

# AgfaLabs toont zich op Surface 2016



Hoe maak je een bestaande coating-formulering eco-vriendelijker? Een antwoord op deze vraag is te vernemen op de stand van AgfaLabs.

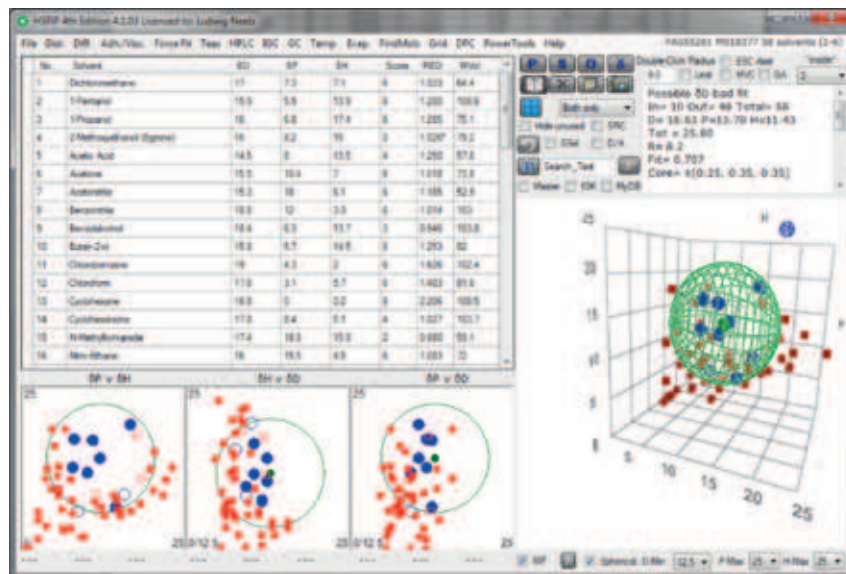
Het is inderdaad genoegzaam bekend dat de trend bestaat om alsmaar "groenere" coatings te ontwikkelen op basis van minder toxische en bio-gebaseerde solventen. Maar hoe begin je er aan? Het ontwikkelen van een compleet nieuwe formulering vraagt immers tijd en hoe zal je er in slagen om de gewenste performantie van de coating te behouden, laat staan te verbeteren?

Het gebruik van de Hansen Oplosbaarheidstheorie kan een oplossing bieden. Door kennis van de Hansen Oplosbaarheidparameters (HSP's) van de samenstellende bestanddelen van een coatingformulering kan een formuleerder het biomateriaal "inpluggen" in een bestaande verf, vernis of andere coating zonder veel tijdverlies. Een producent van bio-gebaseerde materialen kan dan op zijn beurt aantonen dat zijn bio-geraffineerde producten valabele alternatieven zijn voor de klassieke solventen en binders.

Om de werkwijze voor te stellen, beschouwen we het voorbeeld van een bestaande formulering waarin tetrahydrofuraan (THF) een belangrijk aandeel heeft in het gedrag van een coating. De initiële stabiliteit van de solutie, de spreiding op het substraat, het drogen en het uiteindelijke visuele aspect van de coating worden in min of meerdere mate door dit solvent bepaald.

THF wordt echter beschouwd als schadelijk en mutageen, zodat een vervanging van dit solvent zich opdringt zonder dat het eindproduct van de markt verdwijnt.

Door de HSP's te bepalen van de polymere binder van de coating en die te vergelijken met deze van THF, wordt duidelijk welke rol door het solvent echt wordt gespeeld en kan men op een gerichte manier op zoek naar een vervanger. De stelregel van Hansen's theorie is immers: wanneer een polymeer en een solvent vergelijkbare oplosbaarheidsparameters vertonen zijn zij compatibel met elkaar. M.a.w. het solvent zal het polymeer oplossen.



Figuur: Hansen Oplosbaarheidparameters van een polymere binder in een coatingformulering. De volle blauwe bollen zijn solventen voor het polymeer, de rode kubussen zijn non-solventen. Merkwaardig genoeg ligt THF buiten de oplosbaarheidssfeer (transparante blauwe bol).

De Hansen-parameters beschrijven de oplosbaarheid in termen van apolaire of dispersieve interacties (dD), van polaire interacties (dP) en van waterstofbrugvorming (dH). Elk polymeer, solvent, pigment, dispergator kan worden voorgesteld als een punt in de drie-dimensionale Hansenruimte. Rond dit punt strekt zich de oplosbaarheidssfeer uit met radius R. Solventen die binnen deze sfeer vallen zullen goede solventen zijn voor de component in kwestie. Solventen die buiten de oplosbaarheidssfeer vallen zijn slechte solventen. Een aardigheid: Een mengsel van twee non-solventen kan ook een solvent opleveren dat pal in de oplosbaarheidssfeer ligt!

In ons voorbeeld werden de HSP's van de polymere binder bepaald op: dD = 18.63, dP = 13.70, dH = 11.43 en de straal van de oplosbaarheidssfeer bedraagt 8.2. (zie afbeelding hieronder). Merkwaardig is de positie van THF ten opzichte van het berekende oplosbaarheidsdomein, het ligt er namelijk buiten! Nochtans is het aandeel van THF in de solventmix substantieel: 50%. Zoals hierboven aangegeven is het samenspel met andere (meer polaire) solventen in de formulering van die aard dat de uiteindelijke solventmix wel in staat is om de binder

op te lossen. De HSP's van de volledige mix zijn: dD = 17.2, dP = 6.68, dH = 9.53.

Op basis van bovenstaande informatie en gebruik makend van beschikbare databanken, kon een gepaste vervanger voor THF worden geselecteerd die a) mengbaar met de andere solventen is, b) een voldoende laag kookpunt heeft, c) een goede performantie levert aan de uiteindelijke coating, d) niet duurder is en e) geen gezondheidsrisico inhoudt. De naam van deze kandidaat: 1,3 dioxolaan.

## Besluit:

In het licht van dit voorbeeld konden we zien hoe de Hansen Oplosbaarheidstheorie toelaat om een solvent in een bestaande formulering te vervangen door een minder schadelijk alternatief, zonder dat daarvoor veel experimenteel werk moest worden geleverd en zonder kostbare tijd te verliezen. Dezelfde methodologie kan worden toegepast om andere componenten in een formulering te vervangen door "groenere" alternatieven.

## Voor meer informatie:

AgfaLabs  
Frank Ruttens