

## Formulár ZK - Záverečná karta projektu

<b>Riešiteľ:</b> RNDr. Peter Komadel, DrSc.	<b>Evidenčné číslo projektu:</b> APVV-51-050505
<b>Názov projektu:</b> Organické modifikácie prírodných nanomateriálov	

<b>Na ktorých pracoviskách bol projekt riešený:</b>	Ústav anorganickej chémie SAV
	Ústav polymérov SAV
	Envigeo, a.s.
<b>Ktoré zahraničné pracoviská spolupracovali pri riešení (názov, štát):</b>	University of Illinois at Urbana-Champaign, Urbana, IL, USA
	Institute of Catalysis and Surface Chemistry, PAN, Krakow, Poland
	University of Vienna, Austria

<b>Udelené patenty alebo podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory vychádzajúce z výsledkov projektu:</b>	
<b>Publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu (uveďte i publikácie prijaté do tlače):</b>  <b>Uvádzajte maximálne päť najvýznamnejších publikácií.</b>	J. Hrachová, P. Komadel, V. Š. Fajnor: The effect of mechanical treatment on the structure of montmorillonite. <i>Materials Letters</i> , <b>61</b> , 3361-3365 (2007).
	S. Andrejkovičová, I. Janotka, P. Komadel: Evaluation of geotechnical properties of bentonite from Lieskovec deposit, Slovakia. <i>Applied Clay Science</i> , <b>38</b> , 297-303 (2008).
	J. Hrachová, P. Komadel, I. Chodák: Effect of montmorillonite modification on mechanical properties of vulcanized natural rubber/clay composites. <i>Journal of Materials Science</i> , <b>43</b> , 2012-2017 (2008).
	E. Scholtzová, L. Smrčok: Hydrogen bonding and vibrational spectra in kaolinite-dimethylsulfoxide – dimethylselenoxide intercalates – a solid-state computational study. <i>Clays and Clay Minerals</i> , <b>57</b> , 54-71 (2009).
	J. Madejová, H. Pálková, M. Pentrák, P. Komadel: Near-infrared spectroscopic analysis of acid-treated organo-clays. <i>Clays and Clay Minerals</i> , <b>57</b> , 392-403 (2009).
<b>V čom vidíte uplatnenie výsledkov projektu:</b>	<b>V environmentálnych aplikáciách ako sorbentov a pri výrobe polymérnych nanokompozitov.</b>

## Charakteristika výsledkov

### Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu (max. 20 riadkov) - slovensky:

V súlade s hlavným cieľom projektu sa získali nové poznatky o vlastnostiach prírodných nanomateriálov na báze slovenských bentonitov a porovnali sa so zahraničnými materiálmi. Spolurobteľ projektu Envigeo, a.s. dobroval natrifikáčnu linku a začal vyrábať natrifikované bentonity lepšej kvality pre komerčné využitie z bentonitu Jelšový potok. Viaceré bentonity alebo ich jemné frakcie sa modifikovali rôznymi organickými látkami a charakterizovali sa súborom fyzikálno-chemických metód. Zistilo sa, že ich sorpčné vlastnosti sú perspektívne pre využitie v environmentálnych aplikáciách. Pri sorpciach priemyselného farbiva Acid Red 88 aj difenylu boli najefektívnejšími sorbentmi organoíly s veľkými hexadecyltrimethylamónnymi katiónmi. Objemné organické katióny mali najväčší efekt aj na stabilizáciu Fe(II) v redukovanom nontronite a na zvýšenie stability organoílov pri intenzívnom mletí. Pomocou IR spektroskopie sa sledovali interakcie organických molekúl s ilovými minerálmi. Polarizačné IR merania filmov poskytli cenné informácie najmä pre trioktaedrické smekty. Navrhla a odskúšala sa výpočtová metóda na podrobnejšiu analýzu dynamiky interkalovaných molekúl aj kaolinitovej 1:1 vrstvy, ktorú bude možné aplikovať aj pre zložitejšie 2:1 vrstevnaté silikáty interkalované relatívne väčšími organickými molekulami. Pri výskume polymérnych nanokompozítov sa dôležité výsledky získali systematickou modifikáciou povrchu plní. Dopracovala sa metóda charakterizácie nanokompozítov reologickými meraniami, ktorá využíva porovnanie cez parameter rozpustnosti. Takto možno kvalitatívne predikovať aj mechanické vlastnosti pripravených nanokompozítov, čo sa potvrdilo so sériou organoílov v dvoch polymérnych matriciach, v styrén-butadiénovom kaučuku a v polykaprolaktóne. Vyšší stužujúci efekt sa pre kaučuk dosiahol modifikáciou povrchu organokatiónmi s viacerými dlhými alifatickými reťazcami.

### Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu (max. 20 riadkov) - anglicky:

In accordance with the main project objectives new information on the properties of natural nanomaterials based on Slovak bentonites were obtained and compared with those of foreign materials. Envigeo, a.s., a cooperating partner, finished his natrification line and has started production of sodium bentonites of higher quality from Jelšový potok bentonite for commercial utilisation. More bentonites or their fine fractions were modified with various organic substances and were characterized by a set of physico-chemical methods. It was found that their sorption properties are perspective for environmental applications. Organoclays with big hexadecyltrimethylammonium cations were the most effective sorbents for the industrial dye Acid Red 88 as well as for biphenyl. Voluminous organic cations showed the biggest effect also on stabilisation of Fe(II) in reduced nontronite and on the stability of organoclays subjected to intense grinding. IR spectroscopy was employed to follow interactions of organic molecules with clay minerals. Polarised IR measurements of films provided valuable information particularly for trioctahedral smectites. A computational method for evaluation of the dynamics of both kaolinite 1:1 layer and an intercalated molecule has been tested and approved. The method has shown to be applicable also for more complex 2:1 layer silicates intercalated by relatively large organic molecules. Important results in investigation of polymer nanocomposites were achieved via systematic modification of the fillers. A method for characterization of nanocomposites using comparison through the solubility parameter was worked out. This allows also for quantitative prediction of mechanical properties of prepared nanocomposites, as was confirmed on series of organoclays in two polymer matrices, in styren-butadien rubber and in polycaprolactone. Higher reinforcing effect for rubber was achieved by surface modification with organocations containing multiple long aliphatic chains.

Podpisom záverečnej karty riešiteľ vyjadruje svoj súhlas so zverejnením údajov v nej uvedených.

Podpis zodp. riešiteľa: .....

Dátum: .....

Podpis štatutárneho zástupcu: .....

Pečiatka: