

순수 폴리프로필렌 섬유에 대한 소수성 염료의 흡착성과 염료의 molecular descriptor와의 상관성 분석

Relationship Between the Affinity of Hydrophobic Dyes onto Pure Polypropylene and Molecular Descriptors of the Dyes

정종석, 장경진, 손송이, 김태경, 윤석한¹, 김미경¹, 홍진표¹

경북대학교 섬유시스템공학과, ¹한국염색기술연구소

Abstract

Relationship between hydrophobicity of dyes and affinity onto pure polypropylene fibers has been analyzed by using the molecular descriptor as a method to predict chemical and physical characteristics of compounds. Hydrophobicity of newly synthesized red dyes calculated by LogP which is one of molecular descriptors was increased continuously as the length of alkyl substituents increased. The dyeability onto polypropylene fibers was increased as LogP of the dyes increased and was very high when the hydrophobicity is over 6.

1. 서 론

최근 개발되고 있는 computational chemistry 기법과 관련하여 화합물의 물리적 화학적 특성을 수치적으로 예측하기 위한 도구인 molecular descriptor는 신약 개발과 같은 분야에서 시행착오를 줄이고 많은 경제적 시간적 노력을 절약하기 위한 수단으로 사용되고 있다.

이러한 molecular descriptor를 염료의 섬유에 대한 흡착성 분석에 활용하고자 하는 일련의 연구를 진행 중에 있다. 이의 일환으로 순수한 폴리프로필렌 섬유용 초소수성 염료를 새로이 개발하는데 있어서 염료의 소수성과 폴리프로필렌 섬유에 대한 염착성에 직접적인 관련이 있다는 사실에 근거하여 본 연구에서 새롭게 합성한 적색염료의 소수성을 molecular descriptor의 하나인 LogP(화합물의 소수성 척도)로 계산하고 이들 염료의 소수성값 즉, LogP와 이들 염료들의 폴리프로필렌 섬유에 대한 염착성의 상관관계를 조사하였다.

2. 실험

2.1 합성 및 염색

초소수성 염료의 합성은 2-Chloro-4-nitroaniline과 N,N-dialkylaniline의 디아조화-커플링 반응에 의해 Fig. 1과 같은 구조의 염료를 합성하였으며, 이렇게 합성한 염료에 의한 염색은 카티온계 계면활성제로 염료를 분산시킨 후 130°C에서 1시간 동안 실시하였다.

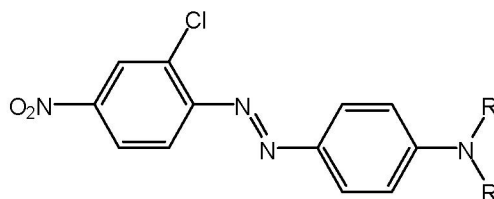


Fig. 1. The chemical structure of red dyes synthesized (R : methyl ~ hexyl group).

2.2 염료의 소수성(LogP) 계산

초소수성 염료의 LogP를 구하기 위해서는 Chemoffice 2005의 Chem3D ultra 소프트웨어를 사용하여 염료 구조를 최적화한 후 계산을 수행하였다.

3. 결론

본 연구에서 합성된 염료는 R 위치에 길이가 다른 알킬기를 치환기로 가지는 염료로서 탄소수가 1개인 methyl기에서 6개인 hexyl기까지를 대상으로 하였으며 이들 염료들의 알킬기의 길이에 따른 순수폴리프로필렌 섬유에 대한 염착성을 Fig. 2에 나타내었다. Fig. 2에서도 알 수 있는 바와 같이 알킬기의 길이가 길어짐에 따라 염료의 소수성이 지속적으로 증가함으로써 순수폴리프로필렌 섬유에 대한 염착성이 크게 증가하는 것을 알 수 있다.

Table 1은 합성된 염료의 소수성값(LogP)과 폴리프로필렌 섬유에 대한 염착성과의 관계를 나타낸 것이다. 그림에서 알 수 있는 바와 같이 염료의 소수성값이 약 6 이상일 때 폴리프로필렌 섬유에 대한 염착성이 증가하는 것을 알 수 있으며, 이러한 염료의 소수성값 예측은 다른 폴리프로필렌 섬유용 염료의 개발에 있어서도 아주 유용하게 활용될 수 있을 것으로 생각된다.

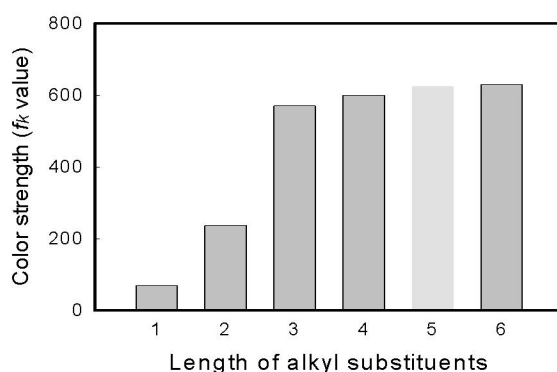


Fig. 2. The color strength of polypropylene fibers according to the length of alkyl substituents.

Table 1. Relationship between the affinity and LogP of the dyes

Length of alkyl substituents	Hydrophobicity (LogP)	Fk value	K/S at λ_{max}
1	4.855	69.6837	3.7372
2	5.037	236.453	14.641
3	5.949	570.1296	26.8254
4	6.861	599.2272	27.2176
6	8.685	629.1676	28.2911