

Высокопроизводительное моделирование процессов роста оксигидроксидных структур алюминия

Б.Д. Зиннуров, Г.С. Смирнов, Е.В. Тарарушкин

Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

Более 100 лет назад были получены высокопористые структуры алюминия путем окисления жидкого сплава Hg(Al) во влажной среде [1]. Второй раз материал привлекает внимание ученых уже к концу 20го века [2] и в начале 21го [2]. В результате его изучения они приходят к выводу, что по физико-химическим свойствам структура близка к классическим аэрогелям, в связи с чем находит применение в качестве мембран [4], сенсоров [5] и защитных покрытий [6] в экспериментальных установках разных сфер применения. Перед авторами же данной работы стоит задача в построении модели роста одномерных высокопористых (т.н. нанофибрилл) оксигидроксидов алюминия, промежуточный результат которого и будет представлен.

Компьютерное моделирование на основе методов квантовой молекулярной динамики проводится на кластере суперкомпьютера МИЭМ НИУ ВШЭ «сHARISMa». На первом этапе рассматривают ряд соединений Al-O-H при заранее заданной температуре на протяжении многого количества шагов. Полученные на выходе конфигурации атомов, силы и давления используются для создания межатомного потенциала на основе машинного обучения, который необходим в построении новой модели Al-O-H . Модель строится на теории функционала электронной плотности. Машинное обучение помогает компенсировать главное ограничение теории – в прошлом ее вычислительная сложность позволяла проводить преимущественно статические расчеты [7].

Литература

1. Wislicenus H. Zeitschrift für Chemie und Industrie der Kolloide // Steinkopff & Springer, 1908. Vol. 2, XI-XX.
2. Vignes J-L., Mazerolle L., Michel D. A Novel Method for Preparing Porous Alumina Objects // Key Engineering Materials, 1997. P. 132–136, 432–435. DOI: 10.4028/www.scientific.net/KEM.132-136.432.
3. Мартынов П., Асхадуллин Р., Юдинцев П., Ходан А. Новый метод синтеза наноматериалов на основе контролируемого селективного окисления жидкометаллических фаз // Новые промышленные технологии. 2008. Т. 4. С. 48–52.
4. Yin X. Effect of boehmite sol on the performance of alumina microfiltration membranes // Ceramics International. 2019. Vol. 45, no. 13. P. 16173–16179. DOI: 10.1016/j.ceramint.2019.05.138.
5. Mohan P. Boehmite nanorod/gold nanoparticle nanocomposite film for an easy-to-use optical humidity sensor // Sensor. Actuator. B. 2012. Vol. 168. P. 429–435. DOI: 10.1016/j.snb.2012.04.055.
6. Chen Q. The effect of AlOOH boehmite nanorods on mechanical property of hybrid composite coatings // Thin Solid Films. 2009. Vol. 517, no. 17. P. 4871–4874. DOI: 10.1016/j.tsf.2009.03.097.
7. Iijima S. One-dimensional nanowires of pseudoboehmite (aluminum oxyhydroxide $\gamma\text{-AlOOH}$) // Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America. 2016. Vol. 113, no. 42. P. 11759–11764. DOI: 10.1073/pnas.1614059113.