

# Bis(aminochlorotriazine)계 일종이관능 반응성염료의 linkage group 의 영향에 관한 연구(1)

- 염료분자 모델링을 통한 염색성의 예측 -

오명준, 김재필

서울대학교 섬유고분자공학과

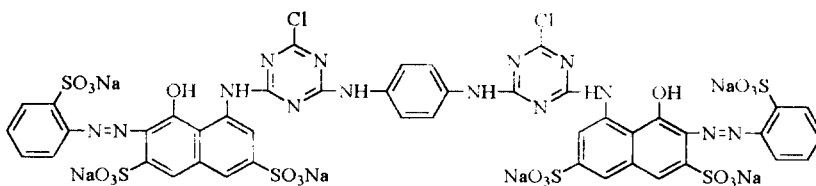
## 1. 서론

반응성 염료는 면 및 단백질 섬유 염색용 염료로서 그 중요성이 점점 증가하고 있다. 이 반응성 염료는 피염체와 공유결합을 형성한다는 점에서 다른 염료와는 구별된다.

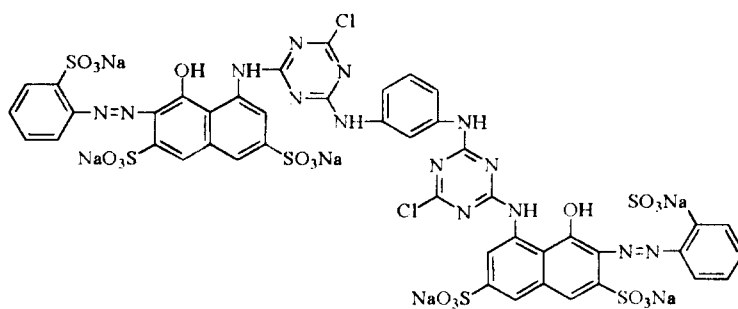
반응성 염료의 필수 구성요소로는 색상과 직접성을 결정하는 발색단, 면의 hydroxyl group 과 반응하는 반응기, 발색단과 반응기를 연결하는 bridge group 및 염료에 수용성을 부여하는 수용성기 등이 있다<sup>1</sup>. 특히 일부 bis(aminochlorotriazine)계 일종이관능 반응성염료는 2 개의 발색단을 연결하는 linkage group 을 부가적으로 가지고 있다.

1980년대 이후부터 면 염색용 반응성 염료의 대부분을 차지하는 이관능 반응성 염료는 높은 흡진율과 뛰어난 고착율을 보이는 장점을 가지고 있다. 이 중에서 bis(aminochlorotriazine)계 일종이관능 반응성염료는 직접성이 크기 때문에 뛰어난 흡진율 및 70-80%의 높은 고착율을 보인다. 그러나 이 bis(aminochlorotriazine)계 일종이관능 반응성염료는 이러한 장점에도 불구하고 염료 본래의 높은 직접성에 기인한 중성염욕에서의 1차출진이 알카리 첨가 후의 2차출진에 비하여 상당히 높아 균염을 얻기가 어려우며, 세정시 미고착염료의 제거가 용이하지 않은 단점을 가지고 있다<sup>2</sup>.

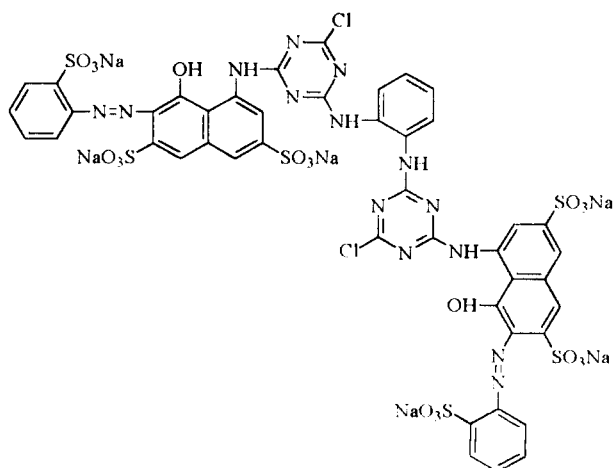
본 연구에서는 염료 분자구조 모델링을 통하여 bis(aminochlorotriazine)계 일종이관능 반응성염료의 linkage group 의 구조 변화에 따른 염색성의 변화를 예측한 후, 실제로 염료를 합성, 염색성을 분석하여 염료 분자구조 모델링의 염색성 예측가능성을 판단하고자 한다.



**Dye-H-1,4(C.I. Reactive Red 120)**



**Dye-H-1,3**



**Dye-H-1,2**

**Fig. 1. Chemical structures of the dyes synthesized in the present study.**

## 2. 실험

### 2.1 염료 분자구조 모델링

염료분자의 force field optimization 을 위하여 work station(INDY, Silicon Graphics 사, 미국)과 Cerius<sup>2</sup>(MSI 사, 미국) software 를 사용하였다.

### 2.2 시료 및 시약

염료합성 및 정제에 사용된 시약은 모두 시판 1 급을 사용하였으며, 염색시험에는 정련, 표백된 머서화 면((주)방립)을 사용하였다.

### 2.3 염료의 합성

H-acid 와 cyanuric chloride 를 0-5 °C에서 1 차 축합시킨 액에 aniline-2-sulfonic acid 의 디아조화물을 일시에 투입하고 10% Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 용액을 적가하여 pH 6.8-7.0 로 조절한 후 4 시간동안 커플링시켰다. 이렇게 생성된 커플링액에 linkage group 으로 사용된 1,4-phenylene diamine(Dye-H-1,4), 1,3-phenylene diamine(Dye-H-1,3), 1,2-phenylene diamine(Dye-H-1,2) 각각을 투여한 후, 40 °C에서 4 시간 반응시켜 3 종류의 염료를 합성하였다. 합성된 염료는 20% W/V NaCl 을 첨가하여 염색한 후 여과 건조하였다.

### 2.3 염료의 정제

건조된 염료 20 g 을 100 ml 증류수로 용해시킨 다음 여과하여 불용성 불순물을 제거하고 재염색하여 여과, 건조하였다. 건조된 염료 10 g 을 100 ml DMF 로 용해시킨 후 여과하여 잔존 염분을 제거하였다. 또 이 여과액에 methylene chloride 300 ml 를 가하여 침전을 형성시킨 후 여과, 건조하였다.

### 2.4 합성염료의 구조분석

#### 2.4.1 적외선 분광 분석

적외선 분광 분석기(FT-IR, Prospect-IR, Midoc 사, 미국)를 사용하여, KBr pellet, 실온에서 주사회수 16 회, 분해능 4 cm<sup>-1</sup> 의 조건으로 측정하였다.

## 2.4.2 핵자기 공명 분광 분석

핵자기 공명 분광 분석기( $^1\text{H-NMR}$ , AMX500, Bruker, 500Mhz)를 사용하였으며 용매로는 methyl sulfoxide- $\text{d}_6$ , 기준물질로는 TMS 를 사용하였다

## 2.5 염색

# 3. 결과 및 고찰

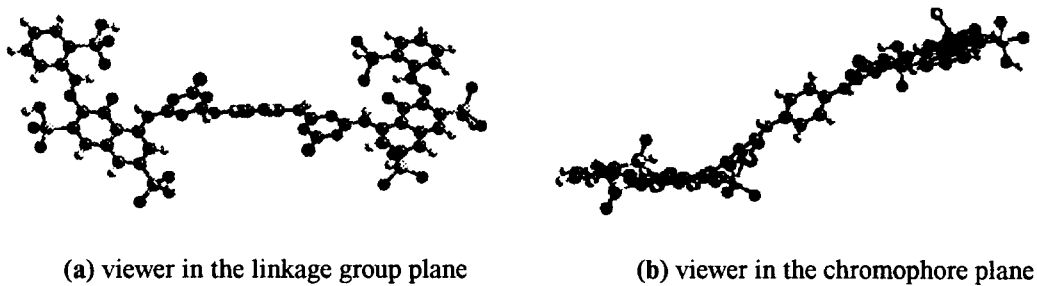
## 3.1 염료 분자구조 모델링

Fig. 2-4 와 같이 염료의 분자구조 모델링의 결과 Dye-H-1.4, Dye-H-1.3, Dye-H-1.2 의 순으로 염료 구조의 평면성과 직선성이 감소함을 알 수 있다. 특히 발색단인 아조기를 중심으로 페닐링과 나프탈렌링은 거의 평면, 아조 발색단과 triazines 는 약  $8^\circ$  정도의 각도로 관찰되었다. 반응성 염료의 흡진, 특히 알카리 첨가전 흡진은 직접염료의 흡진거동과 유사하며 염료의 직선성과 평면성에 따라 좌우된다. 따라서 염료의 흡진율은 Dye-H-1.2, Dye-H-1.3, Dye-H-1.4 의 순으로 증가할 것이라고 예측할 수 있다.

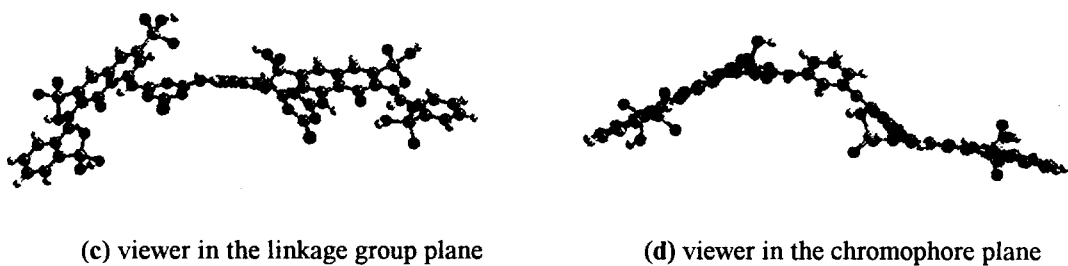
## 3.2 염료의 색상 및 염색결과

**Table 1. Molecular weights, absorbtion maxima, tinctorial strength and exhaustion of dyes synthesized**

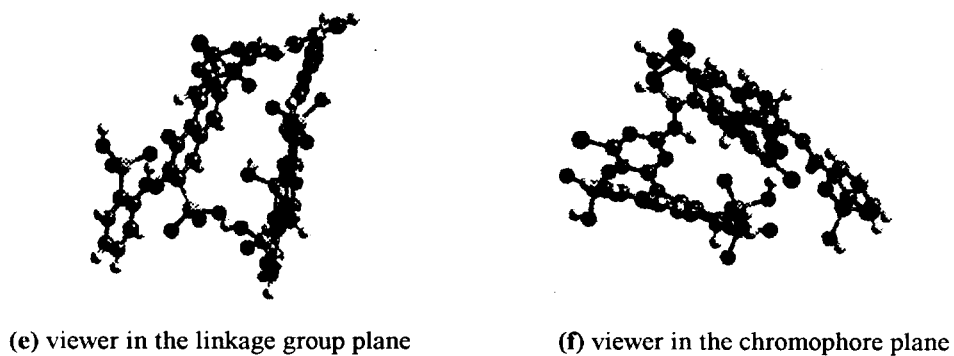
Dye	Mol. wt	$\lambda_{\text{max}}(\text{nm})$	$\epsilon_{\text{max}}$	Exhaustion(%)	
				before alkali-adding	after dyeing
Dye-H-1.4	1470	514	39,000	76	85
Dye-H-1.3	1470	514	36,800	57	76
Dye-H-1.2	1470	514	37,500	20	51



**Fig. 2. Calculated threedimensional structure of Dye-H-1,4.**



**Fig. 3. Calculated threedimensional structure of Dye-H-1,3.**



**Fig. 4. Calculated threedimensional structure of Dye-H-1,2.**

#### 4. 결론

1. 염료 분자구조 모델링은 염료의 흡진거동의 예측에 사용가능하며 반응성 염료뿐만 아니라 기타 여러가지 염료에 적용가능할 것으로 기대된다.
2. bis(amono-chlorotriazine)계 일종이관능 염료의 linkage group 의 변화는 염색성의 변화에 크게 영향을 미칠 수 있다.

#### 참고문헌

1. John Shore in "Cellulosics Dyeing"(John Shore Ed.), pp. 189-245, SDC, West Yorkshire, UK, 1995.
2. M. J. Bradbury, P. S. Collishaw and D. A. S. Phillips, *J. S. D. C.*, **108**, 430(1992).