

Praca dyplomowa inżynierska

Modelowanie numeryczne kinetyki żelowania aerożeli krzemionkowych

Autor: Rafał Pakuła

Nr albumu: 283196



Promotor: prof. uczelni dr hab. inż. Jakub Gac
Opiekun pomocniczy: mgr inż. Nina Borzęcka

Rok akademicki: 2019/2020

Wprowadzenie

Postęp technologii wymaga poszukiwania materiałów o specjalnych właściwościach, stawiających czoła szczególnym wymaganiom. Przykładem takich substancji są aerożele, które, mając gąbczastą strukturę, posiadają wiele niesamowitych właściwości jak niska przewodność termiczna, wysoka porowatość czy powierzchnia właściwa. Dzięki temu mogą znaleźć szerokie zastosowanie w różnych dziedzinach życia.

Cel i zakres pracy

Celem pracy jest opracowanie modelu przedstawiającego reakcję kondensacji, występującą podczas wytwarzania aerożeli, a następnie sprawdzenie wyników jego pracy. Zakres pracy obejmuje:

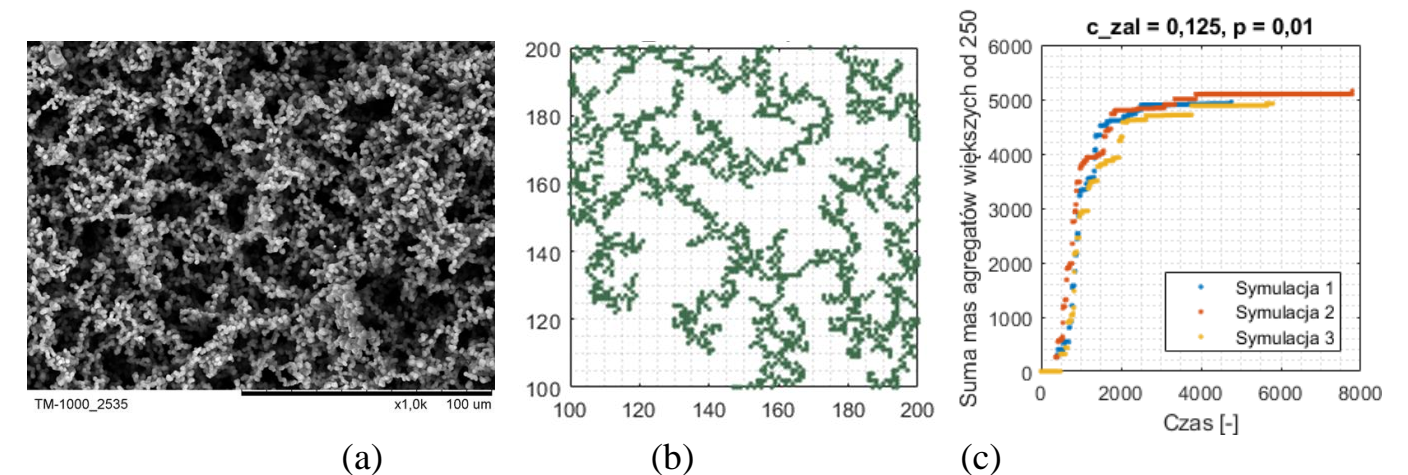
- Przegląd literatury dotyczący rodzajów aerożeli, ich metod wytwarzania i właściwości.
- Określenie stosowanych numerycznych metod i wybór automatów komórkowych.
- Stworzenie modelu i wykonanie na nim 12 symulacji (oraz 5 wstępnych).
- Analiza uzyskanych struktur oraz kinetyk żelowania w zależności od zastosowanych parametrów.

Część teoretyczna

Aerożelami nazywane są materiały uzyskane z tzw. „mokrych żeli” (hydrożeli, alkożeli) poprzez usunięcie wypełniającej je cieczy w taki sposób, by nie naruszyć ich pierwotnej struktury. Mają bardzo małą gęstość, mogą być przezroczyste lub wręcz nieprzepuszczalne dla światła. Po raz pierwszy zostały opracowane przez dr. S. Kistlera poprzez wymianę rozpuszczalników w nadkrytycznym środowisku. Pod koniec ubiegłego stulecia powstały pierwsze próby zaaplikowania modelowania numerycznego zarówno właściwości aerożeli jak i ich kondensacji (która ma kluczowy wpływ na późniejsze właściwości produktu).

Metodyka i wyniki

Spośród metod numerycznych np. dynamiki molekularnej, metody Monte Carlo czy automatów komórkowych, zdecydowano się na te ostatnie w celu opracowania programu symulującego kondensację cząstek wtórnych, które w ostateczności tworzą całkowicie usieciowaną strukturę (jak na rys. 1a). Uzyskana wizualizacja i wykres kinetyki żelowania stworzonego programu zaprezentowane są na rys. 1b i 1c.



Rys.1. Przykładowe zdjęcie aerożelu z mikroskopu SEM (a), jedna z otrzymanych struktur ze stworzonego modelu (b) oraz wykres kinetyki żelowania (c) dla założonego stężenia cząstek na macierzy $c_{zal} = 0,125$ i prawdopodobieństwa równego 0,01.

Opracowano kod źródłowy w środowisku programu C++. Przyjęto równomierne poruszanie się cząstek w każdym kroku czasowym w jednym z ośmiu kierunków (góra, dół, na boki i na skos). Wygenerowane cząstki zmieniały położenie na 2-wymiarowej siatce, gdzie wprowadzono periodyczne warunki brzegowe, (zapewniające pseudo-nieskończoną przestrzeń). W rezultacie uzyskano powtarzalne wykresy kinetyk kondensacji oraz wizualizacje powstałych struktur. Na ich podstawie zauważono, że agregaty uzyskane dla bardzo małych wartości prawdopodobieństwa zderzeń efektywnych (będącym prócz stężenia sterowanym parametrem) mają bardziej zbitą strukturę.

Wnioski

Stworzony model (pomimo upraszczających założeń) uzyskał obiecujące wyniki w przedstawianiu kinetyki żelowania (która na podstawie danych laboratoryjnych okazuje się mieć kształt sigmoidalny), której przebieg jakościowo pokrywa się z rys. 1c. Uzyskane wizualizacje końcowej struktury (a także wyglądu stanów początkowych oraz pośrednich) mogą pomóc w analizowaniu przebiegu procesu. Zauważono też, że mniejsza wartość prawdopodobieństwa zderzeń efektywnych cząstek sprzyja tworzeniu się struktur zbliżonych do modelu RLCA (reaction-limited cluster aggregation).