TiO_2 szol-gél bevonatok: a szolképződés mechanizmusának vizsgálata molekuladinamikai szimulációval és a bevonatok fényáteresztésének kísérleti fejlesztése

TiO_2 sol-gel coatings: investigation of the sol formation mechanism by molecular dynamics simulations and experimental improvement of coating light transmittance

BORS Adrienn Márta[1], RIEGER Örs István[1], HÖLTZL Tibor[2], HÓRVÖLGYI Zoltán[1], ALBERT Emőke[1]

[1]Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.
[2]Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.
bors.adrienn@edu.bme.hu

ABSTRACT

The aim of this work was to investigate the processes occurring during the preparation of TiO_2 sol-gel coatings using molecular dynamics simulations and to improve their light transmittance experimentally. Precursor sols were prepared by controlled hydrolysis of organometallic compounds in ethanolic media, followed by condensation. The experimental systems were modelled using reactive molecular dynamics simulations in a reactive force field (ReaxFF) combined with the Monte Carlo method. Hydrolysis was found to be most efficient in the presence of an acid catalyst, while condensation occurred after complete detachment of the organic groups. To enhance light transmittance, various template materials were added to the precursor sols. The coatings were deposited on glass substrates by dip coating and, where applicable, subsequently aged in aqueous ammonia vapour. The effect of the surfactant templates on light transmittance varied depending on their type.

Keywords: sol-gel coating, mesoporous TiO_2, enhanced light transmittance, colloid ageing, molecular dynamics simulation

ÖSSZEFOGLALÓ

A munka célja TiO_2 szol-gél bevonatok előállítása során lejátszódó folyamatok vizsgálata molekuladinamikai szimulációval, valamint a bevonatok fényáteresztésének kísérleti úton történő növelése. A prekurzorszolokat fémorganikus vegyületek etanolos közegben végzett kontrollált hidrolízisével, és ezt követő kondenzációjával állítottuk elő. A kísérleti rendszereket reaktív molekuladinamikai szimulációkkal, reaktív erőtér (ReaxFF) alkalmazásával, Monte Carlo-módszerrel kiegészítve modelleztük. A hidrolízis savas katalizátor jelenlétében bizonyult a leghatékonyabbnak, míg a kondenzáció a szerves csoportok teljes leválását követően ment végbe. A fényáteresztés javítása céljából különböző típusú felületaktív anyagokat adtunk a prekurzorszolokhoz. A bevonatokat üveghordozókra *dip coating* technikával vittük fel, majd a felületaktív anyagot tartalmazó bevonatokat vizes ammóniaoldat gőzterében öregítettük. A felületaktív anyagok fényáteresztésre gyakorolt hatása a templát típusától függően változott.

Kulcsszavak: szol-gél bevonat, mezopórusos TiO_2, megnövelt fényáteresztés, kolloid öregedés, molekuladinamikai szimuláció

Acknowledgement: The project supported by the Doctoral Excellence Fellowship Programme (DCEP) is funded by the National Research Development and Innovation Fund of the Ministry of Culture and Innovation and the Budapest University of Technology and Economics.