

А. А. Саламатин, А. Г. Егоров

*Казанский (Приволжский) федеральный университет,
институт математики и механики им. Н.И. Лобачевского,
arthouse131@rambler.ru, egorov2@ksu.ru*

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА СВЕРХКРИТИЧЕСКОЙ СУШКИ АЭРОГЕЛЯ

Аэрогели — уникальные по своей структуре и свойствам материалы, представляющие собой гель, в котором жидкая фаза полностью замещена газообразной. Такие материалы обладают рекордно низкой плотностью (пористость свыше 90%) и демонстрируют ряд уникальных свойств: твёрдость, прозрачность, жаропрочность, чрезвычайно низкую теплопроводность и т. д. Распространены аэрогели на основе аморфного диоксида кремния, глинозёмов, а также оксидов хрома и олова. По структуре аэрогели представляют собой древовидную сеть из объединённых в кластеры наночастиц размером 2—5 нм и пор размерами до 100 нм.

Одним из способ замещения жидкой фазы на газообразную является сверхкритическая сушка, во время которой жидкий этанол в геле в силу взаимной диффузии замещается CO_2 , омывающим гель и находящимся в сверхкритическом (жидком) состоянии. Завершается процесс постепенным понижением давления до атмосферного, сопровождающимся переводом CO_2 в газообразное состояние.

Однако образовавшийся в результате аэрогель может иметь трещины на поверхности и существенно деформироваться (усадка по кратчайшему направлению). Для объяснения этих эффектов предлагается следующая математическая модель процессов массопереноса внутри геля во время его сушки, учи-

тывающая зависимость плотности ρ смеси CO_2 -этанол и коэффициента взаимной диффузии D от концентрации x этанола

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{u}\rho) = 0, \quad \rho \frac{\partial x}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla x = \operatorname{div}(\rho D \nabla x).$$

Здесь t — время, а \mathbf{u} — скорость конвективного переноса компонент смеси, вызванная изменением ρ . Плотность смеси предлагается определять экспериментально, а для коэффициента диффузии — использовать корреляцию Вигнеса [1]. Пористость принята равной единице.

Вычислительные эксперименты показали хорошее согласие модели с известными экспериментальными данными [2]. В результате была выдвинута гипотеза о том, что возникновение трещин на поверхности аэрогеля происходит еще на начальном этапе сушки, когда образуются большие градиенты давлений, пропорциональные в силу закона Дарси скорости \mathbf{u} ; в результате хрупкий скелет аэрогеля разрушается.

ЛИТЕРАТУРА

1. Vignes A. *Diffusion in binary solutions* // I&EC Fundamentals. — 1966. — V. 5. — № 2. — P. 189–199.
2. Garcia-Gonzalez C. A., Camino-Rey M. C., Alnaef M., Zetzl C., Smirnova I. *Supercritical drying of aerogels using CO_2 : Effect of extraction time on the end material textural properties* // J. Supercrit. Fluids. — 2012. — V. 66. — P. 297–306.