

# **Zum Einfluss von Polydispersität und Wechselwirkungen auf die Sedimentation von Nanopartikeln**

*M.J. Uttinger<sup>1</sup>, D. Jung<sup>2</sup>, J. Walter<sup>1</sup>, J. Harting<sup>2</sup> und W. Peukert<sup>1</sup>*

*<sup>1</sup>Lehrstuhl für Feststoff- und Grenzflächenverfahrenstechnik (LFG), Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg (FAU), Erlangen, Deutschland*

*<sup>2</sup>Helmholtz-Institut Erlangen-Nürnberg für Erneuerbare Energien, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg (FAU), Erlangen, Deutschland*

Die analytische (Ultra-) Zentrifugation (AZ) ist ein etabliertes Messverfahren in der Partikelanalytik [1, 2]. Durch die Weiterentwicklung von Auswertemethoden der Sedimentationsdaten (sog. Direct-Boundary-Modeling) konnte die Partikelanalyse mittels AZ hinsichtlich des Parameterraums wie z.B. Partikelgröße oder Partikelform erweitert werden [3]. Der Einfluss von Nicht-Idealitätseffekten während der Sedimentation von Nanopartikeln ist ein entscheidender Faktor vor allem für die Analyse von Partikeldispersionen mit erhöhten Konzentrationen. Die Quantifizierung der hydrodynamischen Nicht-Idealität erfolgt mittels dem Gralen Koeffizienten, einem etabliertem Parameter aus der Literatur [4], welcher den Einfluss verschiedener physikalischer Effekte auf das Sedimentationsverhalten der Partikeln beschreibt. Diese beinhalten die Erhöhung des Reibungskoeffizienten und der Viskosität, den Einfluss des Lösemittelrückstroms sowie nicht-spezifische interpartikuläre Effekte. Der Einfluss von hydrodynamischer Nicht-Idealität auf das Sedimentationsverhalten von Nanopartikeln wurde in eigenen theoretischen Vorarbeiten mittels der Brown'schen Dynamik beschrieben [5]. Wir konnten den Gralen Koeffizient für SiO<sub>2</sub> Nanopartikel für unterschiedliche Partikelkonzentrationen (bis ungefähr 5 Volumenprozent) und Partikelgrößen (50 nm - 1000 nm) bestimmen. In dieser Arbeit wird der Einfluss der hydrodynamischen Nicht-Idealität für SiO<sub>2</sub> Partikeln mit unterschiedlichen Oberflächenfunktionalisierungen und Partikelgrößen (200 nm – 1000 nm) experimentell untersucht (siehe Abbildung 1). Hierzu wird Einfluss der Polydispersität die Sedimentation gelegt (siehe Abbildung 2). Unsere experimentellen Ergebnisse werden durch Lattice-Boltzmann Simulationen unterstützt, um den Einfluss von interpartikulären elektrostatischen und van der Waals Wechselwirkung zu quantifizieren (visualisiert in Abbildung 3). Dieser Ansatz

stellt eine vielseitig einsetzbare Methode für unterschiedliche polydisperse, nanopartikuläre Dispersionen mit starken Wechselwirkungen dar [1,3].

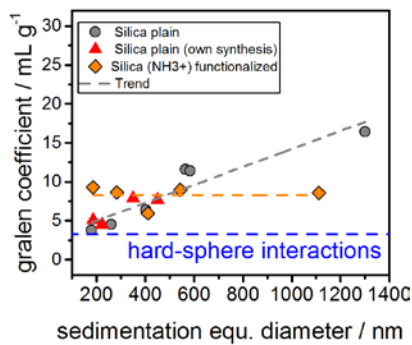


Abbildung 1: Abhängigkeit des Galen Koeffizienten von dem Zeta-Potential der Silika Dispersionen

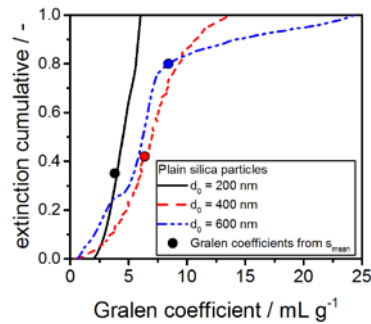


Abbildung 3: Galen Koeffizient Verteilungen für verschiedene Silika Dispersionen mit unterschiedlichen mittleren Partikelgrößen

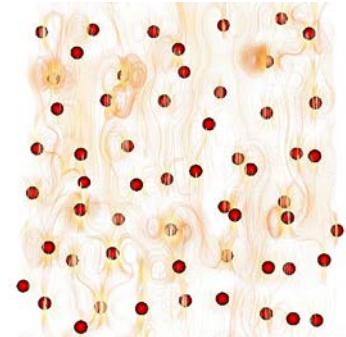


Abbildung 2: Visualisierung der Sedimentation von Nanopartikeln mittels Lattice-Boltzmann-Simulationen

## Referenzen

- [1] T. Detloff et al., "Particle size distribution by space or time dependent extinction profiles obtained by analytical centrifugation (concentrated systems)", Powder Technology, 2007
- [2] S. E. Wawra, et al., "Determination of the two-dimensional distributions of gold nanorods by multiwavelength analytical ultracentrifugation", Nature communications, 2018
- [3] J. Walter, et al., „New possibilities of accurate particle characterisation by applying direct boundary models to analytical centrifugation”, Nanoscale 2015
- [4] S. E. Hardin et al., "The concentration-dependence of macromolecular parameters", Biochemical Journal, 1985
- [5] M. J. Uttinger, et al., "Brownian dynamics simulations of analytical ultracentrifugation experiments exhibiting hydrodynamic and thermodynamic non-ideality", Nanoscale, 2017