

Slimmer samengestelde coatings dankzij een analytische benadering

15 september 2026, 15:00

Pieter Samyn

Van vallen en opstaan naar voorspellend, met kennis onderbouwd coatingdesign

Coatingformules zijn nog vaak afhankelijk van een proces van vallen en opstaan. Maar wat als analytische gegevens u konden helpen om prestaties te voorspellen nog voor er laboratoriumtests worden uitgevoerd? Door de samenstelling, structuur en prestaties te verenigen, helpt analytisch coatingdesign u om betere beslissingen over de samenstelling te nemen, het aantal tests te verminderen en te begrijpen waarom een coating al dan niet succesvol is.



Als coatingformules worden samengesteld op basis van een analytische benadering, verschuift de ontwikkeling van een overwegend empirisch proces van vallen en opstaan naar een datagestuurde methodologie die steunt op wetenschappelijk inzicht in de verbanden tussen samenstelling, structuur, verwerking en prestaties. Analytische chemie en technieken voor materiaalkarakterisering leveren daarbij kwantitatieve informatie op die beslissingen over de samenstelling stuurt, de ontwikkeling versnelt, het verbruik van grondstoffen vermindert en de robuustheid van producten verbetert.

Bij deze ontwikkelingsmethode op basis van kennis bestaat een van de grootste uitdagingen erin om inzicht te krijgen in de rol van additieven. Formuleerders beschrijven een coating doorgaans door aan te geven wat erin zit: 2% dispergeermiddel, 5% was, 10% ligninevulstof... Op zich zegt dat echter weinig over de manier waarop een additief de prestaties van de coating beïnvloedt. In de praktijk worden de prestaties van een coating immers niet bepaald door de concentratie van het additief, maar door de wisselwerking tussen het additief en de polymeermatrix. Twee coatings die precies dezelfde hoeveelheid additieven bevatten, kunnen aanzienlijk verschillen wat hechting, corrosiebestendigheid, barrière-eigenschappen of robuustheid betreft, omdat de additieven op verschillende manieren inwerken op het coatingnetwerk. Bij voorspellend design zijn additief-matrixinteracties dan ook vaak belangrijker dan de additiefconcentratie zelf. In een epoxycoating werkt een dispergeermiddel, uithardingsmiddel, silaan, was, corrosieremmer of biogebaseerd additief doordat het een wisselwerking aangaat met het polymeernetwerk. De prestaties worden

daarbij bepaald door de eigenschappen van de grensvlakken en de dispersie van het additief.

Ontdek alle artikels in deze reeks

- De stille ingrediënten achter krachtige, milieuvriendelijke coatings
- Biologische additieven: haal meer uit uw reststoffen
- Van gewasresten tot hoogwaardige coatings
- Hergebruik van eierschaalafval als functionele vulstoffen voor coatings
- Van landbouwafval tot hoogwaardige coatings
- Zijn biogebaseerde isocyanaten in polyurethaancoatings een goed idee?
- Biogebaseerde corrosiewerende additieven deel 1
- Biogebaseerde corrosiewerende additieven deel 2
- Slimmer samengestelde coatings dankzij een analytische benadering ? Huidig artikel
- Hoe kiest u biogebaseerde bindmiddelen voor coatings?

Waarom interacties tussen additieven en matrices van belang zijn

Neem bijvoorbeeld een epoxycoating die een biogebaseerde vulstof zoals lignine, cellulose of biochar bevat. Het feit dat de samenstelling van de coating 10 wt% (gewichtsprocent) vulstof bevat, levert op zich heel weinig informatie op. Waar het echt om draait, is hoe het additief in de coating wordt opgenomen en hoe het op zijn omgeving inwerkt, bijvoorbeeld wanneer het:

- een waterstofbinding aangaat met het epoxynetwerk;
- de verknopingsdichtheid verandert;
- de verspreiding van de deeltjes verbetert of verslechtert;
- holtes aan het grensvlak vormt;
- de mobiliteit van polymeren beperkt;
- de transporteigenschappen van water verandert.

Het zijn die effecten die doorslaggevend zijn voor de prestaties van de coating.

In veel industriële datasets kunnen die interactie-indicatoren veel meer voorspellen dan de nominale additiefbelasting, omdat ze rekening houden met de daadwerkelijke chemische samenstelling en microstructuur van het additiefsysteem in de coating. Vanuit het perspectief van design op basis van machine learning is de concentratie van additieven vaak een zwakke voorspeller. De kwantitatieve interactie-indicatoren geven daarentegen een direct beeld van de onderliggende chemische samenstelling en microstructuur die bepalend zijn voor de prestaties.

Een belangrijke doelstelling van de moderne analytische coatingwetenschap bestaat er dan ook in kwalitatieve begrippen zoals ‘goede compatibiliteit’ of ‘sterke interactie’ om te zetten in meetbare numerieke kenmerken.

Hoe een analytisch coatingdesign het zoekwerk vermindert

De traditionele methode om coatings te formuleren steunt vaak op het herhaaldelijk aanpassen van bindmiddelen, pigmenten, vulstoffen, oplosmiddelen en additieven, tot de gewenste prestaties zijn bereikt. Die aanpak is weliswaar doeltreffend, maar ook erg tijdrovend en geeft niet altijd inzicht in de onderliggende redenen voor succes of mislukking. De echte kracht van een analytische benadering om coatingformules samen te stellen ligt niet in de karakterisering zelf, maar in het feit dat ze analytische gegevens gebruikt om de coatingprestaties te voorspellen en tegelijkertijd de uiteindelijke prestaties van de coating te optimaliseren nog voordat er langetermijntests worden uitgevoerd.

Een analytische formuleringsstrategie heeft als doel antwoord te geven op fundamentele vragen zoals:

- Wat is de exacte chemische samenstelling van de coating?
- Hoe zijn de componenten verdeeld binnen de coating?
- Hoe beïnvloeden moleculaire interacties de reologie, filmvorming en uitharding?
- Welke formuleringsparameters hebben de grootste invloed op duurzaamheid, hechting, barrière-eigenschappen en uiterlijk?
- Hoe kunnen de prestaties worden voorspeld voordat er uitgebreide tests worden uitgevoerd?

Door die verbanden te begrijpen, kunnen formuleerders hun coatings met een grotere precisie en zekerheid ontwerpen.

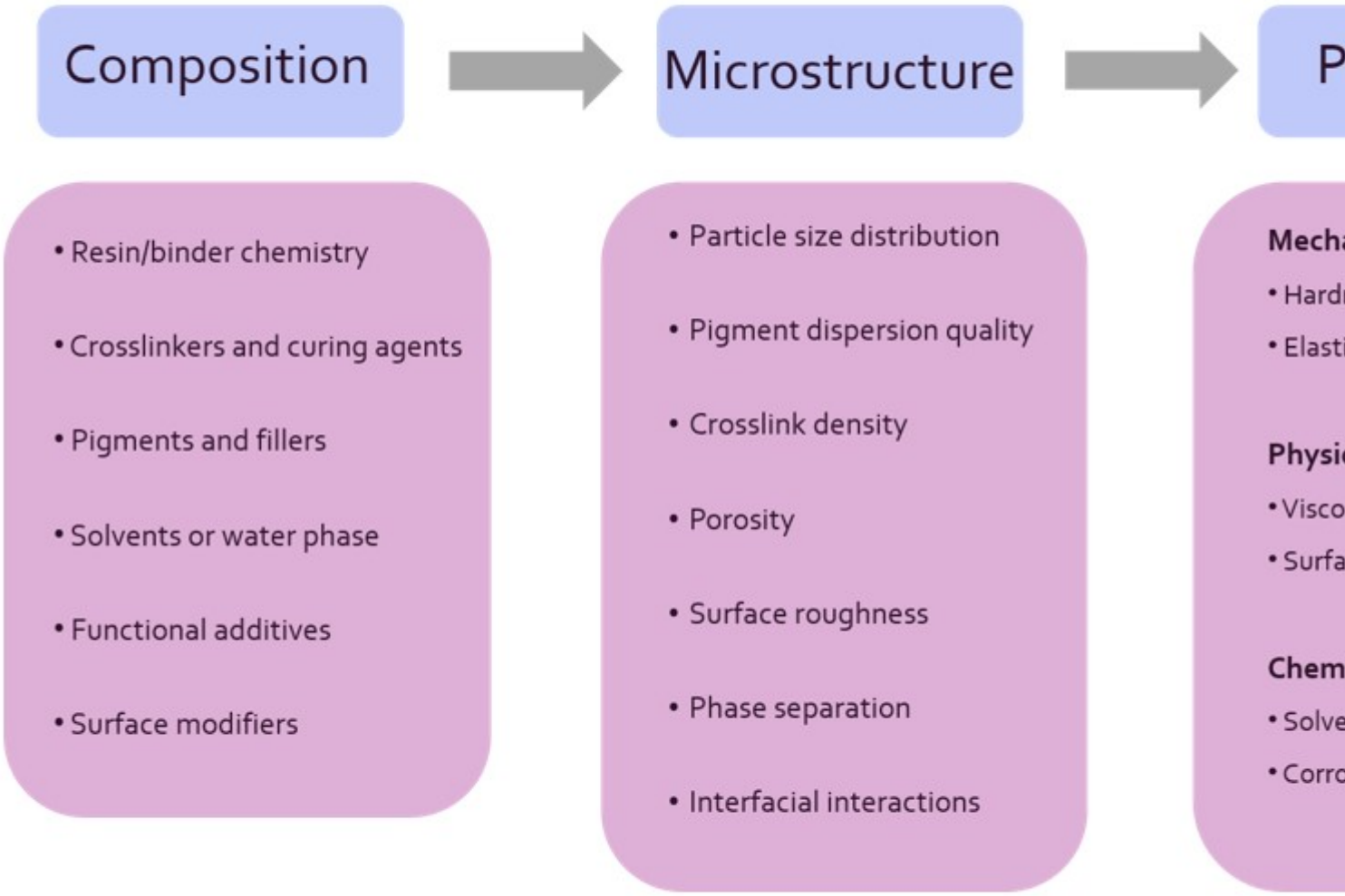
Het verband tussen de samenstelling, structuur en prestaties van coatings

De samenhang tussen samenstelling, structuur en eigenschappen van coatings beschrijft hoe de bestanddelen de interne structuur van de coating bepalen, die op haar beurt doorslaggevend is voor de prestaties. De samenstelling bestaat uit het bindmiddel en de pigmenten, vulstoffen, additieven, oplosmiddelen en verknopingsmiddelen. Die componenten werken tijdens het formuleren, aanbrengen en uitharden van de coating op elkaar in, waardoor een specifieke microstructuur ontstaat, gekenmerkt door de verknopingsdichtheid, faseverdeling, porositeit, deeltjesdispersie, hechting tussen oppervlakken en oppervlaktemorfologie (Figuur 1).

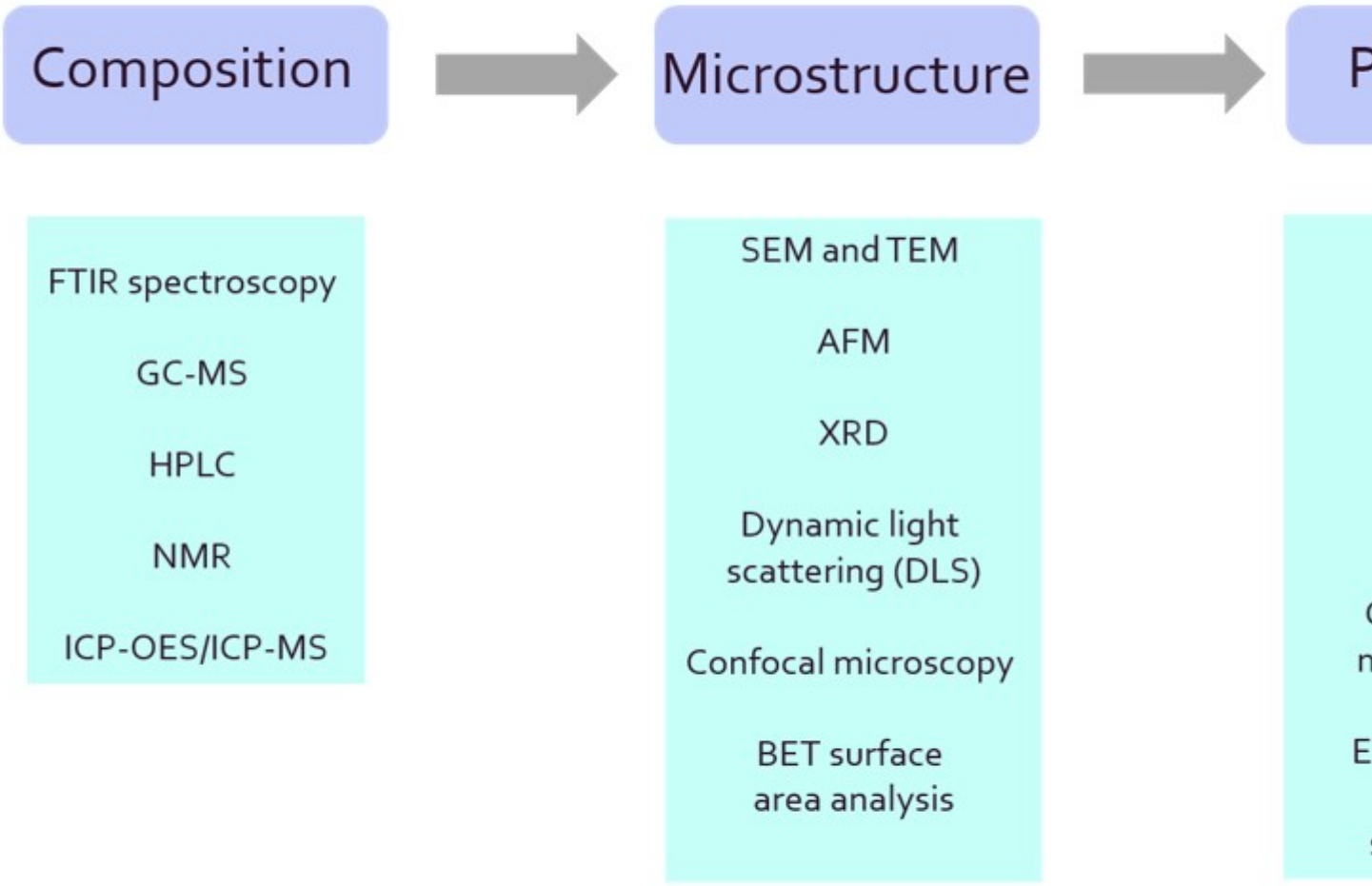
De resulterende structuur heeft rechtstreeks invloed op de eigenschappen van de coating, zoals hardheid, flexibiliteit, hechting, chemische bestendigheid, corrosiebescherming, glans en duurzaamheid. Zo kan het verhogen van de verknopingsdichtheid van epoxy bijvoorbeeld de chemische weerstand en de hardheid verbeteren, maar de flexibiliteit verminderen. In dezelfde optiek kan een betere verspreiding van de pigmenten en vulstoffen de barrière-eigenschappen en mechanische prestaties optimaliseren, terwijl een slechte verspreiding defecten kan veroorzaken die de afbraak versnellen (Figuur 2).

Door inzicht te krijgen in die verbanden kunnen formuleerders verder gaan dan empirische methoden waarbij elke verhouding opnieuw moet worden getest. Door samenstelling aan structuur en structuur aan prestaties te koppelen met behulp van analytische technieken zoals FTIR, DSC, DMA, reologie en microscopie, kunnen coatingwetenschappers voorspellende modellen uitwerken die een datagestuurd design en datagestuurde optimalisatie van geavanceerde coatingsystemen

mogelijk maken.



Figuur 1: de relaties tussen de structuur en eigenschappen van een coating vaststellen door inzicht te verwerven in fundamentele parameters op verschillende niveaus in het ontwikkelingsproces van de coating.



Figuur 2: de beschikbaarheid van diverse analytische instrumenten die tijdens de verschillende fasen van het ontwerp en de ontwikkeling van coatings kunnen worden ingezet.

Van analytische data naar voorspellend coatingdesign

De toekomst van de ontwikkeling van coatingformules ligt in de combinatie van analytische chemie, materiaalkunde en datawetenschap. In plaats van eindeloze experimenten uit te voeren, kunnen formuleerders steeds vaker vertrouwen op meetbare interactie-indicatoren die het werkelijke gedrag van additieven binnen de coatingmatrix weergeven. In de verschillende fasen van coatingdesign en -ontwikkeling kunnen analytische instrumenten helpen om de samenstelling van

de coating te optimaliseren en beslissingen te nemen (Figuur 2).

‘Feature engineering’ is misschien wel de belangrijkste stap bij het uitwerken van voorspellende modellen voor de prestaties van coatings. In de coatingwetenschap zijn ruwe analytische gegevens zelden de beste input voor machine learning. In plaats daarvan zetten we analytische meetresultaten om in indicatoren die de onderliggende fysische en chemische eigenschappen van de coating beschrijven. Dat proces wordt ‘feature engineering’ genoemd.

Bij epoxycoatings zijn de meest waardevolle meetgegevens vaak afkomstig van:

- FTIR (Fouriertransformatie-infraroodspectroscopie) voor chemische interacties
- DSC (differentiële scanningcalorimetrie) voor netwerkwijzigingen
- DMA (dynamisch-mechanische analyse) voor moleculaire mobiliteit en reologie
- Reologie voor microstructurele ontwikkeling
- SEM (scanning-elektronenmicroscopie) voor morfologie en breukgedrag
- Contacthoekanalyse ter beoordeling van de compatibiliteit

Door die metingen om te zetten in numerieke kenmerken kunnen coatingwetenschappers voorspellende modellen ontwikkelen om de hechting, barrière-eigenschappen, corrosiebestendigheid, robuustheid en duurzaamheid op lange termijn in te schatten. Dat resulteert in een verschuiving van empirische formulering naar datagestuurd coatingontwerp, waarbij inzicht in de interacties tussen additieven en de matrix de basis vormt voor de volgende generatie voorspellende coatingtechnologie. Tegelijkertijd kan het gebruik van analytische technieken bijdragen tot de analyse van breuken en defecten in coatingsystemen. Aangezien de meeste coatingdefecten voortkomen uit een beperkt aantal onderliggende materiaalparameters, is het belangrijk om meetbare analytische indicatoren te identificeren die bepalend zijn voor de prestaties.

Breng analytisch coatingontwerp in de praktijk

Wilt u gerichter formuleren en beter begrijpen hoe biogebaseerde additieven de prestaties van coatings beïnvloeden? Binnen het AddBIO-project onderzoekt Sirris samen met partners hoe biogebaseerde additieven kunnen worden geselecteerd, gekarakteriseerd en geïntegreerd in performante coatings. Met verschillende analytische technieken brengen we hun invloed op de eigenschappen en prestaties van coatings in kaart. In onze testlaboratoria vindt u bovendien diverse technieken om coatingformulering en faalanalyse te ondersteunen.

Download onze whitepaper over analytische coatings

Ontdek het AddBIO-project

Alleen beschikbaar in het Engels

Samengevat

Met een analytisch coatingdesign hoeft u niet langer met vallen en opstaan te werken. Door de additief-matrixinteracties te meten en verbanden te leggen tussen samenstelling, structuur en prestaties krijgt u meer inzicht in het gedrag van de coating. Die gegevens kunnen u helpen om formuleringsbeslissingen te nemen, voorspellende modellen uit te werken en de ontwikkeling van robuuste coatings te versnellen.

Conclusie: van metingen tot beter onderbouwde coatingbeslissingen

Analytische technieken doen meer dan alleen de coatingprestaties na tests verklaren. Ze kunnen van bij het begin richting geven aan beslissingen over de samenstelling. Door de interacties tussen additieven en matrix te meten en die om te zetten in bruikbare gegevens, kunt u het aantal pogingen en fouten beperken, voorspellende modellen verbeteren en robuustere coatingsystemen ontwikkelen.

Partners

Auteurs



Pieter Samyn