

# **Ph.D . ÉRTEKEZÉS TÉZISEI**

## **SZILIKA NANORÉSZECSKÉK KÖLCSÖNHATÁSAI FOLYADÉK/GŐZ ÉS SZILÁRD/FOLYADÉK HATÁRFELÜLETEKEN**

**KÉSZÍTETTE:**

**TOLNAI GYULA**

**TÉMAVEZETŐ:**

**Dr. HÓRVÖLGYI ZOLTÁN**

**Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem**

**Fizikai Kémia Tanszék**

**2005**

## **BEVEZETÉS**

Munkám során különböző méretű és felületi tulajdonságú amorf szilika nanorészecskék határfelületi (folyadék/gőz és szilárd/folyadék) kölcsönhatásait tanulmányoztam a részecskék méretének és nedvesedőképességének függvényében. Vizsgáltam a határfelületi filmek szilárd hordozó felületére történő átvitelének lehetőségeit, és összefüggést kerestem a részecskék hidrofobitása, valamint határfelületi diszpergálhatóságuk és komprimálhatóságuk között. Továbbá, a határfelületi kölcsönhatásokra kísérleti úton nyert eredményeket összevettem alkalmas elméleti modellek segítségével számítható eredményekkel abból a célból, hogy pontosabb ismereteket nyerjek a határfelületi kölcsönhatások természetéről.

A legfontosabb eredmények az alábbi tézispontokban kerültek összefoglalásra:

## **ÚJ TUDOMÁNYOS EREDMÉNYEK**

I.

Módszert dolgoztam ki Stöber-szilika részecskék kontrollált felületmódosítására. Megmutattam, hogy N,N-trimetilszilil-dimetilkarbamáttal acetonnitril közegben különböző hidrofobitású részecskék állíthatók elő a szililező ágens koncentrációjának változtatásával, és előállíthatók a felületmódosított részecskék stabil alkoszoljai.

II.

Víz/levegő határfelületi filmmérleges vizsgálatok alapján azt találtam, hogy a felületkezeletlen (hidrofil) Stöber-szilika nanorészecskék nedvesedőképessége szignifikánsan változik a mérettel. Nagyobb részecskeméret esetén kisebb haladó vízperemszög értékek adódtak, ami kapcsolatba hozható az előállítás körülményeiben megmutatkozó különbségekkel.

III.

a) Víz/levegő határfelületen lévő felületkezeletlen szilika részecskék oldalnyomás-terület izotermáiból meghatároztam a részecske-részecske taszító kölcsönhatási energiák kísérleti értékeit. Ezeket a DLVO-elméleten alapuló modellszámítások eredményével összevetve megállapítottam, hogy a részecskék közötti kölcsönhatási energia nem írható le a klasszikus DLVO-elmélettel: attól nagyságrendileg nagyobb értékek adódtak. Az eltérést - irodalmi adatok alapján - kapcsolatba hoztam a hidratációs taszító kölcsönhatással.

b) Tanulmányoztam a víz/levegő határfelületen lévő részecskék közötti taszító kölcsönhatási energia hatótávolságát a részecskék méretének függvényében. Úgy találtam, hogy a hatótávolság szignifikánsan nő a részecskék méretével, ami összhangban van a részecskék hidrofilitásának mérettel való növekedésével.

#### IV.

Különböző határfelületi vizsgálati módszerek (BAM, AFM, filmmérleg) együttes alkalmazásával kimutattam, hogy a szilika nanorészecskék hidrofobitása egyértelmű kapcsolatban van a részecskék diszpergálhatóságával, szerkezetképzésével és komprimálhatóságával víz/levegő határfelületen. A hidrofobitás növelése a diszpergálhatóság és komprimálhatóság csökkenését eredményezte, és gátolta a maximálisan tömör illeszkedés magvalósulását a részecskék vízfelszíni monorétegében, amit a részecske-részecske adhézió növekedésének tulajdonítottam.

#### V.

A határrétegbeli (2D) elegyíthetőség elméleti és kísérleti vizsgálatára alkalmas modellt és módszert javasoltam: különböző felületi energiájú szilika nanorészecskék elegyíthetőségét tanulmányoztam filmmérleg és BAM együttes alkalmazásával víz/levegő határfelületen. Úgy találtam, hogy a monomolekulás filmek tanulmányozására bevezetett módszerek alapját képezhetik a nanorészecskés filmek molekuláris filmekkel analóg vizsgálatának is.

VI.

- a) Megmutattam, hogy az integrált optikai hullámvezető szenzor (OWLS) technika megfelelő modell felhasználásával alkalmas Stöber-szilika részecskék alkoholos közegből való szorpciójának tanulmányozására szilárd/folyadék határfelületen, valamint a szolvátrétegnek köszönhető taszító, a makroszkopikus felület és a részecske között fellépő kölcsönhatási energia lecsengési távolságának meghatározására.
- b) A taszító kölcsönhatási energia lecsengési távolságát tanulmányoztam a felületkezeletlen részecskék méretének függvényében. Megállapítottam, hogy ennek nagysága szignifikánsan csökken a részecskék méretével, ami összhangban van a szilika részecskék nedvesedési tulajdonságának a részecskék méretétől való függésével.

## **KÖZLEMÉNYEK AZ ÉRTEKEZÉS TÉMAKÖRÉBŐL**

1. A. Agod, Gy. Tolnai, N. Esmail, Z. Hórvölgyi: Compression of Nanoparticulate Arrays in a Film Balance: Computer Simulations, *Progress in Colloid&Polymer Sci.* 125 (2004) 54-60
2. A. Agod, E. Hild, E. Kálmán, A. L. Kovács, Gy. Tolnai, Z. Hórvölgyi: Contact Angle Determination of Nanoparticles: Real Experiments and Computer Simulations, *J. Adhesion*, 80(10-11) 2004 1055-1072
3. G. Tolnai, A. Agod, M. Kabai-Faix, A. L. Kovács, J. J. Ramsden, Z. Hórvölgyi: Evidence for secondary Minimum Flocculation of Stöber Silica Nanoparticles at the Air-Water Interface: Film Balance Investigations and Computer Simulations, *J. Phys. Chem. B.* 107 11109-11116 (2003)
4. Gy. Tolnai, F. Csempesz, M. Kabai-Faix, E. Kálmán, Zs. Keresztes, A.L. Kovács, J.J. Ramsden, Z. Hórvölgyi: Preparation and characterization of surface-modified silica-nanoparticles, *Langmuir*, 17(19), 2683-2687 (2001)
5. G. Tolnai, G. Alexander, Z. Hórvölgyi, Z. Juvancz, A. Dallos: Stabilization of gas chromatographic stationary phases with nanosized particles, *Chromatographia*, 53 (No. 1/2) 69-75, 2001

## NYILATKOZAT

Alulírott ...**TOLNAI GYULA**.....kijelentem, hogy ezt a doktori értekezést magam készítettem és abban csak a megadott forrásokat használtam fel. Minden olyan részt, amelyet szó szerint, vagy azonos tartalomban, de átfogalmazva más forrásból átvettem, egyértelműen, a forrás megadásával megjelöltem.

Budapest, ...**2005. szeptember 19.**.....

aláírás