

폴리프로필렌 섬유용 알킬치환 초소수성 염료의 친화력 분석과 예측을 위한 Molecular Descriptor의 활용

Application of Molecular Descriptor for Prediction and Analysis of the Affinity between Alkyl Substituted Super Hydrophobic Dyes and Polypropylene Fibers

장경진, 정종석¹, 김태경

경북대학교 공과대학 섬유시스템공학과, ¹경북대학교 기능물질공학과

Abstract

Affinity between alkyl substituted super hydrophobic dyes and polypropylene fiber has been analyzed by using the molecular descriptor as a method to predict chemical and physical characteristics of compounds. Hydrophobicity of synthesized dyes calculated by LogP which is one of molecular descriptors was increased continuously as the length of alkyl substituents increased.

1. 서 론

최근 개발되고 있는 computational chemistry 기법과 관련하여 화합물의 물리적 화학적 특성을 수치적으로 예측하기 위한 도구로 molecular descriptor가 있다. 이러한 molecular descriptor를 염료의 섬유에 대한 친화력 분석에 활용하고자 하는 일련의 연구를 진행 중에 있다. 이의 일환으로 폴리프로필렌 섬유용 초소수성 염료를 개발하는데 있어서 염료의 소수성과 폴리프로필렌 섬유에 대한 염착성에 직접적인 관련이 있다는 사실에 근거하여 본 연구에서 초소수성 염료의 소수성을 molecular descriptor의 하나인 LogP(화합물의 소수성 척도)로 계산하고 LogP를 활용하여 초소수성염료의 친화력 분석과 예측을 조사하였다.

2. 실 험

2.1 염료 합성

청색계열 초소수성 염료는 동일한 안트라퀴논 색소모체를 가지며 서로 다른 길이의 직쇄상 알킬치환기를 가지는 염료를 선정하였고, (a)와 같은 구조를 가진다. 그리고 황색계열 염료의 합성은 aniline과 N,N-dialkylamine의 디아조화-커플링 반응에 의해 (b)와 같은 구조의 염료를 합성하였고, 적색계열 염료는 2-Chloro-4-nitroaniline과 N,N-dialkylaniline의 디아조화-커플링 반응을 이용해 (c)와 같은 구조로 합성하였다.

이렇게 합성한 염료에 의한 염색은 카티온계 계면활성제로 염료를 분산시킨 후 130°C에서 1시간 동안 실시하였다.

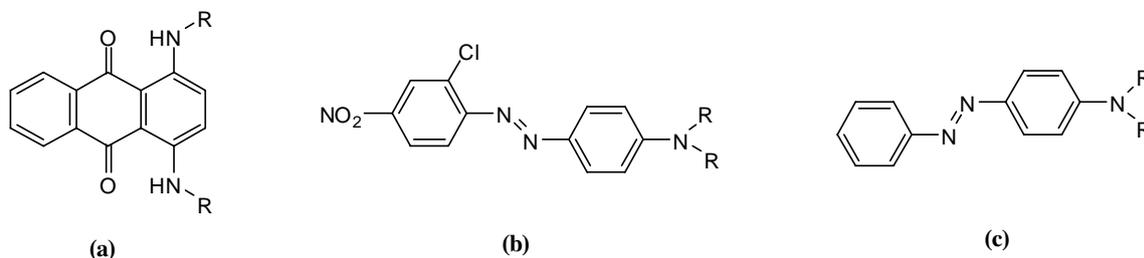


Fig. 1. The chemical structure of dyes synthesized : (a) Blue, (b) Red, (c) Yellow.

2.2 염료의 소수성(LogP) 계산

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

3. 결 론

본 연구에서 합성된 염료들은 R 위치에 길이가 다른 알킬기를 치환기로 가지는 염료로서 탄소가 없는 것에서부터 8개인 octyl기까지를 대상으로 하였다. 이들 염료들의 알킬기의 길이에 따른 순수 폴리프로필렌 섬유에 대한 염착성을 조사한 결과 알킬기의 길이가 길어짐에 따라 염료의 소수성이 지속적으로 증가함으로써 순수 폴리프로필렌 섬유에 대한 염착성이 크게 증가하는 것을 알 수 있다. Table 1은 합성된 염료들의 소수성값(LogP)과 폴리프로필렌 섬유에 대한 염착성과의 관계를 나타낸 것으로 알킬기의 길이가 길어짐에 따라 LogP값이 증가한다는 것을 확인 할 수 있다. 이러한 염료의 소수성값 예측은 다른 폴리프로필렌 섬유용 염료의 개발에 있어서도 아주 유용하게 활용될 수 있을 것으로 생각된다.

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

Alkyl substituents	Color of dyes								
	Blue			Yellow			Red		
	LogP	Fk value	K/S	LogP	Fk value	K/S	LogP	Fk value	K/S
none	-	-	-	3.668	41.70	73.78	-	-	-
methy	1.414	15.58	16.13	4.755	110.10	149.54	4.865	69.68	3.73
ethyl	2.098	20.78	20.56	5.431	283.30	290.33	5.037	236.45	14.64
propyl	-	-	-	6.404	297.83	299.72	5.949	570.12	26.82
butyl	3.896	57.69	60.42	7.238	330.94	321.55	6.861	599.22	27.21
pentyl	4.730	104.71	112.76	-	-	-	8.685	629.16	28.29
hexyl	-	-	-	8.907	339.37	323.40	-	-	-
octyl	7.234	150.59	198.83	-	-	-	-	-	-

Tel.: +82-11-9368-1699; e-mail: love29j@hanmail.net