

## 塗料の配合における結晶形態の制御，あるいは添加物の設計

晶癖の予測，表面構造の解析および添加物の設計によって，色の濃さ，色合いおよび色飽和度を改善し，大きく性能が向上した顔料ができます。

BASF の研究者達は最近の研究の中で [1]，塗料の配合時に相乗効果をもたらすような高性能添加物の設計に分子モデリングの手法を応用して大きな成果をあげました。塗料のレオロジー的性質，顔料の分散および形成される塗膜の光学的な性質は，顔料粒子のコロイド安定性と密接に関係しています。

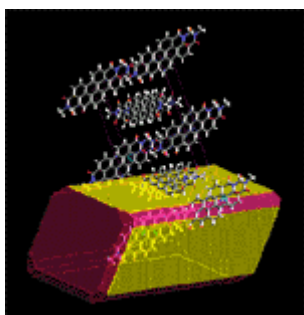


図 1 付着エネルギーの計算から求められた C. I. Pigment Red の結晶の晶癖

第一段階として，MS Modeling Morphology モジュールの付着エネルギー法を使用して，工業的に重要な C. I. Pigment Red 179 の晶癖を予測することに成功しました (図 1)。その結果，[011] 結晶面が主要な結晶面であることを確認し，その詳細を解析しました。考えられる添加物の活性を推定するため，(011) 面に数個の分子を配置して得られる相対的な分子間エンタルピーを計算して，相互に比較しました (図 2)。これらの計算から，ペリレン-3,4-ジカルボン酸イミド (PDCI) が有望な添加物候補であることが示されました。吸着実験および結晶化実験の結果はこの推定が極めて優れた予測手段であることを証明しました。計算に基づく今回の研究は，晶癖の予測，表面構造の解析および添加物の設計が，いかにして色の濃さ，黄色みの増した色合いおよび色飽和度を改善し，大きく性能が向上した顔料に結びつくかを証明しています。

### Reference

1. P. Erk, J. Hetzenegger, A. Bohm, European Coating Journal, 906 (1997) Crystal Structure Determination from Conventional Powder

### Industry Sector

塗料，顔料

### Organization

BASF 社 (ドイツ)

### Key Product

Morphology

図 2 ペリレン・レッドの(011)結晶面上におけるテラーメイドの添加物の最小エネルギー配置

