

Hansen solubility parameters can take the guess work out of new formulations

I parametri di solubilità Hansen giocano la carta vincente per le nuove formulazioni

Frank Ruttens, Agfa-Labs

LESS LAB WORK, HIGHER EFFICIENCY AND A FASTER TIME TO MARKET

When Dr. Frank Ruttens, of Agfa-Labs (Belgium) talks about Hansen Solubility Parameters, his face lights up as he starts drawing circles and diagrams. Agfa-Labs is the open innovation platform of Agfa Gevaert NV for materials and coatings research.

“We are a research department with about 150 people, and we offer R&D services to third parties. We make use of advanced research tools such as High Throughput Formulation and High Throughput Screening, but our unique selling point is our expertise on Hansen Solubility Parameters (HSPs). We can determine the HSP values of unknown substances”.

Why is that interesting?

And what are Hansen Solubility Parameters, anyway?

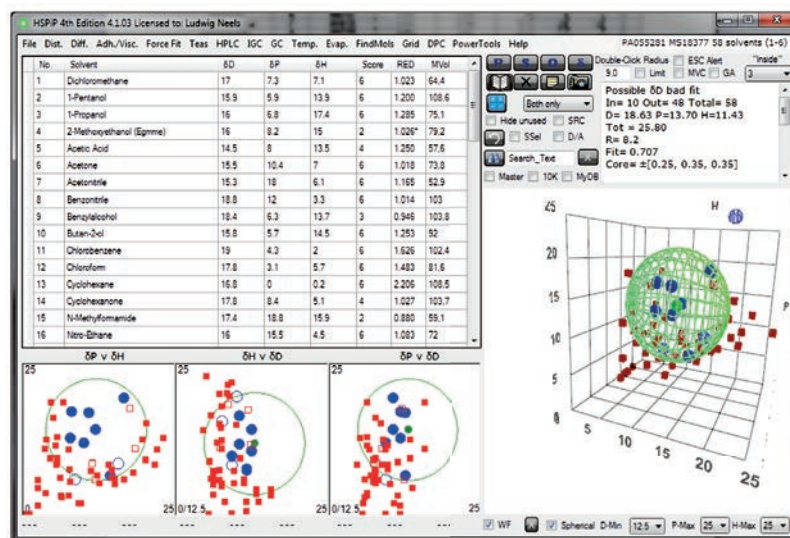
Hansen solubility parameters were developed by Charles M. Hansen in his Ph.D thesis in 1967 as a way of predicting solubility behavior. Will a solvent ‘work’ - will it dissolve

MINOR LAVORO DI LABORATORIO, ELEVATA EFFICIENZA E TEMPI BREVI DI IMMISSIONE DEL PRODOTTO SUL MERCATO

Quando il Dr. Frank Ruttens di Agfa-Labs (Belgio) parla dei Parametri di Solubilità Hansen, la sua espressione si ravviva iniziando a tracciare cerchi e diagrammi. Agfa-Labs è la nuova piattaforma per l'innovazione di Agfa Gevaert NV dedicata alla ricerca di materiali e rivestimenti.

“Siamo un ente di ricerca che conta circa 150 persone e offriamo servizi R&D a terzi. Facciamo uso di strumenti di ricerca avanzati come la Formulazione e lo Screening ad alto rendimento, ma il nostro vero punto di forza è la nostra alta conoscenza dei Parametri della Solubilità Hansen (HSP). Possiamo determinare i valori HSP di sostanze non note”.

Perché è una questione così interessante? E che cosa sono i Parametri di Solubilità Hansen? Questi sono stati sviluppati da Charles M. Hansen nella sua tesi di dottorato nel 1967 come modalità di previsione della risposta alla solubilità. Un solvente sarà efficace? Si sceglierà e formerà una soluzione con un particolare materiale o no? Hansen ha messo a punto un modello basato su tre parametri del



and form a solution with a particular material or not? Hansen developed a model based on three component parameters - dispersion, polar and hydrogen bonding – the coordinates of which are represented as a dot in a 3-dimensional space, each dot being surrounded by what is known as a solubility sphere.

The radius of the sphere is called the interaction radius. These spheres are the circles drawn by Dr. Ruttens, to illustrate what he means.

“The principle is one that has long been known: like seeks like, and like dissolves like,” he explained. “The HSP of a solvent and that of the solute will be close together. We can determine how close together the spheres are, or how far apart”.

He added: “Performance is affected by HSP. The shorter the HSP distance, the more likely they are to be compatible and therefore the better the solubility. Simply put: in a blend, two polymers must like each other, or they won’t bond. Another example would be a plasticizer, which has to stay in the polymer matrix. It’s about controlling solubility”.

“But if we can identify the solvents on the basis of their HSP, we can create designer solvents by mixing solvents together that are tailored to a specific target material”.

The HSP used to be determined by exposing a test material to a vast range of different solvents to find out which were good and which were bad.

Today, much of these data can be predicted with the help of software. Agfa-Labs originally used the technology for the development of UV curable inks, and is now offering it to their clients.

It is a tool that can be used in a huge variety of applications, in sectors ranging from the petrochemical and pharmaceutical industry to green solvents, coatings, polymer processing and nanotechnology. In one case, it enabled them to replace a toxic solvent by a more environmentally-friendly solvent - with the exact same HSP. “We took one out, and put another one in,” said Ruttens. “It was actually a question of simple plug and play”.

There are still large numbers of substances for which the parameters are unknown.

The HSP of many bioplastics, for example, remain to be determined. Ruttens: “Yet once we determine the HSP values, we can make accurate predictions about which building blocks will work together. It means that much less lab time is needed, reducing costs, improving performance – and considerably speeding up the time to market for new formulations”.

componente, dispersione, legame polare e all'idrogeno, le cui coordinate sono rappresentate da un punto nello spazio tridimensionale; in questo spazio, ciascuno di essi è circondato da una sfera della solubilità, come da definizione. Il raggio della sfera è denominato raggio di interazione e queste sfere sono cerchi tracciati dal Dr. Ruttens, per illustrare quello che intende dire.

“Il principio è noto da molto tempo: simile cerca simile e simile dissolve simile”, ha spiegato. “Gli HSP di un solvente e quelli di un soluto saranno correlati. Possiamo determinare il grado di correlazione e di disuguaglianza fra le sfere”. Ha poi aggiunto: “la prestazione è influenzata da HSP. Quanto minore è la distanza degli HSP, tanto maggiore sarà la compatibilità degli stessi e quindi migliore la solubilità. In termini semplici: in una miscela, due polimeri devono essere simili fra loro, in caso contrario, non si legheranno. Un altro esempio potrebbe essere riferito al plastificante che deve rimanere nella matrice del polimero. E' un modo per controllare la solubilità”.

“Eppure, se possiamo individuare i solventi sulla base dei loro HSP, possiamo anche creare solventi specifici miscelando una serie di questi e personalizzandoli in base ad un materiale target specifico.”

Gli HSP venivano un tempo determinati esponendo un materiale da test ad una vasta serie di solventi diversi fra loro così da trovare il più e il meno adatto allo scopo. Allo stato attuale, molti di questi dati possono essere previsti con l'aiuto di un software.

In origine Agfa-Labs utilizzava la tecnologia per lo sviluppo di inchiostri reticolabili a UV e attualmente la offre alla propria clientela. Si tratta di uno strumento che può essere utilizzato per una vasta serie di applicazioni, in settori variabili dall'industria petrolchimica e farmaceutica fino ai settori dei solventi verdi, dei rivestimenti, del trattamento dei polimeri e della nanotecnologia. In un caso, li ha messi nelle condizioni di sostituire un solvente tossico con uno più ecocompatibile, esattamente con gli stessi HSP. Ne abbiamo tolto uno e inserito un altro”, ha affermato Ruttens. “Si è trattato di un semplice intervento “plug and play”.

Esistono ancora numerose sostanze i cui parametri sono ignoti. Gli HSP di molte bioplastiche, ad esempio, devono ancora essere definiti. Ruttens: “In ogni caso, una volta determinati i valori HSP, siamo in grado di tracciare previsioni accurate su quali blocchi da costruzione agiranno in modo vantaggioso insieme. Ciò significa che saranno richiesti tempi meno lunghi in laboratorio, che si ridurranno i costi migliorandoli, che la prestazione ne risulterà più avanzata e i tempi di immissione delle nuove formulazioni sul mercato verranno accelerati”.