

白色紙上におけるインクの見栄えに対する凝集の影響

Influence of agglutination on appearance of ink on white paper

土屋幸治¹⁾, [○]ニコライ・キリロフ¹⁾, K. Bartkiewicz²⁾, S.V. Ershov³⁾, S. G. Pozdnyakov⁴⁾, A.G. Voloboy³⁾

Koji Tsuchiya¹⁾, [○]Nikolay Kirilov¹⁾

株式会社インテグラ¹⁾, Faculty of Physics, Adam Mickiewicz University²⁾, KIAM, Russian Academy of Sciences³⁾, Moscow Engineering Physics Institute⁴⁾
Integra Inc.¹⁾

E-mail: tsuchiya@integra.jp

We investigated the influence of agglutination of pigment particles on appearance of ink printed on a white paper. The agglutination patterns were generated by simulating thermal motion of pigment particles and inter-particle interaction. The appearance of the ink layer on a white paper was calculated in the framework of scalar diffraction theory using a computer program. The program provides integrated visual computing environment for analysis of light scattering in advanced coatings.

1. はじめに

インクの光学特性を物理的に正確にシミュレーションするという課題は簡単に片付けられるものではなく、ランベルト・ベールの法則といった単純な吸収則を適用するだけではこれを行っていくことができない。その理由として、インクが理想的に均質な物質ではなく、バインダー内に小さな顔料粒子が存在しているという懸濁液の様相を呈している点が挙げられる。これらの顔料は、塗料において用いられているそれと比較してより小さなものではあるが¹⁾²⁾、だからと言ってその大きさを無視し、インクの媒質を均質なものとして扱える程には小さくはない。したがって、インク層における光の反射や透過を計算するには、これらの粒子による回折問題を解かねばならない。

この時、凝集効果の存在は非常に重要な意味を有する。微少な粒子により生じる光の散乱は相当に弱いものである一方、これらの粒子がクラスター状に結合した場合、そのクラスターはより大きな有効粒子のように振る舞うため、結果的に光の散乱特性は異なるものとなる。

これらの事から、我々は本研究に必要な作業を大きく次の二つに分解した。(1)シミュレーション領域内における粒子の分布を、凝集が存在する場合と存在しない場合のそれぞれについて求める。(2)求められたそれぞれの粒子分布について、光回折の計算を行う。

凝集過程の物理的に正確なシミュレーションは、分子レベルの粘性流体力学に係る非常に複雑な問題であり、分子レベルでの化学親和力を考慮する必要がある事に加え、常に既知であるとは限らないハーマーカード一定数³⁾といった、物理的及び化学的な多くの係数が絡んでくる。このため、本研究においては、理想化されたブラウン運動と、インクの粘性や顔料材質の比重といった幾つかの一般的な物理係数のみを必要とする粒子間相互作用にのみ着目し、これらに基づき構築された凝集課程の単純なモデルを適用することによって凝集状態を再現した。このモデルは高度に理想化されたものではあるものの、文献³⁾において報告されているものと同様のインク層の幾何形状が得られた。

2. 原理

本研究においては、光学シミュレーションを目的としたインク層の幾何形状を、次の二つの段階により作成した。まず始めに、顔料粒子が統計的に一様に分布していると見なすことが可能な、粒子の三次元的な空間分布を作成する。次に、粒子が衝突した場合にのみ(ある確率を持って)結合し、一定の距離においては引き合わないという、凝着粒子の不規則な熱運動をシミュレーションする。これは高粘性物質内における(親水・疎水性のような)親和力の良い近似となる。

本研究で使用したモデルにおいては、粒子または(複数粒子の結合により構成された)クラスターの運動は、確率的デルタ関数力下におけるブラウン運動となっている。ただし、回転拡散については無視している。これらの運動方程式は、期待される凝集の度合いに達するまで数値積分される。これらの一連の処理を行った結果として得られる粒子群の幾何形状が、スカラー波動光学シミュレーションにおいて用いられる。

なお、印刷されたインクの光学シミュレーションを光の完全なベクトル記述に基づいて行うことも可能ではあるが、その場合に要する計算時間は膨大なものとなる一方、印刷されたインクのような確率的構造

については、そのスカラー回折理論に対する優位性は殆ど無い²⁾。

本研究においては、(株)インテグラが開発した、スカラー回折理論に基づき処理を行うコンピューター・プログラムである「Ink Simulator」を用いた。この Ink Simulator は、任意のインク層について周波数領域においてスカラー回折問題を解くものである²⁾。また、インクが印刷される紙材質を任意のものとして行うことができるよう、インク層について得られた計算結果を後処理する機能も備えている。このプログラムの出力は、任意の紙の上に印刷された状態でのインク層の双方向反射分布関数 (BRDF: Bidirectional Reflectance Distribution Function) が記録されたファイルと、その BRDF を視覚化したものから成る。

インクの見栄えのシミュレーションの対象として青色の顔料を選択し、その屈折率は実数部を 1.4、虚数部については Fig.1 に示す通りとした。

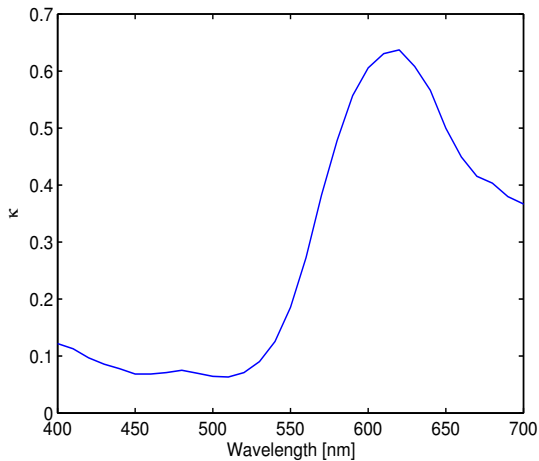


Fig.1 Imaginary part of refractive index for blue pigment.

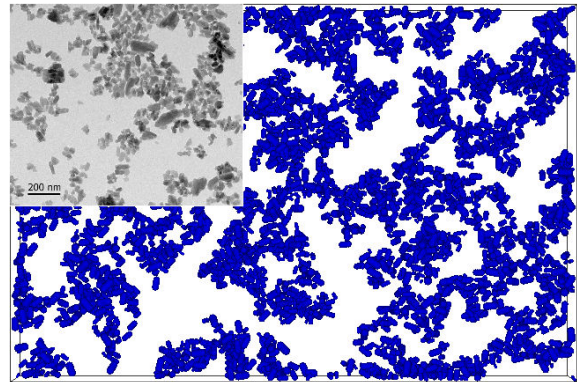


Fig.2 Superimposed TEM image of CuPc pigment particles over corresponding computer generated geometry (TEM image reprinted with permission from Ref.3. Copyright (C) American Chemical Society).

3. 実験

本研究において採用した凝集のモデルは、高度に理想化されているものではあるものの、様々なコロイドにおいて同様の凝集メカニズムが普遍的に見受けられる⁴⁾。本研究において人工的に再現した凝集状態と、現実に存在する凝集状態とを視覚的に比較することにより、これを確認することができよう (Fig.2 参照)。

我々は青色の顔料について三つの異なる度合いの凝集状態を生成し、Ink Simulator を用いて各々の組成に対する見栄えのシミュレーションを行った。シミュレーションにおいては、粒子の体積密度 (PVC) を 15%、シミュレーション領域の大きさを $5.12 \times 5.12 \times 0.5 \mu\text{m}$ とし、白色の平行照明を用いた。シミュレーション結果として、白色紙上における印刷されたインクの見栄えを得た (Fig.3 及び Fig.4 参照)。

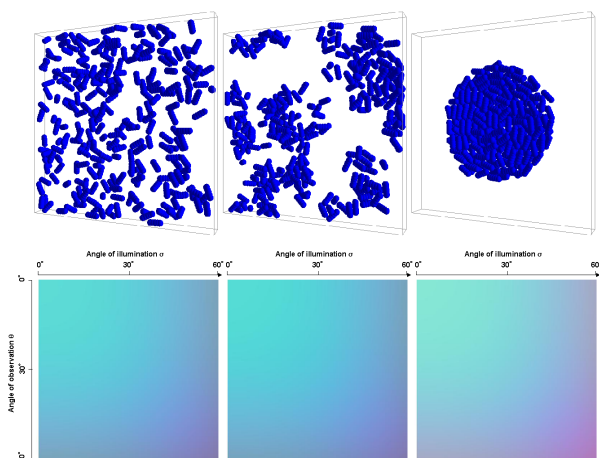


Fig.3 Influence of agglutination of blue pigment on appearance of ink. From left: (a) no agglutination, (b) agglutination (mean cluster size 10% of total particles), (c) An extreme case - single cluster.

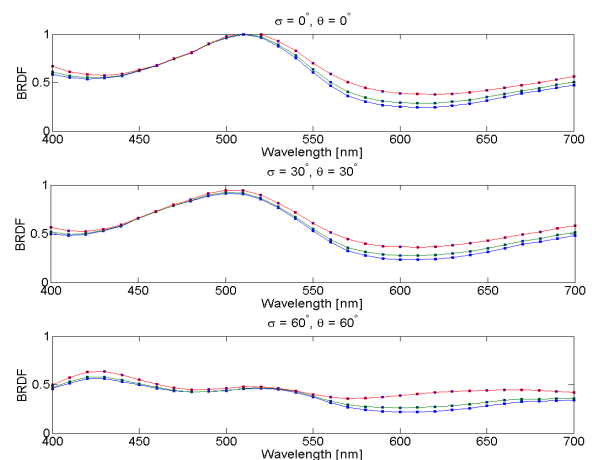


Fig.4 BRDF: blue, green, and red curves correspond to cases (a), (b), and (c) from Fig. 3, respectively.

観察方向や照明方向によって色味が変わる現象はイリディッセンス (iridescence、構造色) もしくはフリップフロップ効果として知られているが、これらのシミュレーション結果は凝集状態によりイリディッセンスが変化することを示している。

4. おわりに

本研究は、凝集状態を有するインク層と、そのインク層が白色紙上に印刷された場合における見栄えの双方を、コンピューター・シミュレーションにより再現が可能なことを示すものである。再現されたインクの見栄えは、実在する対象の観察結果に合致した。凝集状態の再現についても、現実のものと十分に対応した結果を得ることができた。

本研究において用いたソフトウェアは統合化された視覚的なシミュレーション環境を提供しており、確率的な幾何形状として表現し得るインクや塗料、光学フィルター、化粧品等の高度なコーティング類における光の散乱が扱えるため、光学的に複雑な部材における光伝播の解析が可能である。

本研究のシミュレーション結果は、凝集効果が印刷されたインクの最終的な見栄えに影響することを示している。また、薄いコーティング層において発生するフリップフロップ効果 (イリディッセンス) に凝集が影響することも確認された。凝集が強くなるにつれ、最終的な色におけるフリップフロップ効果は強くなっている (Fig.3 及び Fig.4 参照)。

文献

- 1) A.G. Voloboy, S.V. Ershov, S.G. Pozdnyakov, KIAM Preprint № 75, (Moscow, 2009).
- 2) A.G. Voloboy, S.V. Ershov, E.S. Klyshinsky, S.G. Pozdnyakov, KIAM Preprint № 92, (Moscow, 2008).
- 3) Y. Zhao, H.T. Ng, and E. Hanson, J. Chem. Theory Comput., 6, 491 (2010).
- 4) M. Y. Lin, H. M. Lindsay, D. A. Weitz, R. C. Ball, R. Klein, P. Meakin, Nature (London) 339, 360, (1989).