



**Titandioxid (Anatas, Rutil)...**

**Zum Sortiment...**

**ANATAS** CAS-Reg.-Nr. 1317-70-0

**RUTIL** CAS-Reg.-Nr. 13463-67-7

### Charakteristik:

Mit einem **Marktanteil von mehr als 85% an den Weißpigmenten** haben die  $\text{TiO}_2$ -Pigmente aufgrund ihrer Eigenschaften alle anderen Pigmente weit übertroffen. **Handelsübliche  $\text{TiO}_2$ -Pigmente sind chemisch inert und physiologisch unbedenklich.**

Es gibt zwei Herstellungsverfahren - das **Sulfatverfahren** und das **Chloridverfahren**. Der größte Teil der Titandioxidpigmente wird auch heute noch nach ersterem hergestellt, wobei dem **Chloridverfahren jedoch steigende Bedeutung** zukommt.

Die von **Scheruhn** vertriebenen Produkte werden nach dem **Sulfatverfahren** erzeugt.

Nach ihrer Kristallmodifikation erfolgt eine **Einteilung der Titandioxidpigmente in Anatas und Rutil**.

Es gibt dabei sowohl **unbehandelte** als auch zur Verbesserung der Eigenschaften **chemisch behandelte** Titandioxidpigmente.

Der weitaus größte Teil wird **chemisch nachbehandelt**. Um die **Dispergierbarkeit** und vor allem die **fotochemische Stabilität** des Pigmentes zu erhöhen, werden **fotochemisch inaktive Substanzen**, wie **Hydroxide** und **Oxide**, von z.B. **Silizium** und/oder **Aluminium** auf das Titandioxid gefällt.

In den letzten Jahren haben sich Titandioxidpigmenthersteller bemüht, für bestimmte Anwendungsgebiete speziell entwickelte Titandioxidpigmente mit **organischer Nachbehandlung** herzustellen. Dadurch werden bestimmte anwendungstechnische Eigenschaften, wie **Dispergierbarkeit und Glanzgebung** wesentlich verbessert.

### Chemische Eigenschaften:

Titandioxid ist **chemisch resistent** gegen atmosphärische Einflüsse sowie Sauerstoff, Schwefelwasserstoff, Schwefeldioxid, Kohlendioxid, Ammoniak usw. Es wird **weder oxidiert noch reduziert**. Außer gegen **Fluss-Säure und heiße konzentrierte Schwefelsäure** ist Titandioxid beständig und reagiert weder mit organischen, noch mit anorganischen Säuren oder Basen, noch mit Lösungsmitteln oder Salzlösungen. Titandioxid ist **neutral, extrem temperaturbeständig und zeigt keinerlei toxische Wirkung**.

Eine Besonderheit des Titandioxid, die diesem Befund zu widersprechen scheint, liegt darin begründet, dass Titandioxid ein Sauerstoffdefizit im Gitter aufweist. Man muss dieser Eigentümlichkeit besondere Aufmerksamkeit schenken, weil dieses Sauerstoffdefizit Änderungen im optischen und elektrischen Verhalten des Titandioxids bewirkt. Diese Besonderheit ist teilweise die Ursache für das **auffallende fotochemische Verhalten** des Titandioxids.

### Physikalische Eigenschaften:

Titandioxid ist **polymorph**. Es tritt in drei Kristallmodifikationen auf:

- Anatas (tetragonal)
- Brookit (orthorombisch)
- Rutil (tetragonal)

Alle drei Modifikationen werden in der Natur gefunden. Aber nur Rutil- und die Anatasmodifikationen haben für die Pigmentherstellung Bedeutung.

**Rutil ist die stabilste Modifikation** des Titandioxids. Im Gegensatz dazu sind Anatas und Brookit metastabile Formen. Ihre Umwandlung in Rutil erfolgt schon bei Zimmertemperatur, je doch unmerklich langsam. Anders ist es bei wesentlich erhöhten Temperaturen. Hier ist die Umwandlungsgeschwindigkeit merklich, so dass letzten Endes quantitativ Rutil entsteht.

Zwischen Rutil, Anatas und Brookit bestehen **im Kristallgitter charakteristische Unterschiede**. Gemeinsam ist allen drei Modifikationen, dass jedes Titanion von 6 Sauerstoffionen oktaedrisch umgeben ist. Es hat die Koordinatenzahl 6. Damit das stöchiometrische Verhältnis 1 : 2 zwischen den Titan- und den Sauerstoffionen eingehalten wird, müssen im Kristallgitter Oktaeder so angeordnet sein, dass jedes Sauerstoffion zu 3 Oktaedern gehört. Der Unterschied zwischen den drei Kristallmodifikationen liegt in der räumlichen Anordnung der Oktaeder.

Im Rutil hat jedes Oktaeder von seinen 12 Kanten 2 mit Nachbaroktaedern gemeinsam, im Brookit 3 und im Anatas 4. Haben zwei reguläre Oktaeder eine gemeinsame Kante, so verringert sich der Abstand auf 71 % gegenüber dem bei Eckverknüpfungen. Da die Kationen einander abstoßen, und diese Abstoßung sich auf die Gitterenergie auswirkt, verringern gemeinsame Kanten die Stabilität des Kristalls.

**$\text{TiO}_2$ -Rutil besteht aus langen Ketten von Oktaedern**, die über eine Kante miteinander verbunden sind. In einer Kette gehören somit vier Sauerstoffionen eines jeden Oktaeders zwei benachbarten Oktaedern gemeinsam an. Die Ketten sind so aneinandergelagert, dass entsprechende Oktaederecken benachbarter Ketten senkrecht zueinander stehen und die innerhalb einer Kette nur einfach zugeordneten Sauerstoffionen mit den bereits doppelt zugeordneten Oktaederplätzen der benachbarten Ketten zusammenfallen. Da mit ist die Forderung, dass im Kristall jedes Sauerstoffion zu drei Oktaedern gehören muss, entsprochen und

das stöchiometrische Verhältnis gewahrt.

Beim Anatas liegen ebene Oktaeder schichten vor, wobei die Oktaeder innerhalb einer Schicht über ihre Ecken miteinander verbunden sind.

Je Oktaeder sind also vier Sauerstoffionen doppelt zugeordnet. Die einzelnen Schichten bauen sich dann jeweils so aufeinander auf, dass die doppelt zugeordneten Plätze der einen Schicht mit nur einfach zugeordneten der nächsten Schicht zusammenfallen. Damit ist auch hier das stöchiometrische Verhältnis eingehalten.

#### Dichte:

Unter den von der Kristallmodifikation beeinflussten Eigenschaften ist zunächst die **Dichte** zu nennen. Entsprechend der **dichteren Packung der Gitterbausteine** im Rutilgitter hat diese Modifikation auch eine höhere Dichte.

- Rutil: 4,2 g/cm<sup>3</sup>
- Anatas: 3,9 g/cm<sup>3</sup>

#### Härte:

Ebenfalls aus der unterschiedlichen Packung der Gitterbausteine und den Bindungskräften in beiden Modifikationen der Härteunterschied zu erklären ist.

#### Mohs'sche Härte:

- Rutil: 6,0 - 7
- Anatas: 5,5 - 6

Für den **Abrieb**, der durch die **Eigenhärte** eines Pigmentes erzeugt werden kann, spielen auch **Teilchengröße und -form** eine wichtige Rolle.

#### Brechungsindex:

Die TiO<sub>2</sub>-Modifikationen sind **optisch anisotrop**, d.h. das optische Verhalten wird durch **zwei Brechungsindices** charakterisiert (**ordentlicher und außerordentlicher Strahl**). Mit **zunehmender Wellenlänge** nehmen dies Brechungsindices ab. Für Anatas und Rutil ergeben sich als gemittelte Brechungsindices (für  $\lambda = 589 \text{ Nm}$ ) bezogen auf Vakuum folgende Werte.

- Rutil: 2,80
- Anatas: 2,55

#### Optische Eigenschaften:

##### Lichtstreuvermögen und Brechungsindex:

Titandioxidpigmente haben ein **hohes Lichtstreuvermögen**, das sowohl für das **gute Deckvermögen von Beschichtungen**, für die **Opazität von Kunststoffen** und anderer pigmentierter Materialien als auch für das Aufhellvermögen gegenüber farbigen Medien verantwortlich ist. Dieses **hohe Lichtstreuvermögen ist einmal durch den hohen Brechungsindex bedingt**, aber damit allein ist das Lichtstreuvermögen eines Pigmentes nicht zu erklären. So erscheint uns z.B. ein Titandioxidkristall durchsichtig, ganz im Gegensatz zu dem Titandioxidpigment. In beiden Fällen handelt es sich um chemisch identisches und in seiner Gitterstruktur vollkommen übereinstimmendes Material. Unterschiedlich sind lediglich die geometrischen Verhältnisse. Einerseits ein relativ großer Kristall, andererseits zahlreiche Teilchen von außerordentlicher Feinheit. Man erkennt, dass das Streuvermögen neben dem Brechungsindex auch von der **Teilchenfeinheit** ab hängt.

##### Lichtstreuvermögen und Teilchengröße:

Rutileinkristalle sind **durchsichtig**. Werden sie zu einem **Pulver** zerkleinert, so erscheint dieses **weiß**. Die Ursache dieser Erscheinung ist die mit der **Verringerung der Teilchengröße** rasch ansteigende Zahl der reflektierenden Flächen. Die regellose statistische Verteilung dieser Flächen führt nach den Gesetzen der **regulären Reflexion zu einer diffusen Streuung**. Diese streuende Reflexion setzt allerdings voraus, dass die Größe der Teilchen und damit die reflektierende Oberfläche nicht unter das Mindestmaß abfällt, das zur Ausbildung einer **einheitlichen, ebenen Wellenfront** erforderlich ist. Schließlich durch läuft sie bei einem Teilchendurchmesser im Bereich der **halben Lichtwellenlänge ein Maximum**. Dieser Befund und die Forderung an ein Weißpigment, das eingestrahlt Licht maximal zu streuen, führen zu einer **optimalen Teilchengröße**. Darunter wird die Teilchengröße verstanden, die diesem **Streumaximum** zugeordnet ist. Diese Betrachtung gilt nur für ungestörte Streuung (also niedrige Pigmentvolumenkonzentration) und festgelegten Brechungsindexunterschied. In der Praxis kann für jede PVK und jeden Brechungsindexunterschied eine optimale Teilchengröße ermittelt werden. Die mathematische Behandlung dieser Zusammenhänge zwischen Intensität der Streustrahlung, dem Brechungsindex und dem Teilchendurchmesser ist Bestandteil der Mie'schen Theorie.

#### Farbstich und Helligkeit:

Nach **DIN 55 980** ist der **Farbstich** einer nahezu weißen oder nahezu unbunten Probe der **geringe Anteil an Bunt**, durch den die Farbe einer Probe von Idealweiß oder (Ideal-)Unbunt abweicht. Er wird gekennzeichnet durch Buntton und Abbuntheit. Als farbstichfreier Bezugspunkt (Unbunt) gilt der Farbort der beleuchtenden Lichtart.

Werden **alle Wellenlängen des sichtbaren Lichtes** von einem Körper vollständig reflektiert, so spricht man vom **Idealweiß**. Die Reflexionsspektren von **Anatas- und Rutilpigmenten** zeigen jedoch, dass bei Beleuchtung mit weißem Licht im blauen Teil des sichtbaren Spektrums geringere Reflexionswerte gemessen werden als im übrigen Bereich. Beim **Rutilpigment** ist dieser Abfall etwas **stärker als beim Anaspigment**. Daher hat das Anaspigment einen etwas geringeren Gelbstich als das Rutilpigment. Bei allen anderen Wellenlängen liegt das Reflexionsspektrum des Rutilpigmentes etwas höher als das des Anaspigmentes. Das bedeutet, dass **Rutil- gegenüber Anaspigmenten eine höhere Helligkeit aufweisen**.

Der **Gelbstich** ist bei Titandioxidpigmenten aber auch von der **Teilchengrößenverteilung abhängig**. Der Gelbstich nimmt zu,

wenn der **häufigste** Durchmesser der Volumenverteilung **größer** ist als der optimale und **nimmt ab**, wenn der häufigste Durchmesser der Volumenverteilung **kleiner ist als der optimale Teilchendurchmesser**.

Wie bereits erwähnt, versteht man unter dem Farbstich die Art des geringen Anteils an Bunt, durch die Farbpigmentierter Medien von Idealweiß bzw. bei Ausmischungen mit Schwarz von Idealbunt abweicht. Zur Charakterisierung können daher bei Weißlackierungen Gelbstich und Helligkeit und bei Grauausfärbungen Blaustich und Helligkeit dienen. Der Farbstich ist durch die **Differenz der Reflexionswerte der Farbmessfilter Rx und Rz** gekennzeichnet. Der Gelbstich ist durch die Differenz (Rx - Rz) definiert. **Je höher der (Rx - Rz)-Wert**, um so höher der Gelbstich und **um so größer die Abweichung vom idealen Weiß**. Je höher der (Rz - Rx)-Wert bei Grauausmischungen, desto blaustichiger und reiner erscheint der Farbton.

#### **Glanz:**

Für die **Glanzgebung eines Lacksystems** sind eine Reihe von Faktoren verantwortlich. Soweit sie das Titandioxidpigment betreffen, sind es **Pigmentkonzentrationen, Teilchengröße und Teilchengrößenverteilung und Dispersionsgrad im Bindemittelsystem**. Lacke, die sehr **niedrig pigmentiert** sind, ergeben im allgemeinen **hohen Glanz**. Mit **zunehmender Pigmentierungshöhe wird der Glanz geringer**. Diese Glanzabnahme entsteht durch die **endliche Größe der Pigmentteilchen**. Liegen diese Teilchen unmittelbar unter der Lackoberfläche, bilden sie kleine **Erhebungen** in der ebenen Filmoberfläche und **reflektieren** das ein fallende Licht an diesen Punkten nicht mehr gerichtet, sondern diffus. **Je höher die Pigmentkonzentration, desto größer ist auch die Zahl dieser den Glanz vermindernenden Teilchen**.

Weiterhin wird der Glanz durch die im Film vorliegenden **Pigmentteilchengröße** bestimmt. Die Teilchengrößenverteilung des eingesetzten Pigmentes hat also Einfluss auf diese Eigenschaften. Generell kann für TiO<sub>2</sub>-Pigmente für Lackfarben gesagt werden dass die **Glanzgebung um so günstiger ist je feinteiliger d.h. je kleiner der Pigmentteilchendurchmesser** und um so **enger** die Verteilung ist. In einem Lack liegen aber noch häufig Agglomerate und/oder Flockulate vor die um ein Vielfaches größer sein können als die Primärteilchen. Das führt natürlich zwangsläufig zu Glanzeinbußen. Es ist daher von besonderer Bedeutung, dass das Pigment **vollständig dispergiert** und dieser Dispersionszustand auch **erhalten** bleibt Entscheidend für die Glanzgebung eines Titandioxidpigmentes ist schließlich der Verteilungszustand des Pigmentes in den oberflächennahen Schichten.

#### **Wetterbeständigkeit:**

Die Phänomene bei der **Bewitterung** von Lack- und Kunststoffschichten sind vielfältig. Die dabei ablaufenden Vorgänge sind sehr verschieden, je nach den chemischen Eigenschaften des Pigmentes und Bindemittels und den physikalischen Eigenschaften des Gesamtsystems. Im weiteren Sinne versteht man unter Wetterbeständigkeit die **Resistenz gegen alle ursächlich auf meteorologische Einwirkung zu rückführbaren Schäden**. Hierzu gehören z.B. **Glanzabfall, Versprödung, Ausbleichen und Kreidung**. Anatas eignet sich **nicht** zum Einsatz im Aussenbereich.

#### **Einfluß der Kristallmodifikation, Gitterstabilisierung und Nachbehandlung:**

Die **Fotoaktivität** verschiedener TiO<sub>2</sub>-Pigmente ist unterschiedlich Sie ist bei der Modifikation. Anatasmodifikation **bedeutend höher** als bei der Rutilmodifikation Durch Einbau von Substanzen in das Kristallgitter des Titandioxids oder durch Umhüllung der TiO<sub>2</sub>-Teilchen die sog. **Nachbehandlung** kann die Fotoaktivität der TiO<sub>2</sub>-Pigmente **beträchtlich verringert** werden.

#### **Verwendungsmöglichkeiten:**

Titandioxid ist heute mit Abstand das **wichtigste weiße Pigment** und findet eine vielfältige Anwendung.

Titanweiß hat die **höchste Deckkraft** aller Weißpigmente und ein hervorragendes Aufhellungsvermögen.

Es ist chemisch stabil, ungiftig und unter der Kennzeichnung **E 171 als Lebensmittelzusatzstoff**, beispielsweise in Zahnpasta und Hustenbonbons, anzutreffen. Auch in der Ölmalerei findet es teilweise Verwendung.

Im technischen Bereich findet es Verwendung in **Farben und Lacken** (z.B. für Wandfarbe und Textilien). Hervorzuheben ist der mögliche Einsatz von Titandioxid in der Papierindustrie, speziell im Dekorpapierbereich. Ebenfalls findet Titandioxid auch als **UV-Blocker in Sonnencremes und Aufheller in Arzneimitteln** (Tabletten) seine Anwendung.

#### **Quellenangabe:**

- o Römpps Chemie-Lexikon
- o H. Kittel: Lehrbuch der Lacke und Beschichtungen
- o Gächter/Müller: Kunststoffadditive/3. Ausgabe

#### **Unser Liefersortiment:**



Bitte kontaktieren Sie uns für weitere Informationen (Link: [Kontakt und Anfrage](#)). Wir senden Ihnen gerne ein unverbindliches Angebot zu.

Selbstverständlich bieten wir auch eine fachgerechte Beratung, detaillierte produktspezifische Datenblätter und technische Dokumentationen.