

中文引用格式:石钰,李颖,毕成,等. 含水二氧化硅气凝胶吸附与传热特征[J]. 中国安全科学学报,2026,36(5):131-138.

英文引用格式:Shi Yu, Li Ying, Bi Cheng, et al. Adsorption and heat transfer characteristics of silica aerogels with water content[J]. China Safety Science Journal, 2026, 36(5): 131-138.

含水二氧化硅气凝胶吸附与传热特征^{*}

石钰¹副教授,李颖¹,毕成²,唐桂华^{**3}教授,黄圣霖⁴,宋战利⁴

(1 西安科技大学 安全科学与工程学院,陕西 西安 710054; 2 西安特种设备检验检测院,

陕西 西安,710065; 3 西安交通大学 能源与动力工程学院,陕西 西安 710049;

4 陕西环宇智慧消防科技有限公司,陕西 西安 710523)

中图分类号:X937

文献标志码:A

DOI:10.16265/j.cnki.issn1003-3033.2026.05.0191

基金项目:国家自然科学基金资助(52130604);陕西省自然科学基金基础研究计划项目(2025JC-YBMS-491,2024JC-YBMS-449)。

【摘要】 为优化气凝胶结构,降低气凝胶等效热导率,在大规模原子/分子并行模拟器(LAMMPS)中加入力场、原子模型,以及升温、冷却等计算模块,精确模拟二氧化硅气凝胶吸附水分子和传热过程。结果表明:随着含水量增加,二氧化硅气凝胶对水分子的吸附量逐渐增多,表现为吸附量先急剧增长,后趋于稳定。升高温度,水分子热运动加剧,导致二氧化硅气凝胶对水分子的吸附量减少,自由水分子数量增多。增大压力,水分子与二氧化硅气凝胶碰撞频率增加,造成二氧化硅气凝胶对水分子的吸附量增加。增加含水量、降低温度时,一方面水分子之间相互挤压促使更多水分子渗入二氧化硅气凝胶内部,另一方面水分子热运动减缓不利于其逃出气凝胶孔隙,最终导致二氧化硅气凝胶体系的数密度增加。二氧化硅气凝胶因吸附水分子形成水膜,水膜构成“水桥”,随着含水量增加,“水桥”之间连通性增强,接触面积增大,造成二氧化硅气凝胶等效热导率增加,隔热性能下降。

【关键词】 二氧化硅气凝胶; 吸附量; 水分子; 含水量; 热导率

Adsorption and heat transfer characteristics of silica aerogels with water content

Shi Yu¹, Li Ying¹, Bi Cheng², Tang Guihua³, Huang Shenglin⁴, Song Zhanli⁴

(1 School of Safety Science and Engineering, Xi'an University of Science and Technology,

Xi'an Shaanxi 710054, China; 2 Xi'an Special Equipment Inspection Institute, Xi'an Shaanxi

710065, China; 3 School of Energy and Power Engineering, Xi'an Jiaotong University,

Xi'an Shaanxi 710049, China; 4 Shaanxi Huanyu Intelligent Fire Technology

Co., Ltd., Xi'an Shaanxi 710523, China)

Abstract: To optimize the aerogel structure and reduce the effective thermal conductivity of the aerogel, the force field, atomic model, heating and cooling calculation modules were added to large-scale atomic/molecular parallel simulator(LAMMPS) to accurately simulate the adsorption of water molecules by silica

* 文章编号:1003-3033(2026)05-0138-08; 收稿日期:2026-01-14; 修稿日期:2026-03-20

** 通信作者:唐桂华(1974—),男,湖南衡阳人,博士,教授,主要从事微纳尺度热质传递方面的研究。E-mail: ghtang@mail.xjtu.edu.cn。

aerogels and heat transfer processes. The results show that the adsorption capacity of silica aerogels to water molecules increases as the water content increases, showing a significant rise followed by an equilibrium state. With the increase of temperature, the thermal movement of water molecules intensifies, and the adsorption capacity of silica aerogels to water molecules decreases. However, the free water molecular weight increases. As the pressure increases, the collision frequency of water molecules and silica aerogels increases, resulting in an increase in adsorption capacity. When the water content increases and the temperature decreases, the mutual squeezing among water molecules promotes more water molecules to penetrate into the interior of silica aerogels, meanwhile, the thermal motion of water molecules slows down, which is not conducive to their escape from the aerogels pores, resulting in an increase in the number density of the silica aerogels system. Silica aerogels form water films by adsorbing water molecules, and the water films constitute "water bridges". With the increase of water content, the connectivity among "water bridges" is enhanced, and the contact area increases, leading to an increase in effective thermal conductivity of silica aerogels and significant degradation of thermal insulation.

Keywords: silica aerogels; adsorption capacity; water molecules; water content; thermal conductivity

0 引言

随着全球能源消费的持续增长,提升能源利用效率已成为碳减排的关键策略^[1]。轻质高效的隔热材料能够显著提高能源利用效率。气凝胶因其超轻、低热导率、高比表面积等优异特性,被认为是一种理想的隔热材料^[2]。在安全领域,气凝胶凭借极低的导热系数,有效阻断能量传递路径,减缓火势蔓延速度^[3]。在航空航天领域,气凝胶避免飞行器主体结构及内部仪器设备遭受热侵蚀,能有效提高飞行器的等效载荷^[4]。在建筑领域,气凝胶应用于建筑物内外墙、仓储以及门窗玻璃等,可有效降低热量传输,实现建筑节能^[5]。在石油化工领域,气凝胶可对热力管道进行保温,减少热量损失和管裂的发生^[6]。

气凝胶种类丰富,主要包括二氧化硅气凝胶、氧化铝气凝胶、氧化锆气凝胶、炭气凝胶等。其中,二氧化硅气凝胶化学性质稳定、隔热能力突出,具有超低的介电常数和良好的透光性,吸附能力更优,环保无毒,拥有高孔隙率、高比表面积、低密度、低热导率等优异特性。然而,气凝胶的高比表面积特性致使潮湿环境下水分子容易吸附于气凝胶纳米骨架,形成吸附层,这不仅增大了骨架间的接触面积,也削弱了其隔热性能。Zhang Hu 等^[7]基于瞬态平面热源法(Transient Plane Source, TPS)测试了二氧化硅气凝胶在相对湿度 15%~90% 时的等效热导率,发现增加湿度,二氧化硅气凝胶吸附水量和等效热导率均增加。Chen Yu 等^[8]使用 TPS-2500S 热常数分析

仪测量了含水量对二氧化硅气凝胶等效热导率的影响,结果表明:增加含水量,二氧化硅气凝胶等效热导率增加。Bjurström 等^[9]采用瞬态热带法测试了孔隙率、含水量、气压和温度对二氧化硅气凝胶等效热导率的影响,发现增加孔隙率,气凝胶等效热导率降低,增加含水量、气压、温度时,气凝胶等效热导率均增加。

分子动力学方法作为试验方法的补充,在揭示纳米尺度下的流动和传热方面具有独特优势。Coquil 等^[10]采用非平衡分子动力学方法,研究了孔径和孔隙率对二氧化硅气凝胶热导率的影响,发现热导率与孔径无关,仅取决于孔隙率。Mahajan 等^[11]将团簇划分为同心壳估计二氧化硅纳米颗粒的热导率,得出 600 个原子的二氧化硅纳米颗粒平均热导率为 0.589 W/(m·K)。Morthomas 等^[12]结合非平衡分子动力学和热传导扩散方程计算了二氧化硅气凝胶密度在 250~2 255 kg/m³ 时的热导率,发现热导率与密度之间呈幂律关系。

综上,尽管前人通过试验获得了含水量对二氧化硅气凝胶等效热导率的影响特征,然而,水分子在气凝胶表面的吸附过程发生在纳米尺度,试验手段难以捕捉到水分子的吸附过程,导致宏观试验现象背后的深层物理机制仍不明晰。目前,分子动力学方法研究二氧化硅气凝胶多限于无水条件,针对潮湿环境下二氧化硅气凝胶吸附和传热特征的研究鲜有报道。鉴于此,鉴于此,笔者拟在大规模原子/分子并行模拟器(Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator, LAMMPS)中自编程加

入力场、原子模型、边界条件等模块,精确模拟二氧化硅气凝胶吸附水分子和传热过程,揭示潮湿环境下二氧化硅气凝胶吸附和传热机制,以期优化气凝胶结构,增强气凝胶隔热性能。

1 二氧化硅及水模型构建与验证

1.1 二氧化硅原子模型构建

分子动力学采用β-Cristobalite 作为初始结构,如图 1a 所示,Nose-Hoover 热浴法^[13]用于温度控制。二氧化硅之间势能作用采用 Tersoff 势函数,如下式:

$$U = f^c(r_{ij}) [V^R(r_{ij}) + b_{ij} V^A(r_{ij})] \tag{1}$$

式中: $f^c(r_{ij})$ 为平滑限制原子间的短程作用; r_{ij} 为原子*i*与原子*j*之间的实际距离; b_{ij} 为原子*i*和*j*单调递减的键序。

$$V^R(r_{ij}) = A_{ij} \exp(-\gamma_{ij} r_{ij}) \tag{2}$$

$$V^A(r_{ij}) = B_{ij} \exp(-\mu_{ij} r_{ij}) \tag{3}$$

$$f^c(r_{ij}) = \begin{cases} 1 & r_{ij} < S_{ij} \\ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos\left(\pi \frac{r_{ij} - R_{ij}}{S_{ij} - R_{ij}}\right) & R_{ij} < r_{ij} < S_{ij} \\ 0 & r_{ij} > S_{ij} \end{cases} \tag{4}$$

式中: $V^R(r_{ij})$ 为排斥势项; $V^A(r_{ij})$ 为吸引势项; $A_{ij} = (A_i + A_j)^{1/2}$ 为排斥势的强度参数; A_i 、 A_j 为硅、氧的排斥势参数; $B_{ij} = (B_i + B_j)^{1/2}$ 为吸引势的强度参数; B_i 、 B_j 为硅、氧的吸引势参数; $\gamma_{ij} = \frac{\gamma_i + \gamma_j}{2}$ 为排斥势的衰减系数; $\mu_{ij} = \frac{\mu_i + \mu_j}{2}$ 为吸引势的衰减系数; $R_{ij} = (R_i R_j)^{1/2}$ 为内截断距离; $S_{ij} = (S_i S_j)^{1/2}$ 为外截断距离。

使用 0.5 fs (0.5 fs = 0.5×10⁻¹⁵ s) 时间步长的 Verlet 算法求解牛顿运动方程。初始温度设置为 1 800 K。采用正则系综,耦合常数设置为 1 ps,将初始结构以 1×10¹² K/s 的升温速率加热至 5 000 K,使晶体结构在高温下瓦解熔化成无序状态,随后在 5 000 K 高温下保持模拟体系运行 5 ns,确保二氧化硅完全熔化并达到平衡,并以 1×10¹¹ K/s 的降温速率逐渐降温至 300 K,并在此温度下弛豫得到稳定的无定型二氧化硅,如图 1b 所示,其密度为 2.21 g/cm³。这与 Patil 等^[14]通过分子模拟得出的无定型二氧化硅密度 2.2 g/cm³ 十分吻合。

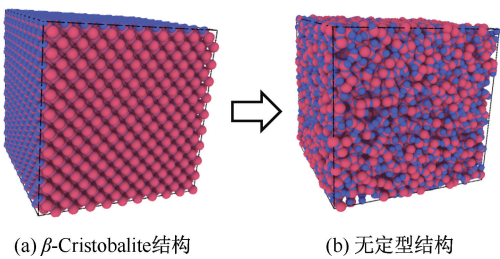


图 1 二氧化硅原子模型
Fig. 1 Model of silica atoms

1.2 二氧化硅原子模型验证

为验证生成的无定型二氧化硅原子模型的准确性,计算径向分布函数 $g(r)$,如下式:

$$g(r) = \frac{V}{N} \left(\frac{\sum_{i=1}^{N_i} N_i(r)}{4\pi r^2 \Delta r} \right) \tag{5}$$

式中: V 为体积; N 为原子总数量; N_i 为以原子*i*为中心在*r*到 $\Delta r + r$ “球壳”内的原子总数量;()为整个模拟时间平均。

图 2 为无定型二氧化硅径向分布函数,发现 Si-O 键、Si-Si 键以及 O-O 键的长度分别为 1.6、3.1 和 2.6 Å,这与 MUNETOH^[15]得出的 Si-O 键、Si-Si 键以及 O-O 键的长度分别为 1.7、3.2 和 2.6 Å 高度吻合,验证了二氧化硅原子模型的正确性。

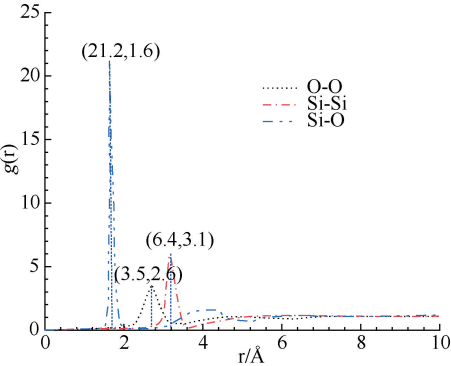


图 2 无定型二氧化硅径向分布函数
Fig. 2 Radial distribution function of amorphous silica

1.3 水分子吸附模型构建

水分子之间长程库伦相互作用采用 PPPM (Particle-Particle-Particle-Mesh) 算法^[16],如下式:

$$U_v = \frac{q_i q_j}{4\pi \epsilon_0 r_{ij}} \tag{6}$$

式中: U_v 为长程库伦相互作用; r_{ij} 为原子之间距离; i 、 j 分别为模型中不同的原子; ϵ_0 为介电常数; q_i 、 q_j 为*i*和*j*原子的电荷量。

短程相互作用范德华力选用 Lennard-Jones (12-6) 势函数,如下式:

$$U(r_{ij}) = \begin{cases} 4\epsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] & r_{ij} < r_c \\ 0 & r_{ij} \geq r_c \end{cases} \quad (7)$$

式中: ϵ_{ij} 为势能最低点与零势能的差值; σ_{ij} 为原子之间平衡距离; r_c 为截断半径, 设置为 10 Å。

二氧化硅-水分子之间的力场采用水接触角力场(Chemistry at HARvard Macromolecular Mechanics, CHARMM)。水分子质量 m_w 与二氧化硅质量 m_s 成比例, 即 $m_w = w \times m_s$, w 为含水量。根据二氧化硅质量, 计算插入水分子数量。构建不同含水量的二氧化硅气凝胶初始结构, 体系大小 300 Å×150 Å×150 Å, 如图 3 所示。

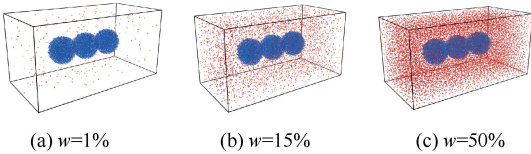


图 3 不同含水量下二氧化硅气凝胶初始结构
Fig. 3 Initial structures of silica aerogels with different water contents

1.4 水分子吸附模型验证

水分子靠近二氧化硅时, 受到的作用力为: ①水分子之间作用力(如氢键、范德华力等); ②二氧化硅表面短程作用力。当水分子与二氧化硅相对距离小于两者之间短程相互作用时, 会被二氧化硅表面“捕捉”, 形成较稳定的吸附层; 反之, 当水分子与二氧化硅相对距离较大且其动能足以克服与二氧化硅之间相互作用力时, 被视为自由水分子。吸附水分子和自由水分子识别如图 4 所示。

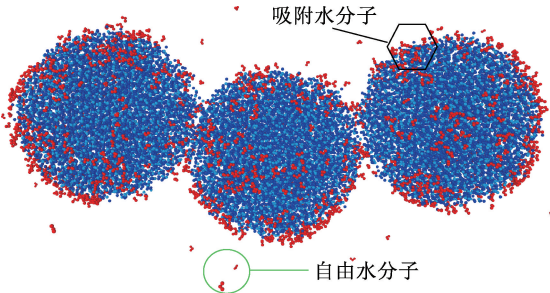


图 4 吸附水分子和自由水分子识别
Fig. 4 Identification of adsorbed water molecules and free water molecules

体系达到饱和吸附后, 二氧化硅气凝胶表面已无法吸附更多水分子, 计算体系的相对湿度 Φ ^[17],

如下式:

$$\Phi = P_M/P_E \quad (8)$$

式中: P_M 为体系水分子压力; P_E 为体系饱和压力。水分子吸附量为 G , 如下式:

$$G = m_a/m_s \quad (9)$$

式中: m_a 为吸附水分子质量, $m_a = N \times m_h$; N 为吸附水分子数量; m_h 为一个水分子质量。

计算温度为 328 K、相对湿度为 0%~95%, 二氧化硅气凝胶对水分子吸附量的影响, 如图 5 所示。发现增加相对湿度, 水分子吸附量呈增长趋势, 这与 Zhang Hu 等^[7] 的试验数据吻合, 验证了水分子吸附模型的正确性。

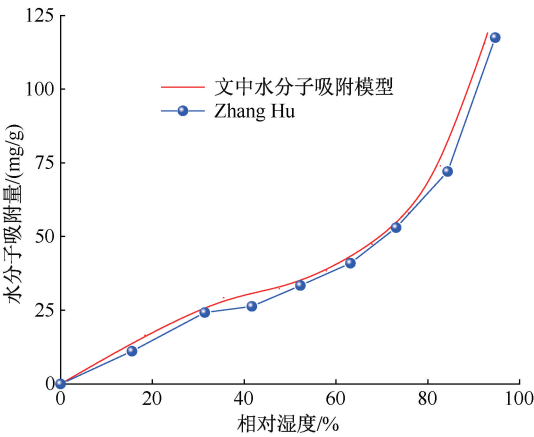


图 5 不同相对湿度下二氧化硅气凝胶对水分子吸附量的影响
Fig. 5 Effect of relative humidity on adsorption capacity of silica aerogels to water molecules

2 含水气凝胶吸附与传热特征探讨

2.1 含水量对水分子吸附量的影响

计算温度为 340 K, 不同含水量下二氧化硅气凝胶对水分子吸附量的影响, 如图 6 所示。由图 6 可知: 增加含水量, 水分子吸附量增多。0~500 ps 时, 水分子吸附量急剧增长; 500 ps 左右, 水分子吸附量趋于稳定; 1 000 ps 后, 系统进入稳定平衡状态。这一现象归因于: 初始阶段, 二氧化硅气凝胶表面具有大量未占据的吸附位点, 水分子与二氧化硅气凝胶表面存在强烈的相互作用, 水分子被这些位点迅速吸附, 形成团簇。随着吸附时间延长, 二氧化硅气凝胶表面可用的吸附位点被水分子占据, 因此, 吸附量保持在一个稳定的最大值。图 7 为含水量为 5% 和 60% 时, 二氧化硅气凝胶对水分子的吸附过程。

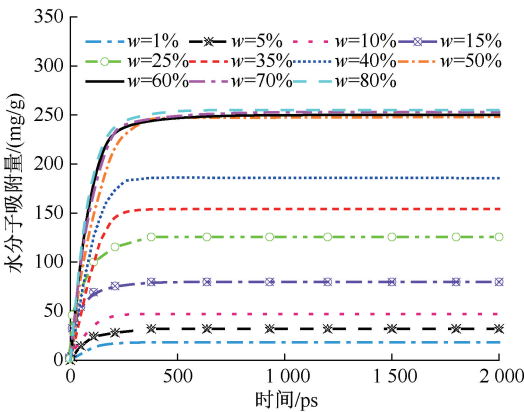


图 6 不同含水量下二氧化硅气凝胶对水分子的吸附量随时间变化特征

Fig. 6 Variation of water molecular adsorption capacity by silica aerogels over time under different water contents

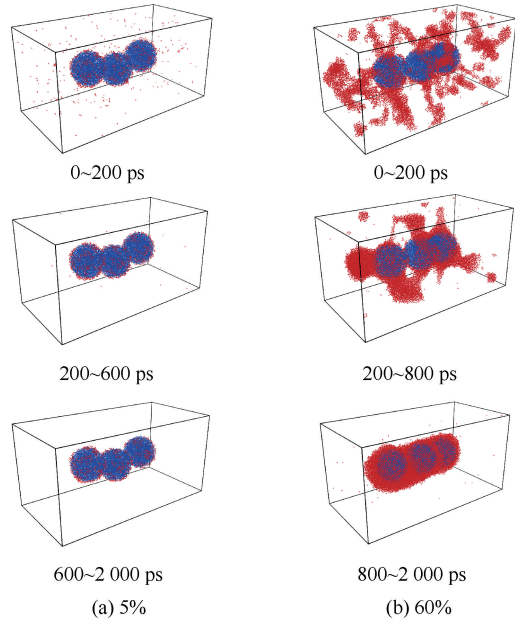


图 7 含水量为 5% 和 60% 时, 二氧化硅气凝胶对水分子的吸附过程

Fig. 7 Adsorption process of silica aerogels on water molecules with water contents of 5% and 60%

2.2 温度对水分子吸附量的影响

当温度为 300、340、380 K 时, 二氧化硅气凝胶对水分子吸附量的影响, 如图 8 所示。从图 8 可以看出, 升高温度, 二氧化硅气凝胶对水分子的吸附量减小。这是因为升高温度, 水分子热运动加剧, 水分子更容易克服吸附力, 从二氧化硅气凝胶表面脱附下来, 这与 Zhang Hu 等^[7]的试验结论一致。图 9 为含水量 5% 时, 不同温度下二氧化硅气凝胶对水分子吸附的最终形态, 发现温度为 300 和 340 K 时, 水分子被二氧化硅气凝胶全部吸附, 温度升高到

380 K 时, 体系内存在自由水分子。这是因为升温加速水分子热运动, 不利于水分子吸附。

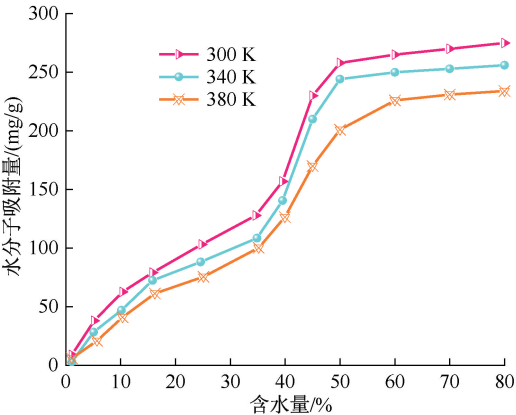


图 8 不同温度下二氧化硅气凝胶对水分子吸附量的影响

Fig. 8 Effect of temperature on adsorption capacity of silica aerogels to water molecules

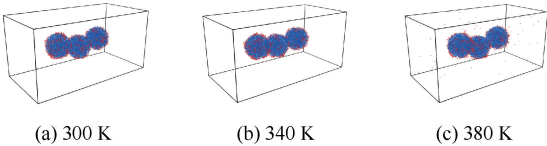


图 9 含水量为 5% 时, 不同温度下二氧化硅气凝胶吸附水分子的最终形态

Fig. 9 Stable adsorption forms of silica aerogels for water molecules at different temperatures with water content of 5%

2.3 压力对水分子吸附量的影响

计算含水量为 10%, 温度为 300、340、380 K 时, 压力对二氧化硅气凝胶吸附水分子的影响, 如图 10 所示。由图 10 可知: 相同温度下, 增加压力, 二氧化硅气凝胶对水分子的吸附量增加, 导致体系中游离态水分子数量减少。这是因为增加压力, 水分子与二氧化硅气凝胶的碰撞频率增加, 水分子在气凝胶孔隙中扩散速率加快, 使得水分子迅速渗透到孔隙中, 加速了吸附位点的饱和。不同温度和压力下二氧化硅气凝胶对水分子吸附量的影响如图 11 所示, 由图 11 可知: 相同压力下, 升高温度, 二氧化硅气凝胶对水分子的吸附量减少。这是因为温度升高, 水分子动能增加, 导致水分子从二氧化硅气凝胶表面脱附, 水分子吸附量减少, 吸附能力减弱。

2.4 含水量和温度对体系数密度的影响

图 12 为含水量为 1% 和 50%, 温度为 340 和 380 K 条件下, 二氧化硅气凝胶体系的数密度(数密度指单位体积内的粒子数目, 可用来区分不同物质分布状态)。从图 12 可以看出, 数密度与含水量密

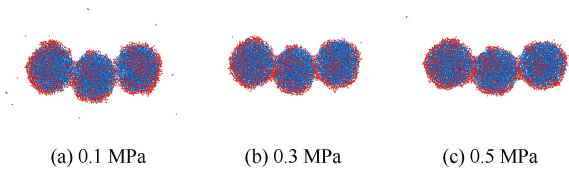


图 10 温度为 340 K 时,不同压力下二氧化硅气凝胶吸附水分子的最终形态

Fig. 10 Stable adsorption forms of silica aerogels for water molecules at different pressures with temperature of 340 K

切相关,含水量越高,数密度越大。这是因为水分子含量较高时,水分子不仅受到二氧化硅气凝胶强烈的吸附作用,还面临吸附水分子间的相互挤压,这种分子间的相互作用促使更多水分子渗入到二氧化硅气凝胶内部,填充到孔隙中。相同含水量条件下,温度升高,体系的数密度减小。这是由于部分水分子因热运动逃出原有孔隙,导致该区域数密度降低。总体而言,升温抑制水分子吸附,使得游离态水分子数量增多。

2.5 含水量对二氧化硅气凝胶等效热导率的影响

二氧化硅气凝胶等效热导率表示为:

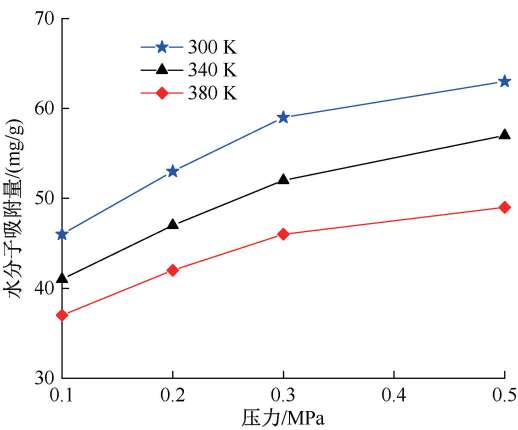


图 11 不同温度和压力下二氧化硅气凝胶对水分子吸附量的影响

Fig. 11 Effects of temperature and pressure on adsorption capacity of silica aerogels for water molecules

$$\lambda_e = \zeta w + \lambda_k \tag{10}$$

式中: ζ 为拟合系数; λ_k 为含水量为 0 时的热导率。

$$\lambda_k = \frac{4}{\pi d R_r} \tag{11}$$

$$R_r = \frac{\Delta T}{Q_c} \tag{12}$$

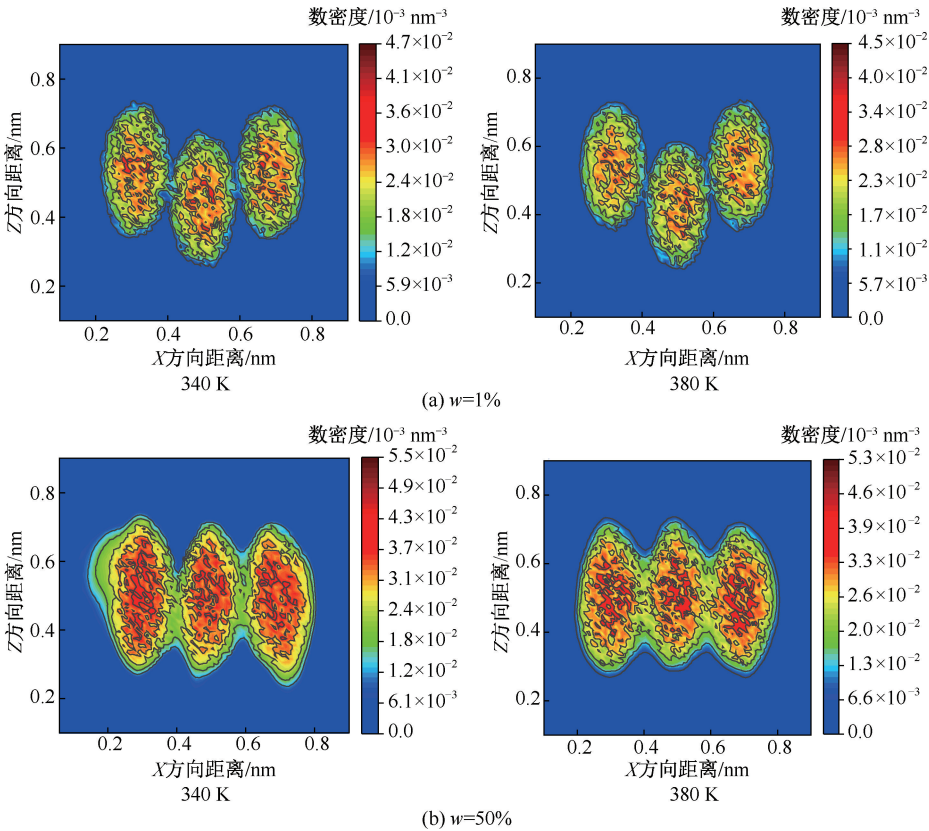


图 12 温度为 340、380 K,含水量为 1%和 50%时,体系的数密度

Fig. 12 Number density of the system at temperatures of 340 and 380 K, and water contents of 1% and 50%

式中: ΔT 为热源和热汇之间温差; Q_e 为 2 区域能量交换率; R_r 为热阻; d 为二氧化硅气凝胶粒径。

图 13 为含水量对二氧化硅气凝胶等效热导率的影响,由图 13 可知:增加含水量,二氧化硅气凝胶等效热导率增加,这与 Chen Yu 等^[8]试验得出的二氧化硅气凝胶等效热导率随水分子吸附量增加而增加的结论一致。含水量较低时,二氧化硅气凝胶热传导主要依赖于二氧化硅之间接触导热,随着水的加入,水分子在二氧化硅气凝胶表面吸附形成水膜,这些水膜构成“水桥”增加了二氧化硅气凝胶之间的等效接触面积,使得导热能力迅速增强;进一步增

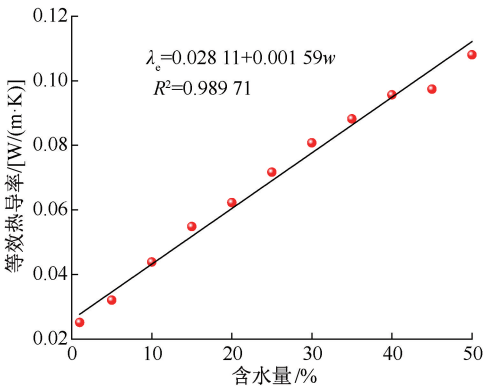


图 13 含水量对二氧化硅气凝胶等效热导率的影响

Fig. 13 Effect of water content on the effective thermal conductivity of silica aerogels

加含水量,二氧化硅气凝胶之间的“水桥”相互连通,形成面接触,导热能力进一步增强;然而随着二氧化硅气凝胶吸附水逐渐饱和,增加含水量,二氧化硅气凝胶等效热导率增幅变缓。这一现象有力地证明了多孔材料中液相导热扮演着举足轻重的角色。二氧化硅气凝胶吸水后,其原有的优良绝热性能会显著下降,水分子的存在明显削弱了二氧化硅气凝胶的隔热效果。

3 结 论

- 1) 增加含水量,二氧化硅气凝胶对水分子的吸附量增加。随着吸附进行,二氧化硅气凝胶对水分子的吸附量呈现先急剧增长,后趋于饱和的态势。
- 2) 升高温度,水分子热运动加剧,水分子更容易克服吸附力从二氧化硅气凝胶表面脱附,造成二氧化硅气凝胶对水分子的吸附量减小。增大压力,水分子与二氧化硅气凝胶碰撞频率增加,导致二氧化硅气凝胶对水分子的吸附量增大。
- 3) 含水量越高,水分子越相互挤压渗入二氧化硅气凝胶内部,导致体系系数密度增大。升高温度,水分子因热运动逃出气凝胶孔隙,造成体系系数密度减小。
- 4) 随着含水量增加,二氧化硅气凝胶中“水桥”接触面积逐渐增加,二氧化硅气凝胶等效热导率增大,绝热性能下降。

参 考 文 献

[1] 肖英,何杰兰,汪权方,等. 中国能源消费差异化碳减排潜能分析[J]. 湖北大学学报(自然科学版), 2024, 46(5):701-708.
Xiao Ying, He Jielan, Wang Quanfang, et al. Analysis of differentiated carbon emission reduction potential of energy consumption in China[J]. Journal of Hubei University (Natural Science), 2024, 46(5):701-708.

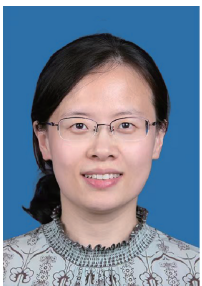
[2] Hou Xianbo, Chen Jia, Chen Zhilin, et al. Flexible aerogel materials: a review on revolutionary flexibility strategies and the multifunctional applications[J]. ACS Nano, 2024, 18: 11 525-11 559.

[3] 鲁义,杨帆,刘欢,等. 气凝胶消防救援服内衬的热阻计算[J]. 中国安全科学学报, 2022, 32(1):201-207.
Lu Yi, Yang Fan, Liu Huan, et al. Thermal resistance calculation of aerogel fire-fighting clothing lining[J]. China Safety Science Journal, 2022, 32(1):201-207.

[4] 潘月磊,程旭东,闫明远,等. 二氧化硅气凝胶及其在保温隔热领域应用进展[J]. 化工进展, 2023, 42(1): 297-309.
Pan Yuelei, Cheng Xudong, Yan Mingyuan, et al. Silica aerogel and its application in the field of thermal insulation[J]. Chemical Industry and Engineering Progress, 2023, 42(1):297-309.

[5] 彭罗文,艾明星,柳培玉,等. 二氧化硅气凝胶材料在建筑领域的应用研究及发展概述[J]. 建筑节能, 2018, 46(1):71-77.
Peng Luowen, Ai Mingxing, Liu Peiyu, et al. Overview of the application and development of silica aerogel material in the building field[J]. Building Energy Efficiency, 2018, 46(1):71-77.

- [6] 徐超,张兆,刘鹏,等. 输油管道保温技术及应用研究进展[J]. 中国塑料, 2019, 33(11):99-111.
Xu Chao, Zhang Zhao, Liu Peng, et al. Research progress in technology of oil pipeline insulation and its applications[J]. China Plastics, 2019, 33(11): 99-111.
- [7] Zhang Hu, Gu Wei, Li Mingjia, et al. Influence of environmental factors on the adsorption capacity and thermal conductivity of silica nano-porous materials [J]. Journal of Nanoscience and Nanotechnology, 2015, 15 (4): 3 048-3 054.
- [8] Chen Yu, Li Dong, Xie Xiangqian, et al. Theoretical modeling and experimental validation for the effective thermal conductivity of moist silica aerogel[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2020, 147: DOI:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2019.118842.
- [9] Bjurström H, Karawacki E, Carlsson B. Thermal conductivity of a microporous particulate medium: moist silica gel[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 1984, 27(11): 2 025-2 036.
- [10] Coquil T, Fang Jin, Pilon L. Molecular dynamics study of the thermal conductivity of amorphous nanoporous silica[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2011, 54: 4 540-4 548.
- [11] Mahajan S S, Subbarayan G, Sammakia B G. Estimating thermal conductivity of amorphous silica nanoparticles and nanowires using molecular dynamics simulations [J]. Physical Review E, 2007, 76: DOI: 10.1103/PhysRevE.76.056701.
- [12] Morthomas J, Goncalves W, Perez M, et al. A novel method to predict the thermal conductivity of nanoporous materials from atomistic simulations[J]. Journal of Non-Crystalline Solids, 2019, 516: 89-98.
- [13] Esposito M, Monnai T. Nonequilibrium thermodynamics and Nose-Hoover dynamics [J]. The Journal of Physical Chemistry B, 2011, 115(18): 5 144-5 147.
- [14] Patil S P, Rege A, Sagardas, et al. Mechanics of nanostructured porous silica aerogel resulting from molecular dynamics simulations[J]. The Journal of Physical Chemistry B, 2017, 121(22): 5 660-5 668.
- [15] Munetoh S, Motooka T, Moriguchi K, et al. Interatomic potential for Si-O systems using Tersoff parameterization[J]. Computational Materials Science, 2007, 39(2): 334-339.
- [16] Deserno M, Holm C. How to mesh up Ewald sums. II. an accurate error estimate for the particle-particle-particle-mesh algorithm[J]. Journal of Chemical Physics, 1998, 109(18): 7 694-7 701.
- [17] Meng Fanhe, Liu Jin, Richards R F. Effect of water vapor on the thermal resistance between amorphous silica nanoparticles[J]. Journal of Applied Physics, 2018, 124: DOI:10.1063/1.5038117.



作者简介: 石钰 (1986—),女,陕西渭南人,博士,副教授,主要从事多孔介质传热传质方面的研究。E-mail:shiyu@xust.edu.cn。