

## МЕТОДИ СИНТЕЗУ МІКРОСТРУКТУРИ АЕРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВІ ДІОКСИДУ КРЕМНІЮ

Рикова В.О., Водка О.О., Абдусаламов Р.

*Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут», м. Харків; Rhine-Westphalia Technical University, Aachen*

Аерогелі – нанопористий матеріал, який має складну структуру, що складається із твердих волокон (каркасу) та пор, які заповнені повітрям. Ці особливості впливають на кінцеві властивості матеріалу, саме тому вони дуже важливі при моделюванні [1].

При моделюванні структур пористих матеріалів застосовують моделі агрегації. Головна суть – імітація хаотичного руху частинок структури та їх агрегація в один пористий кластер.

Основні підходи моделювання аерогелей [2]:

1. Моделі кластерної агрегації:
  - Агрегація «частинка-кластер» (DLA – агрегація, обмежена дифузією; RLA – агрегація, обмежена реакцією; BPCA – балістична агрегація «частинка-кластер»);
  - Агрегація «кластер-кластер» (DLCA – кластер-кластерна агрегація, обмежена дифузією; RLCA – кластер-кластерна агрегація, обмежена реакцією).
2. Моделі моделювання молекулярної динаміки;
3. Мікромеханічні багатомасштабні моделі.

Ми застосовуємо метод DLCA, тому розглянемо його більш детально.

Перед початком побудови моделі необхідно встановити розміри робочого поля та концентрацію частинок. Загальна кількість частинок  $N_{all} = N_s + N_w$  ( $s$  – seeds – центри кластеризацій,  $w$  – walkers – частинки, що хаотично рухаються). Walkers, розміщуються на полі випадковим чином та починають хаотичний рух. Як тільки walker досягає критичної відстані до seed – рух зупиняється. З часом усі walkers агрегують в seeds та сформують кластери. Рух продовжується до тих пір поки всі кластери не з'єднаються один з одним [3].

За допомогою методу DLCA була побудована модель аерогелю на основі діоксиду кремнію у програмі чисельного моделювання ANSYS. З вхідними параметрами: розміри поля –  $D[40 \times 40 \times 40]$ , концентрація –  $c = 20\%$ , радіус –  $r_s = 1$ ,  $r_w = 1$ , критична відстань –  $\varepsilon = 2 \cdot r_s$ , крок seeds –  $st_s = 0.1$ .

### Література:

1. Fricke J., Aerogels: production, characterization and applications / Fricke J., Tillotson T. // Thin Solid Films. - 1997. - № 297. - С. 213-223. DOI: 10.1016/S0040-6090(96)09441-2.
2. Patil S. Mechanics of Nanostructured Porous Silica Aerogel Resulting from Molecular Dynamics Simulations / Patil S., Rege A., Sagardas, Itskov M., Markert B. // The Journal of Physical Chemistry B. - 2017. - № 121. - С. 5660-5668. DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b03184.
3. Abdusalamov R. Modelling and simulation of the aggregation and the structural and mechanical properties of silica aerogels / Abdusalamov R., Scherdel C., Itskov M., Milow B., Reichenauer G., Rege A. // The Journal of Physical Chemistry B. - 2021. - № 125. - С. 1944–1950. DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c10311.