量、初始条件见表 2。

用 X 射线衍射仪 (D/MAX-2400 型, Cu 靶, 管电压 40 kV, 管电流 30 A, 波长 0.15406 nm, 最小步长

表 1 1#~3#实验初始条件

Table 1 Initial conditions of 1#~3# experiment

No.	Oxygen partial pressure/MPa	$V(\text{C}_6\text{H}_6)/\text{mL}$	$n(\text{O}_2/\text{C}_6\text{H}_6)$
1#	0.040	3.4	2.50
2#	0.029	3.0	2.07
3#	0.029	3.4	1.81

表 2 4#~7#实验的初始条件

Table 2 Initial conditions of 4#~7# experiments

No.	Oxygen partial pressure/MPa	$V(\text{C}_6\text{H}_6)/\text{mL}$	Ferrocene/g
4#	0.03	2.7	0.190
5#	0.03	2.7	0.200
6#	0.03	2.7	0.500
7#	0.03	2.7	0.900

0.001°, 可扫描角度 6°~163°), 透射电子显微镜 (型号 Tecnai G220 S-twin, 美国 FEI 公司生产) 对样品的结构、形态进行表征。

3 结果与分析

3.1 碳纳米材料的性状

3.1.1 样品中各元素物质的量分析

用 STANJAN 程序对 3 组实验中 C、H、O 等元素进行分析, 结果见表 3。发现 1#、2#、3#实验中爆轰后生成游离态碳的数量依次递增, 分别为 0.0389、0.0644 和 0.0914 mol。1#与 3#实验相比, 反应气体中碳元素和氢元素的摩尔数相等而氧元素含量更高, 因而爆炸过程中气体燃烧更充分, 爆温以及爆热也会相对更高。2#与 3#实验相比, 反应气体中氧元素摩尔数相等而碳元素和氢元素数量较少, 那么反应过程中燃烧也将更充分而导致爆温和爆热相对升高。这些初始状态的微小变化, 可能会对爆炸气体反应区间的热力学状态和化学状态产生很大的影响, 进而也会影响碳纳米材料的生长。

3.1.2 样品 XRD 分析

图 3 是 1#、2#、3#样品的 XRD 图谱。可以看到, 3 个样品没有特别强的衍射峰出现 (尤其在 20°~30°之间为弥散状), 说明爆轰产物是以非晶态为主。2 θ 在 26°与 44°分别对应石墨结构的 (002) 和 (100) 晶面, 说明产物是以无定形碳为主, 并且部分无定形碳已经具有了石墨化的特征。相比较而言, 3#样品的鼓包最为尖锐, 其石墨化程度最高。可见, 三者爆轰产物中主要是石墨化的无定形碳, 主要是以非晶型为主。

3.1.3 样品的 TEM 及 HRTEM 分析

从图 4 中 1#~3#样品的 TEM 照片可以观察到爆轰产物的形貌特征。图 4 (a1, a2), 4 (b1, b2), 4 (c1, c2) 显示的是团簇在一起的球状、准球状纳米颗粒, 其尺寸分别在 10~20、10~20、20~30 nm 之间。结合表 3,

表 3 样品中元素的物质的量

Table 3 Amount of substance elements of samples (mol)

No.	C	H	O	C(s)
1#	0.2298	0.2298	0.1909	0.0389
2#	0.2028	0.2028	0.1384	0.0644
3#	0.2298	0.2298	0.1384	0.0914

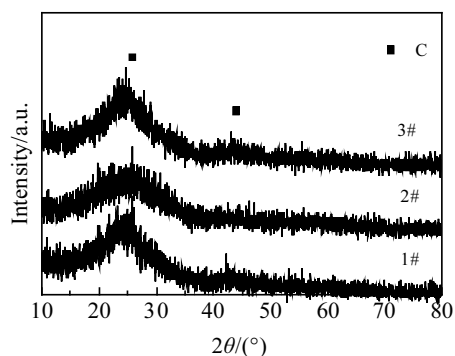


图3 1#~3#样品的 XRD 图谱

Fig.3 XRD patterns of samples 1#~3#

可以简单分析初始条件对合成碳纳米材料的影响。通过对比图4 (a1, a2), 4 (b1, b2), 4 (c1, c2) 可知, 随着反应气体中氧气含量的降低, 爆炸产生的游离态碳的

浓度升高, 而所生成的碳纳米颗粒尺寸变大, 这与 Nepal 等^[8]的研究相吻合。可见生成碳纳米颗粒的尺寸依赖于两者的浓度大小, 也依赖于氧气与苯的浓度比; 苯的相对浓度越低, 爆炸产生的游离态碳浓度相对越低, 生成的纳米颗粒尺寸越小。仔细观察还可以看出, 3 个样品的碳纳米颗粒有一定的层状结构特征, 这个现象在图 4b1, 4b2 中体现得最为明显。当然, 仅从以上的照片, 并不能完全断定碳纳米颗粒的内部结构, 故选取 2#样品利用高分辨率透射电子显微镜进一步表征微观结构。

图 5 是 2#样品的 HRTEM 照片。从图 5a 可以看到, 在碳纳米颗粒团簇区域碳以无定型碳为主, 在碳纳米颗粒较分散区域有大量的生长无序的层状石墨结构和一些层层包覆的碳纳米颗粒。图 5b 和 5c 表明, 样品中有层层包覆的洋葱状富勒烯生成, 碳层之间的间距大约 0.34 nm, 符合石墨层间距的大小, 与文献 [13,14]得到的样品区别不大。

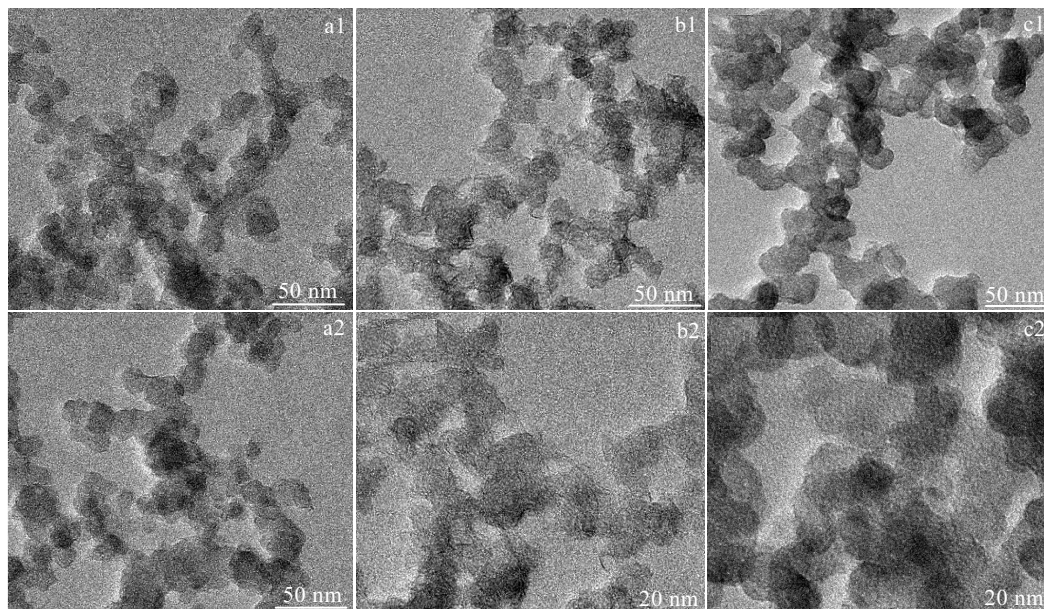


图4 1#~3#样品的 TEM 照片

Fig.4 TEM images of explosion products of sample 1# (a1, a2); 2# (b1, b2); 3# (c1, c2)

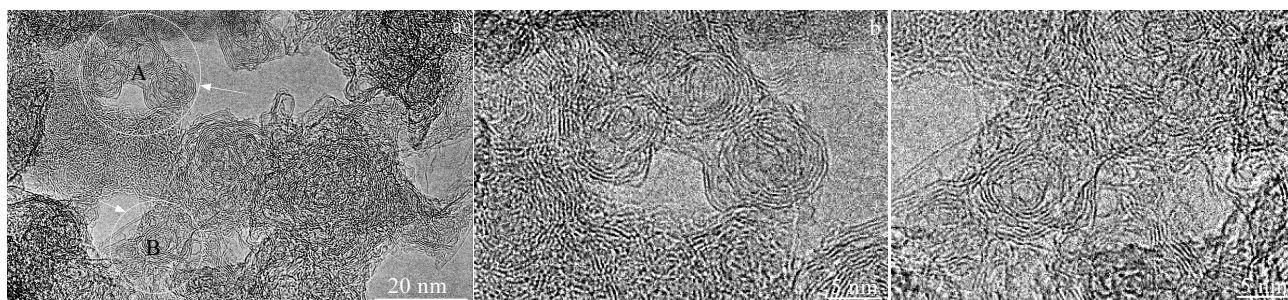


图5 2#样品的 HRTEM 照片

Fig.5 HRTEM images of 2# explosion products (a) and enlargement of area A (b) and B (c) in Fig.5a

3.2 碳包铁纳米材料的性状

3.2.1 样品中各元素物质的量分析

用 STANJAN 程序对 4 组实验中 C、H、O 等元素进行分析, 结果见表 4。对比 4#~7#实验, 可见反应气体中氧元素物质的量基本保持不变, 爆炸固体产物游离态碳与铁的物质的量比分别为 57.520、54.847、28.058、20.032。

3.2.2 样品 XRD 分析

图 6 是 4~7#样品的 XRD 图谱。从图 6 可以看出, 4#、5#、6#样品主要在 44.67°、65.02°、82.33°附近有非常明显的衍射峰, 对应着 α -Fe (JCPDS no.06-0696) 的 (110)、(200)、(221) 3 个晶面衍射峰。除此以外, 其他位置的衍射峰是碳铁化合物的衍射峰 (图中用“▼”标示), 其主要成分是 Fe_3C 。说明 4#、5#、6#样品中物质主要是 α -Fe 和碳化铁。在 7#样品中, α -Fe 和碳化铁的衍射峰变得非常弱, 说明随着游离态碳与铁的比例减小, 产物中铁相的结晶度逐渐下降, 而碳化铁的相对含量逐渐增大。除此以外, 5#、6#、7#样品中在 20°~30°之间有一个较弱的大鼓包, 7#样品最为明显, 说明产物中有大量的无定形碳, 且相对含量呈增大趋势。结合表 4 的数据可看出, 随爆炸产物中游离态碳与铁的物质的量比的减小, 所形成的碳包铁纳米材料中铁相减少而碳化铁的相对含量逐渐增多。

通过 Scherrer 公式计算爆炸产物的晶粒尺寸, 结果见表 5。

从表 5 可知, 金属核晶粒尺度均在 10~17 nm 之间, 大小较均匀, 区别不是很明显。

3.2.3 样品的 TEM 及 HRTEM 分析

从图 7 的 4~7#样品 TEM 照片中可清晰地看到, 4 组样品中均存在明显的核/壳结构, 结合图 6 的 XRD 分析可知, 其为碳包铁/碳化铁纳米颗粒。图 7a1, 7a2 中

碳包覆纳米颗粒的形貌不一, 大小不均, 某些碳层具有一定的褶皱, 与石墨烯薄片类似。图 7b1, 7b2 中的核/壳结构的包覆层外形成了具有鲜明褶皱和卷曲特征大

表 4 实验中元素的物质的量

Table 4 Amount of substance elements of samples						
No.	C/mol	H/mol	O/mol	Fe/mol	C(s)/mol	$n(\text{C(s)}/\text{Fe})$
4#	0.1929	0.1929	0.1340	0.00100	0.0589	57.520
5#	0.1933	0.1933	0.1343	0.00108	0.0590	54.847
6#	0.2094	0.2094	0.1340	0.00269	0.0754	28.058
7#	0.2309	0.2309	0.1340	0.00484	0.0969	20.032

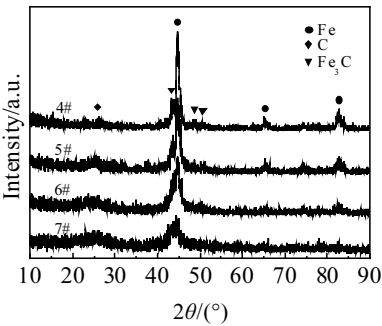


图 6 4#、5#、6#、7#爆炸产物的 XRD 图谱
Fig.6 XRD patterns of 4#, 5#, 6# and 7# explosion products

表 5 爆炸产物的平均晶粒度

Table 5 Mean grain size (D) of detonation products				
No.	Phases	$2\theta/(\circ)$	FWHM	D/nm
4#	Fe	44.681	0.755	11
	Fe_3C	43.541	0.541	16
5#	Fe	44.740	0.598	14
	Fe_3C	43.560	0.492	17
6#	Fe	44.898	0.749	11
	Fe_3C	43.560	0.538	16
7#	Fe	44.759	0.651	13
	Fe_3C	43.660	0.846	10

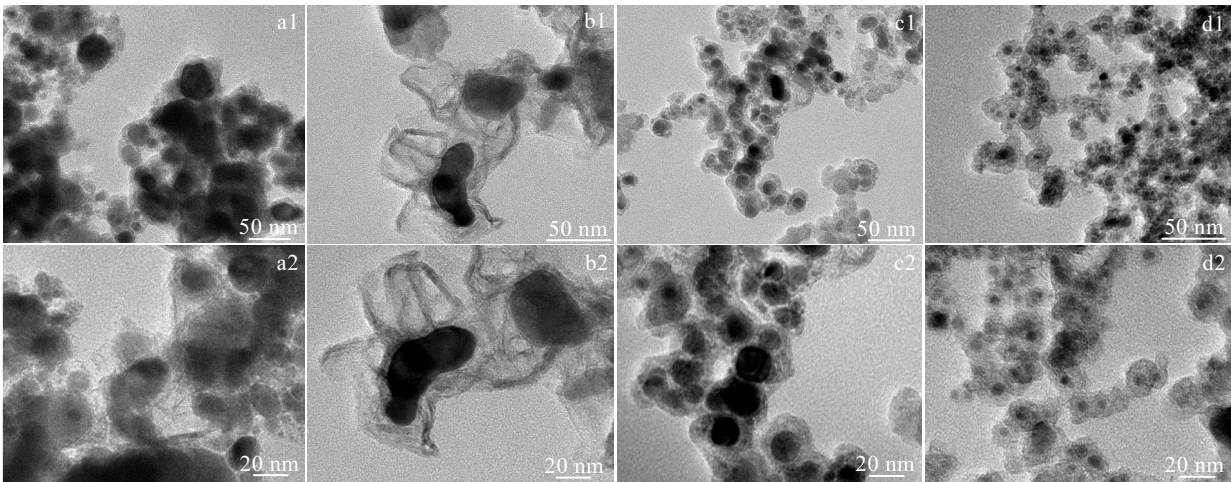


图 7 样品 4#、5#、6#、7#的 TEM 照片
Fig.7 TEM images of 4# (a1, a2), 5# (b1, b2), 6# (c1, c2) and 7# (d1, d2) explosion products

面积片状碳结构。外延的片状碳结构面积大约为 $100\text{ nm} \times 100\text{ nm}$, 可以推断是薄层石墨或者很薄的石墨烯。图 7a1, 7a2 与 7b1, 7b2 出现石墨烯薄片, 与游离态碳的相对含量较高有关, 再加上纳米铁球的催化作用, 形成了石墨烯结构。图 7c1, 7c2 中的碳包覆纳米颗粒大小均匀、分散性良好、核/壳结构较理想, 其中碳包覆纳米颗粒的晶核尺寸在 $5\sim 20\text{ nm}$ 之间, 碳层厚度与内部晶核尺寸相当。图 7d1, 7d2 中碳包覆金属纳米颗粒比图 7c1, 7c2 中核/壳结构更理想, 分散性良好, 金属核尺寸在 $1\sim 10\text{ nm}$ 之间, 碳壳厚度与晶核大小相当。

可见, 随着游离态碳与铁的物质质量比减小, 即二茂铁含量的增加, 生成的碳包覆纳米颗粒的金属核不断减小, 且形貌越来越趋向于均匀的球形。当该比例高于一定数值时, 导致碳形成大量的片状结构。结合文献[9,10]可知, 游离态碳与铁的物质质量比为 $10\sim 28$ 时, 可制备出球状、大小均匀、分散性很好的碳包铁纳米颗粒。

4 结 论

1) 碳纳米颗粒呈球形或准球形, 颗粒团簇现象明显, 颗粒大小在 $10\sim 30\text{ nm}$ 之间。在碳纳米颗粒团簇区域, 产物以无定形碳为主; 在碳纳米颗粒较分散区域有大量的生长无序的层状的石墨结构和少量洋葱状富勒烯。

2) 碳包铁纳米颗粒有良好的核/壳结构, 呈球形, 颗粒大小 $30\sim 50\text{ nm}$ 之间。爆炸产物中游离态碳与铁物质的量比对碳包铁的制备有很大的影响, 该数值在 $10\sim 28$ 时, 可制备出具有良好球形核/壳结构, 大小均匀, 分散性较好的碳包铁纳米颗粒。若游离态碳与铁比例超过 50, 则会出现片状的碳结构。

参考文献 References

- [1] Azizi S, Salah M, Nefzi H *et al.* *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2015, 648: 244
- [2] Kaskhedikar N A, Maier J. *Advanced Materials*[J], 2009, 21(25-26): 2664
- [3] Szczytko J, Osewski P, Bystrzejewski M *et al.* *Acta Physica Polonica A*[J], 2007, 112(2): 305
- [4] Wang Y, Wei W, Maspoch D *et al.* *Nano Letters*[J], 2008, 8(11): 3761
- [5] Grudzinski I P, Bystrzejewski M, Cywinska M A *et al.* *Journal of Applied Toxicology*[J], 2014, 34(4): 380
- [6] Boncel S, Herman A P, Walczak K Z. *Journal of Materials Chemistry*[J], 2012, 22(1): 31
- [7] Sun G, Li X, Qu Y *et al.* *Materials Letters*[J], 2008, 62(4-5): 703
- [8] Nepal A, Singh G P, Flanders B N *et al.* *Nanotechnology*[J], 2013, 24: 1
- [9] Yan H, Zhao T, Li X *et al.* *Combustion Explosion and Shock Waves*[J], 2015, 51(4): 495
- [10] Yan Honghao(闫鸿浩), Hun Changhong(浑长宏), Li Xiaojie(李晓杰) *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2015, 44(9): 2152
- [11] Bishnu P S, Hamiroune D, Metghalchi M *et al.* *Combustion Theory and Modelling*[J], 1997, 1(3): 295
- [12] Yan H H, Huang X C, Xi S X. *Combustion Explosion and Shock Waves*[J], 2014, 50(2): 192
- [13] Goel A, Hebgen P, Vander S J B *et al.* *Carbon*[J], 2002, 40(2): 177
- [14] Gubarevich A V, Kitamura J, Usaba S *et al.* *Carbon*[J], 2003, 41(13): 2601

Numerical Analysis of Gaseous Detonation and Preparation of Carbon and Carbon Coated Iron Nano Materials

Yan Honghao, Zhao Tiejun, Li Xiaojie, Wu Linsong

(State Key Laboratory of Structural Analysis for Industrial Equipment, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China)

Abstract: The condition of steady gaseous detonation and detonation product composition were analyzed theoretically. Nano carbon material and carbon coated iron nanoparticles were prepared by a gaseous detonation method with oxygen and benzene, oxygen and benzene dissolved ferrocene, respectively. Explosion products were characterized by X-ray diffraction and transmission electron microscope. Results show that carbon nano materials are spherical or quasi-spherical, the particle size range is $10\sim 30\text{ nm}$, and dispersity is poor. The cluster area is mainly amorphous carbon, while a few onion-like fullerenes exist in dispersing region. The molar ratio of free carbon and iron has an influence on morphology and structure of carbon coated iron nanoparticles. When the molar ratio value range is $10\sim 28$, carbon coated iron nanoparticles can be prepared, which are spherical, with a clear core-shell structure and good dispersion; when the value is greater than 50, carbon coated iron morphology changes and part of carbon possesses a sheet structure.

Key words: carbon nano materials; gaseous detonation; oxygen and benzene; carbon coated iron

Corresponding author: Li Xiaojie, Ph. D., Professor, State Key Laboratory of Structural Analysis for Industrial Equipment, Dalian University of Technology, Dalian 116024, P. R. China, Tel: 0086-411-84708397, E-mail: 923309973@qq.com