

УДК 663.28:667.662:32

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ ПРОЕКТИРОВАНИЯ СИНТЕЗА  
АЗОКРАСИТЕЛЕЙ С ЗАДАНЫМИ СВОЙСТВАМИ  
НА ОСНОВЕ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ  
ИХ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ**

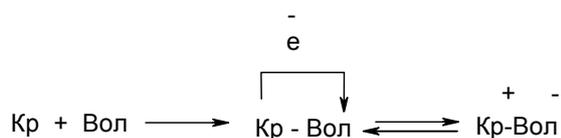
*К.И. КОБРАКОВ, К.Г. АЛЕКСАНИЯ, Г.С. СТАНКЕВИЧ, В.Ю. ОРЛОВ, Р.С. БЕГУНОВ, И.И. БРОДСКИЙ*

**(Московский государственный текстильный университет им. А.Н.Косыгина,  
Ярославский государственный университет им. П.Г.Демидова)**

Ранее нами было показано, что в ряду структуроподобных азокрасителей существует корреляционная зависимость между потенциалом ионизации (ПИ) молекулы

азокрасителя и прочностными характеристиками окраски образцов, полученных с его помощью [1].

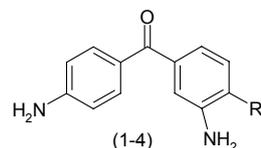
Обнаруженная зависимость, на наш взгляд, объясняется тем, что существует взаимосвязь между уровнем подвижности (возбудимости) электронной системы молекулы азокрасителя (хромофорной системы) и энергией донорно-акцепторного взаимодействия красителя с активными центрами (функциональными группами) макромолекул волокна. Хемосорбционная стадия процесса крашения, на которой и реализуется донорно-акцепторный механизм взаимодействия красителя с волокном, сопровождающаяся образованием комплекса с переносом заряда (КПЗ) [2], возможно является определяющей для последующего закрепления красителя на окрашиваемом объекте.



Чем более подвижна, более возбудима электронная система молекулы красителя, тем легче происходит взаимодействие молекулы красителя с функциональными группами волокна, облегчается его адсорбция и поэтому краситель лучше выбирается из раствора и прочнее фиксируется на волокне. За критерий «подвижности» электронной системы азокрасителя нами выбран потенциал ионизации (ПИ), который рассчитывается по методу РМ-3 с полной оптимизацией геометрии молекулы красителя.

Настоящая работа выполнена в продолжение указанных выше исследований [1] и целью ее является оценка прогностических возможностей обнаруженной зависимости.

В качестве объектов исследования были выбраны азокрасители на основе диаминов (1...4), полученные восстановлением соответствующих динитропроизводных, и до наших исследований в реакцию азосочетания не вовлекались:



1) R= OMe, 2) R=OC<sub>6</sub>H<sub>6</sub>, 3) R=Cl, 4) R= —N<sub>2</sub>C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>

Следует отметить, что полиядерные диамины ароматического ряда, содержащие первичные аминогруппы в различных бензольных кольцах, продолжают оставаться объектами пристального внимания химиков, занимающихся поиском новых красителей для текстильных материалов.

Это связано с возможностью получения бисдiazосоединений, которые можно использовать в реакции азосочетания с различными азокомпонентами, обеспечивая широкую цветовую гамму синтезируемых красителей.

Рассматривая диамины (1...4) в качестве потенциальных diaзосоставляющих, мы предположили возможность синтеза бисазокрасителей (5...12), для которых провели расчет ПИ (табл. 1 – потенциалы ионизации красителей (5...12) и значения цветовых различий (ΔE) образцов до и после испытаний). Проанализировав полученные данные, мы осуществили синтез красителей (5,6), имеющих наибольшее (8.72) и наименьшее (8.27) значения ПИ соответственно.

По стандартной методике [3] выделенными красителями (5,6) окрасили образцы шерстяной ткани, для которых исследовали устойчивость к мокрой обработке и сухому трению с использованием спектрофотометра data-color, (модель 3880), с пакетом программ "Павлин", позволяющего определять общее цветовое различие (ΔE) до и после испытаний. Результаты приведены в табл. 1.

Далее нами построены графики зависимости устойчивости окрасок, полученных с использованием красителей (5,6) к вышеуказанным физико-химическим воздействиям от ПИ (рис. 1 – зависимость устойчивости окрасок к сухому трению (1) и мокрой обработке (2) ΔE от ПИ.).

Таблица 1

№ п/п	Формула красителя	ПИ, эВ по методу РМ-3	ΔЕ, определенный экспериментально			ΔЕ, определенный по графической зависимости		
			мокрая обработка	сухое трение	различие м/ж ΔЕ граф и эксп., %	мокрая обработка	сухое трение	различие м/ж ΔЕ граф и эксп., %
5		8,72	3,2	2,47	-	-	-	
6		8,27	1,4	0,75	-	-	-	
7		8,5	2,5	1,72	8	2,3	1,6	
8		8,6	2,61	1,89	13	2,3	1,7	
9		8,74	3,45	2,76	1	3,4	2,6	
10		8,68	3,25	2,5	4	3,1	2,3	
11		8,3	1,5	0,95	0	1,5	0,9	
12		8,53	2,45	1,9	2	2,4	1,6	

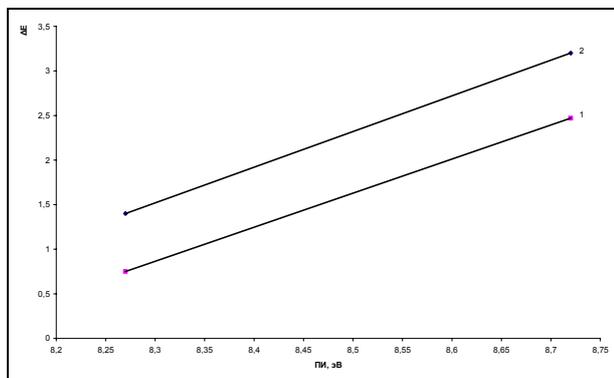


Рис. 1

Затем, используя эти графики и расчетные значения ПИ, были получены теоретические значения  $\Delta E$  испытаний устойчивости окрасок к мокрой обработке и сухому трению для каждого из красителей (7...12) (табл. 1). Для подтверждения теоретических выводов были синтезированы красители (7...12), строение которых подтверждено ИК-спектроскопией, электронными спектрами поглощения (ЭСП) и элементным анализом. Полученными красителями окрашены образцы шерстяной ткани, и для окрашенных образцов, так же как для красителей (5,6), проведены испытания на устойчивость окрасок к действию мокрой обработки и сухого трения. Полученные в результате испытаний значения  $\Delta E$  приведены в табл. 1. Сравнение полученных теоретических и экспериментальных значений  $\Delta E$  показывает, что различие между ними составляет 0...18%.

Таким образом, полученные результаты позволяют сделать вывод, что найденная корреляционная зависимость между прочностными характеристиками окрашенного образца и ПИ красителя дает возможность, не приступая к синтезу красителя по данным квантово-химических расчетов, оценить возможную устойчивость полученных с его помощью окрасок к действию физико-химических факторов.

Очевидно, что такой прогноз позволяет с практической точки зрения повысить эффективность процессов разработки новых материалов, сократить материальные и временные затраты на проведение эксперимента.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Егорова Л.Р. Взаимосвязь электронного строения органических красителей и свойств окрашенных текстильных материалов: Дис...канд. хим. наук. – М., 2004.
2. Сафонов В.В., Лаврова Н.К. Электронная теория адсорбции красителей на текстильных волокнах // Химическая промышленность. – 1991, №7. С. 67.
3. Кричевский Г.Е. Химическая технология текстильных материалов. – М.: Легпромбытиздат, 2001. С.269...323.

Рекомендована кафедрой органической химии красителей МГТУ им. А.Н. Косыгина. Поступила 25.12.06.