

インクジェットの分散安定性を予測するための分散剤-顔料相互作用エネルギー計算

レックスマーク・インターナショナル社の科学者達は、分子力学とモンテカルロ法を使って、ポリマ分散剤の疎水性のモノマーユニットと顔料結晶の間の相互作用エネルギーを計算することによって、インク分散性の安定性を予測しました。

インクは染料か顔料を使って作られていますが、顔料は、解像度の観点から、より良い染色堅ろう度と印刷品質を有しています。しかしながら、顔料は不溶性であることから、顔料はポリマー性の分散剤を用いてインク中に安定化させる必要があります。溶剤、顔料結晶とポリマー性分散在の間の相互作用エネルギーが、インク分散の安定性を決定します。

ポリマー性分散剤は2つの構成要素からなっています。-親水基と顔料に対するアンカーとして働く疎水基です。親水基は溶剤中に静電層を作ります。分散剤が安定化するために、ポリマーは顔料に対して強いアンカーを形成しなければいけません。高分子化学者が有効な分散剤を設計し、結果として起こる分散の安定性を予測することができるのは重要なことです。

レックスマーク・インターナショナル社の科学者達は、ポリマーと顔料の間の結合を研究するために分子モデリング法を使っています。彼らは、2つの分子の出発位置を作るために、BIOVIAのC2・Blendsモジュールのモンテ・カルロアプローチを使い、次に、それらをBIOVIAのCerius2のUniversal Force Field (UFF)を使って最小化しました。彼らは、力場パラメーターを使って、その組み合わせの相互作用エネルギーを測定し、これを10,000組繰り返し、平均値を相互作用エネルギーとして採用しました。

彼らは、長鎖炭化水素および／または芳香族基を含むモノマーが、より親水性のエチレングリコールとプロピレングリコールより、顔料表面と強く相互作用することを見出しました。また、彼らは、相互作用の強度が、顔料を変えることによって変わるということも見出しました。これらの結果を用いて、研究者達は分散剤を顔料にマッチさせ、これによって、両者の間のエネルギーを極小化することができるようになりました。この研究はまた、分散材構造の設計と分散安定性の予測に役立ちました。

参考文献

Jing X Sun¹, Gregory W Haggquist², Bradley Beach¹, "Dispersant-Pigment Interaction Energy Calculations to Predict Ink Jet Dispersion Stability"

1. 740 New Circle Road, Lexington, KY 40511
2. 6555 Monarch Road, Longmont, CO 80503

Organization

Lexmark
International

Products

BIOVIA Materials Studio Blends