

Аннотация проекта (ПНИЭР), выполняемого в рамках ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014 – 2020 годы»

Номер соглашения о предоставлении субсидии (государственного контракта)
14.583.21.0014

Название проекта

Улучшенные функционализированные кремневые аэрогели и полученные на их основе углеродные композиты: экспериментальные исследования и численное моделирование

Тематическое направление

Индустрия наносистем

Исполнитель

федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева"

Цели и задачи исследования

Целями и задачами, решаемыми в рамках проекта, являются:

1. Двухсторонние исследования в области композиционных материалов, а именно, получение органически модифицированных аэрогелей на основе диоксида кремния и их пиролиз для получения кремний-углеродных композитов, включая комплексные аналитические исследования полученных образцов.
2. Разработка лабораторных методик и оптимизация условий получения органически модифицированных кремневых аэрогелей, стадии их высокотемпературной обработки в отсутствие кислорода (пиролиз органической составляющей) и формулировка технических требований для разработки регламента на производство композиционных материалов.
3. Разработка математического описания и проведение численного моделирования механических и сорбционных свойств полученных композиционных материалов.

Актуальность и новизна исследования

Цели и задачи проекта соответствуют вызовам и окнам возможностей по приоритетному направлению «Новые материалы и нанотехнологии», изложенным в долгосрочном прогнозе научно-технологического развития РФ на период до 2030 года, в части:

- разработку новых типов легких материалов и материалов, обладающих повышенной прочностью (гибридные композиционные аэрогели соответствуют этим двум направлениям, т.к. аэрогели относятся к низкоплотным материалам, а ввод в структуру аэрогеля органики и углерода позволяет повысить их механические и прочностные свойства по сравнению с кремневыми аэрогелями);
- разработка сенсорных материалов (модификация поверхности гибридных аэрогелей позволит повысить селективность сорбции по ряду газов, а следовательно продукт может быть в дальнейшем быть использован для применения в сенсорах газов);
- развитие математического описания, алгоритмов и программ для прогнозирования свойств и структуры материалов и процессов их получения. Планируемые к разработке в рамках проекта материалы относятся к таким

выделенным экспертами группам инновационных продуктов и услуг, как сенсоры для анализа состава различных сред, новые типы легких и высокопрочных материалов, термостойких наноконструированных и композиционных материалов, в том числе и гидрофобных материалов, следовательно, возможно прогнозировать возможность правовой охраны заявленных результатов.

Описание исследования

Проект включает проведение работ по следующим направлениям:

1. Разработка лабораторных методик получения кремний-органических гибридных аэрогелей. Будут отработаны два подхода к получению кремний-органических гибридных аэрогелей: а - введение полимера в состав кремневого золя до стадии гелирования, б - модификация внутренней поверхности путем использования при синтезе в качестве источника кремния оксисиланов с различными радикальными хвостами (ormosil method). Выбор состава и оптимизация условий синтеза и сушки кремний-органических гибридных аэрогелей будут проводиться на основании результатов комплексных исследований образцов с привлечением современного аналитического оборудования обеих сторон, включая анализ микро и мезоструктуры, термических и механических свойств, сорбционной емкости по газам и водным парам.

2. Отработка режимов проведения стадии пиролиза кремний-органических аэрогелей для получения на их основе кремний-углеродных композитов. Оптимизация условий будет проводиться на основании результатов комплексных исследований образцов кремний-углеродных композитов, включая исследования микро и мезопористой структуры, анализ наличия связей SiO₂/C, SiOC, SiC, термических и механических свойств, сорбционной емкости по газам и парам воды.

3. Численное моделирование микро и мезоструктуры композитов. Для описания структурообразования российские участники проекта будут использовать модель агрегации, ограниченной диффузией с множеством центров; швейцарские партнеры будут использовать адаптированную модель Эренбека (основана на рассмотрении атомной структуры).

4. Математическое и компьютерное моделирование термических и механических свойств, сорбции газов и водяных паров. Для описания кинетики сорбции газов российские участники проекта будут использовать сгенерированные структуры и модели на основе клеточных автоматов; швейцарские партнеры планируют использовать для описания сорбции паров воды методы молекулярной динамики и непрерывные модели.

В процессе выполнения 1 этапа был выполнен анализ научно-технической литературы, проведены патентные исследования, разработаны проекты лабораторных методик изготовления гибридных кремний-органических аэрогелей (композитов), программы и методики испытаний гибридных кремний-органических аэрогелей (композитов).

Были изготовлены и проведены испытания первой партии образцов кремний-органических аэрогелей (композитов) по проекту методик, сделаны выводы о

необходимости корректировки проектов лабораторных методик получения кремний-органических аэрогелей (композитов) по результатам испытаний первой партии пробных образцов;

Были разработаны проект лабораторной методики кремний-углеродных композитов путем пиролиза кремний-органических аэрогелей, программы и методики испытаний кремний-углеродных композитов, изготовлены и проведены испытания первой партии пробных образцов кремний-углеродных композитов по проекту методики. Дополнительно была проведена корректировка проекта лабораторной методики получения кремний-углеродных композитов по результатам испытаний первой партии пробных образцов с учетом изменений, внесенных в проекты лабораторных методик получения кремний-органических аэрогелей.

В результате исследования были выявлены закономерности между условиями синтеза материалов и их конечными характеристиками.

Результаты исследования

Основные конструктивные и технико-эксплуатационные показатели полученных образцов:

- сорбционная емкость первой партии функционализированных кремниевых аэрогелей по углекислому газу при температуре 273 К составила 0,8-1,3 ммоль/г;
- кажущаяся и истинная плотности, порозность первой партии кремний-органических аэрогелей колеблется в следующих интервалах значений: 1,33-1,65 г/см³, 0,07-0,18 г/см³, 86-95 % соответственно;
- модуль упругости для образцов кремний-органических аэрогелей М5-1, М5-2, М5-3, М5-4 составил 1,01 Н/мм², 1,21 Н/мм², 1,43 Н/мм² и 8,24 Н/мм² соответственно;
- удельная площадь поверхности, общий объем пор и объем микропор лежит в следующих интервалах значений: 330-560 м²/г, 0,34-1,8 см³/г, 0,13-0,21 см³/г, соответственно.

Проект находится на начальном этапе разработки, готовых к реализации технических решений в ходе выполнения первого этапа не получено.

Результаты, полученные при выполнении первого этапа работ рекомендованы к использованию в качестве исходных данных при выполнении второго и последующих этапов в рамках Соглашения о предоставлении субсидии от «30» ноября 2015 г. №14.583.21.0014.

Практическая значимость исследования

Перспективными областями применения разрабатываемых в рамках проекта высокопористых кремний-органических гибридных аэрогелей и кремний-углеродных композитов на их основе являются:

1. Изоляционные материалы с низкой теплопроводностью, малым весом,

плотностью и высокими шумоизоляционными свойствами. Это утверждение основано на высоких аналогичных показателях кремневых аэрогелей, плотность и пористость которых может варьироваться в широком диапазоне путем варьирования условий синтеза и гелирования. Однако, введение органической составляющей позволит улучшить механическую прочность таких материалов, поскольку чисто кремневые аэрогели хрупкие и подвержены разрушению, позволит повысить прочность на изгиб, сделать их гидрофобными.

2. Материалы для систем детектирования с высокими избирательной способностью и сорбционной емкостью. Данное утверждение сделано на предварительном анализе научных публикаций и собственном опыте участников проекта.

3. Материалы для сорбционных тепловых насосов. Данное утверждение сделано на основании результатов анализа научно-технической литературы, которые показали, что кремний-органические гибридные материалы способны сорбировать пары воды и выдерживать несколько циклов регенерации.

Возможными потребителями ожидаемых результатов будут являться:

- строительные компании, применяющие теплоизоляционные и шумоподавляющие материалы, а также использующие в целях рекуперации тепла тепловые насосы;
- производители датчиков для обнаружения превышения уровня или утечки газов, а также колонок для очистки газов от примесей.