



به نام خدایی که در این مرد است

کلیه حقوق مادی مترتب بر نتایج مطالعات، ابتکارات و

نوآوری های ناشی از تحقیق موضوع این پایان نامه

متعلق به دانشگاه رازی است.



دانشگاه رازی  
دانشکده فنی و مهندسی  
گروه مهندسی شیمی

پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد رشته مهندسی شیمی  
گرایش پیشرفته

**عنوان پایان نامه**

**مدلسازی و بهینه‌سازی فرایند انعقاد و لخته‌سازی جهت حذف مواد آلاینده از پساب‌ها**

استاد راهنما:

دکتر مجتبی احمدی

نگارش:

آرش اخوانی

مهر ماه ۱۳۹۱



دانشگاه رازی

دانشکده فنی و مهندسی

گروه مهندسی شیمی

پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد رشته مهندسی شیمی  
گرایش پیشرفته

نام دانشجو:

آرش اخوانی

تحت عنوان

**مدلسازی و بهینه‌سازی فرایند انعقاد و لخته‌سازی جهت حذف مواد آلاینده از پساب‌ها**

در تاریخ ۹۱/۷/۳۰ توسط هیأت داوران زیر بررسی و با درجه عالی به تصویب نهایی رسید.

۱- استاد راهنما دکتر مجتبی احمدی با مرتبه علمی استادیار امضاء

۲- استاد داور داخل گروه دکتر لاله رجیبی با مرتبه علمی استادیار امضاء

۳- استاد داور داخل گروه دکتر مهدی امیری نژاد با مرتبه علمی استادیار امضاء

آسوده باد روح پاک پدرم،

او که از هیچ چیز در راه اعتلایم مضایقه نکرد.

پیشکشی ناچیز به همسر مهربانم

که بی شک بدون همراهی او

پیمودن این راه دشوار برایم ممکن نبود.

## چکیده

رنگزاها ترکیبات آلی با ساختارهای پیچیده و بسیار مقاومی هستند که در صورت عدم تصفیه مناسب، قادرند برای مدت‌های طولانی بصورت پایدار در محیط باقی بمانند. این ترکیبات در صورت ورود به بدن انسان، موجب ابتلا به طیف وسیعی از اختلالات دستگاه‌های ایمنی، تنفسی و عصبی شده و در مرحله پیشرفته‌تر بصورت تومورهای بدخیم سلول‌های مغز استخوان، سرطان خون، تنگی نفس، یرقان، عفونت‌های چشمی و پوستی و یا حتی تورم ریه بروز می‌کنند. در این پژوهش، کارایی روش انعقاد و لخته‌سازی به هدف حذف رنگزای اسید آبی ۱۹۳ (AB۱۹۳) از پساب سنتزی به کمک منعقدکننده پلی آلومینیوم کلراید مورد بررسی قرار گرفته است. در این رابطه از طراحی آماری آزمایشات به روش پاسخ سطح (RSM) استفاده شده است تا اثرات جداگانه و توأم پارامترهای عملیاتی انتخابی، یعنی pH محلول، غلظت اولیه رنگزا و دوز منعقدکننده، ارزیابی شده و مقادیر بهینه این پارامترها به منظور دستیابی به ماکزیمم مقدار رنگ‌زدایی بدست آید. نتایج حاصل از RSM نشان دادند که شرایط بهینه رنگ‌زدایی در فرایند مذکور در pH برابر با ۶/۴۶ غلظت اولیه رنگزای ۱۶۲/۷۳ mg/L و دوز منعقدکننده ۹۰/۰ اتفاق می‌افتد. تحت این شرایط بیشترین راندمان رنگ‌زدایی به ۸۶/۰۸٪ رسید. همچنین مشاهده گردید که افزودن مقادیر مختلف پلی اکریل آمید آبیونی به پساب حاوی رنگزا، به عنوان کمک منعقدکننده، هیچ تاثیری در بهبود راندمان فرایند رنگ‌زدایی نداشت. در حالیکه تاثیر آن بر کاهش زمان مورد نیاز برای لخته‌سازی به وضوح دیده شد. این تاثیر به گونه‌ای بود که در هنگام استفاده از ۱۴ mg/L پلی اکریل آمید، راندمان حذف رنگزا پس از گذشت ۲/۵ دقیقه از مرحله لخته‌سازی، به ۸۲/۹٪ رسید. بنابراین، استفاده از پلی اکریل آمید به عنوان یک کمک منعقدکننده موثر و ارزان قیمت، کمک شایانی به کاهش زمان مورد نیاز و هزینه‌های کلی فرایند خواهد داشت.

واژه‌های کلیدی: انعقاد و لخته‌سازی، روش RSM، اسید آبی ۱۹۳، پلی آلومینیوم کلراید، پلی اکریل آمید



## فهرست مطالب

صفحه

عنوان

### فصل اول: کلیاتی بر اهمیت تحقیق

### فصل دوم: مبانی نظری پژوهش

۵	۱-۲- رنگراها
۵	۱-۱-۲- طبقه بندی مواد رنگزا
۶	۱-۱-۱- طبقه بندی مواد رنگزا از دیدگاه کاربردی
۷	۱-۱-۲- طبقه بندی مواد رنگزا با توجه به ساختار شیمیایی
۸	۱-۲- منابع انتشار آلاینده‌های رنگی
۹	۱-۳- اثرات زیست محیطی رنگراها
۹	۱-۳-۱- اثرات مستقیم تخلیه رنگراها به محیط زیست
۱۰	۱-۳-۲- اثرات غیر مستقیم تخلیه رنگراها به محیط زیست
۱۱	۲- روش‌های حذف رنگزا از فاضلاب‌های صنعتی
۱۲	۱-۱-۲- اکسیداسیون
۱۲	۲-۲-۲- اکسیداسیون پیشرفته
۱۳	۳-۲- جذب سطحی
۱۴	۴-۲- فیلتراسیون و فناوری‌های غشایی
۱۵	۵-۲- تصفیه بیولوژیکی
۱۶	۶-۲- انعقاد و لخته‌سازی
۱۶	۱-۶-۲- مقدمه
۱۷	۲-۶-۲- پیشینه فرایند انعقاد و لخته‌سازی
۱۹	۳-۶-۲- کلوئید و ویژگی‌های آن
۲۱	۴-۶-۲- پایداری ذرات کلوئیدی و تئوری لایه مضاعف الکتریکی
۲۳	۵-۶-۲- مکانیسم‌های فرایند انعقاد و لخته‌سازی
۲۷	۶-۶-۲- عوامل موثر بر فرایند انعقاد و لخته‌سازی
۲۸	۷-۲- مقایسه روش‌های قابل کاربرد در حذف ترکیبات رنگی از پساب‌ها
۲۹	۳-۲- مواد منعقدکننده
۲۹	۱-۳-۲- مواد منعقدکننده طبیعی
۳۰	۱-۱-۳-۲- پلیمرهای گیاهی در نقش منعقدکننده
۳۰	۲-۱-۳-۲- پلیمرهای حیوانی در نقش منعقدکننده

۳۱	..... پلیمرهای میکروارگانیزی در نقش منعقدکننده	۳-۱-۳-۲
۳۱	..... مواد منعقدکننده شیمیایی	۲-۳-۲
۳۲	..... نمک‌های فلزی هیدرولیز شونده	۱-۲-۳-۲
۳۳	..... نمک‌های فلزی پیش هیدرولیزه	۲-۲-۳-۲
۳۶	..... منعقدکننده‌های آلی (پلی‌الکترولیت‌ها)	۳-۲-۳-۲
۳۷	..... مواد کمک منعقدکننده	۴-۲
۳۷	..... پلی‌اکریل آمید	۱-۴-۲
۳۸	..... طراحی آماری آزمایشات	۵-۲
۳۸	..... مقدمه	۱-۵-۲
۳۹	..... روش‌های طراحی آزمایشات	۲-۵-۲
۳۹	..... روش فاکتوریل	۱-۲-۵-۲
۴۰	..... روش پاسخ سطح	۲-۲-۵-۲
۴۰	..... طراحی آزمایشات به روش RSM	۳-۵-۲
۴۰	..... تعیین محدوده مناسب پارامترهای عملیاتی	۱-۳-۵-۲
۴۱	..... انتخاب نوع طراحی آزمایشات و تهیه ماتریس آزمایشات	۲-۳-۵-۲
۴۲	..... انجام محاسبات ریاضی - آماری برای فیت کردن معادله پاسخ	۳-۳-۵-۲
۴۳	..... بررسی اهمیت و مناسب بودن مدل	۴-۳-۵-۲
۴۵	..... بهینه‌سازی فرایند	۵-۳-۵-۲

### فصل سوم: مروری بر مطالعات پیشین

### فصل چهارم: مواد، دستگاه‌ها و روش‌های انجام پژوهش

۵۴	..... مواد مورد استفاده	۱-۴
۵۵	..... دستگاه‌های مورد استفاده	۲-۴
۵۵	..... آماده‌سازی نمونه‌های حاوی رنگزا	۳-۴
۵۶	..... اندازه‌گیری غلظت رنگزا	۴-۴
۵۶	..... رابطه میان میزان جذب و غلظت رنگزا	۵-۴
۵۷	..... آزمایش جار	۶-۴
۵۷	..... انتخاب پارامترهای عملیاتی	۷-۴
۵۸	..... روش انجام آزمایشات	۸-۴
۵۸	..... فاز اول: انجام آزمایشات به روش کلاسیک	۱-۸-۴
۵۸	..... اهداف مورد انتظار	۱-۱-۸-۴
۵۸	..... روش کار	۲-۱-۸-۴
۵۹	..... انتخاب محدوده پارامترهای عملیاتی در طراحی آزمایشات	۳-۱-۸-۴

- ۵۹ ..... ۲-۸-۴- فاز دوم: انجام آزمایشات به کمک روش طراحی آزمایشات ..... ۵۹
- ۵۹ ..... ۱-۲-۸-۴- اهداف مورد انتظار ..... ۵۹
- ۵۹ ..... ۲-۲-۸-۴- روش کار ..... ۵۹
- ۶۱ ..... ۳-۸-۴- فاز سوم: بهبود فرایند توسط ماده کمک منعقدکننده ..... ۶۱
- ۶۱ ..... ۱-۳-۸-۴- اهداف مورد انتظار ..... ۶۱
- ۶۱ ..... ۲-۳-۸-۴- روش کار ..... ۶۱

### فصل پنجم: نتایج و دستاوردها

- ۶۳ ..... ۱-۵- رابطه میان میزان جذب و غلظت رنگزا ..... ۶۳
- ۶۴ ..... ۲-۵- نتایج فاز اول ..... ۶۴
- ۶۴ ..... ۱-۲-۵- تاثیر pH بر راندمان رنگزدایی ..... ۶۴
- ۶۵ ..... ۲-۲-۵- تاثیر غلظت اولیه رنگزا بر راندمان رنگزدایی ..... ۶۵
- ۶۵ ..... ۳-۲-۵- تاثیر دوز منعقدکننده بر راندمان رنگزدایی ..... ۶۵
- ۶۶ ..... ۳-۵- نتایج فاز دوم ..... ۶۶
- ۶۸ ..... ۱-۳-۵- بدست آوردن مدل تجربی ..... ۶۸
- ۶۹ ..... ۲-۳-۵- بررسی اعتبار مدل بدست آمده ..... ۶۹
- ۶۹ ..... ۱-۲-۳-۵- آنالیز واریانس (ANOVA) ..... ۶۹
- ۷۱ ..... ۲-۲-۳-۵- نمودارهای باقیمانده ..... ۷۱
- ۷۲ ..... ۳-۳-۵- بررسی تغییرات پارامترهای عملیاتی ..... ۷۲
- ۷۲ ..... ۱-۳-۳-۵- نمودارهای اثرات اصلی ..... ۷۲
- ۷۴ ..... ۲-۳-۳-۵- نمودارهای سطحی و کانتور ..... ۷۴
- ۷۸ ..... ۴-۳-۵- بهینه سازی فرایند ..... ۷۸
- ۷۹ ..... ۴-۵- نتایج فاز سوم ..... ۷۹
- ۷۹ ..... ۱-۴-۵- بررسی تاثیر پلی اکریل آمید در بهبود راندمان رنگزدایی ..... ۷۹
- ۸۰ ..... ۲-۴-۵- بررسی تاثیر پلی اکریل آمید بر کاهش زمان لخته سازی ..... ۸۰

### فصل ششم: جمع بندی و پیشنهادات

- ۸۳ ..... ۱-۶- جمع بندی ..... ۸۳
- ۸۴ ..... ۲-۶- پیشنهادات ..... ۸۴

- ۸۵ ..... منابع و مآخذ ..... ۸۵

## فهرست شکل‌ها

عنوان	صفحه
شکل ۱-۲- ساختار کلی رنگزاهای آزویک، آنتراکینون و تری آریل متان	۸
شکل ۲-۲- محدوده عملکرد فرایند غشایی با توجه به ابعاد ذرات آلاینده	۱۵
شکل ۳-۲- لایه مضاعف الکتریکی (مدل استرن)	۲۲
شکل ۴-۲- مکانیسم پرکینتیکی انعقاد	۲۳
شکل ۵-۲- مکانیسم اورتوکینتیکی انعقاد	۲۴
شکل ۶-۲- اثر غلظت پایین (الف) و بالای (ب) منعقدکننده بر پایداری ذرات کلوئیدی	۲۵
شکل ۷-۲- تقسیم بندی منعقدکننده‌های طبیعی	۳۰
شکل ۸-۲- تقسیم بندی منعقدکننده‌های شیمیایی	۳۱
شکل ۹-۲- نقاط موجود در طراحی CCD برای ۳ فاکتور	۴۲
شکل ۱-۴- ساختار شیمیایی رنگزای اسید آبی ۱۹۳	۵۴
شکل ۲-۴- دستگاه جارتست دست ساز	۵۵
شکل ۱-۵- رابطه میان میزان جذب و غلظت رنگزا	۶۳
شکل ۲-۵- تاثیر pH بر میزان حذف رنگزا (غلظت اولیه رنگزا = ۱۰۰ mg/L و دوز منعقدکننده = ۵۰ mg/L)	۶۴
شکل ۳-۵- لخته‌ها و رسوب تشکیل شده در محدوده pH خنثی	۶۴
شکل ۴-۵- تاثیر غلظت اولیه رنگزا بر میزان حذف رنگزا (pH=۶ و دوز منعقدکننده = ۵۰ mg/L)	۶۵
شکل ۵-۵- تاثیر دوز منعقدکننده بر میزان حذف رنگزا (pH=۶ و غلظت اولیه رنگزا = ۱۱۰ mg/L)	۶۶
شکل ۶-۵- مقایسه‌ای بین راندمان رنگ‌زدایی مشاهده‌شده و پیش‌بینی شده	۶۹
شکل ۷-۵- نمودار احتمال نرمال برای مدل بدست آمده	۷۱
شکل ۸-۵- نمودار باقیمانده‌ها بر حسب مقادیر منطبق شده برای مدل بدست آمده	۷۲
شکل ۹-۵- نمودارهای Main effect برای pH، غلظت اولیه رنگزا و دوز منعقدکننده	۷۳
شکل ۱۰-۵- نمودار سطحی و کانتور به عنوان تابعی از pH و غلظت اولیه رنگزا در دوز منعقدکننده ۶۰ mg/L	۷۴
شکل ۱۱-۵- نمودار سطحی و کانتور به عنوان تابعی از pH و دوز منعقدکننده در غلظت اولیه رنگزای ۱۴۰ mg/L	۷۵
شکل ۱۲-۵- نمودار سطح و کانتور به عنوان تابعی از غلظت اولیه رنگزا و دوز منعقدکننده در pH برابر با ۶/۵	۷۶
شکل ۱۳-۵- تاثیر افزایش پلی‌اکریل آمید به نمونه‌های حاوی رنگزا	۷۹
شکل ۱۴-۵- اثر افزایش کمک منعقدکننده بر کاهش زمان مرحله لخته‌سازی در دوز ثابت ۴ mg/L از PAM	۸۰

## فهرست جداول

عنوان	صفحه
جدول ۱-۲- مقایسه روش‌های مورد استفاده برای حذف ترکیبات رنگی از فاضلاب‌ها	۲۹
جدول ۲-۲- محصولات هیدرولیزاسیون آلومینیوم به همراه معادلات تعادل	۳۲
جدول ۱-۴- رابطه میان مقادیر کد شده و مقادیر واقعی پارامترها	۵۹
جدول ۲-۴- ماتریس طراحی آزمایشات بر حسب متغیرهای کد شده	۶۰
جدول ۱-۵- مقادیر واقعی و سطوح کد شده پارامترهای عملیاتی	۶۷
جدول ۲-۵- ماتریس طراحی آزمایشات و نتایج حاصل	۶۷
جدول ۳-۵- ضرایب تخمینی رگرسیون برای متغیرهای کد شده	۶۸
جدول ۴-۵- نتایج ANOVA برای مدل چند جمله‌ای بدست آمده	۷۰
جدول ۵-۵- شرایط بهینه عملیاتی برای متغیرهای فرایند	۷۸

# فصل اول

کلیاتی بر اهمیت تحقیق

امروزه منابع آب جهان، نه تنها به واسطه نیاز روز افزون به آب و مصرف بی حد و اندازه آن تهدید می‌شود، بلکه ورود انواع آلاینده‌ها به منابع آب نیز به همان اندازه در این امر تاثیرگذار است. آلودگی آب که توسط فعالیت‌های انسانی ایجاد می‌شود، تنها به آلاینده‌های نفتی، مواد طبیعی و یا بقای آلاینده‌های آلی که از سوزاندن زباله‌ها به جا می‌ماند منتهی نمی‌شود، بلکه مواد سنتزی صنایع شیمیایی (از قبیل رنگزها، کودها و آفت‌کش‌ها) نیز در این امر دخیل هستند [۱]. منابع آب‌های طبیعی، قدرت بسیار محدودی برای خودپالایی آلاینده‌هایی که از طریق فاضلاب‌های شهری، صنعتی و کشاورزی به آنها تحمیل می‌شود، دارند. به همین دلیل کارشناسان و محققان این حوزه، کاهش کیفیت آب را به عنوان یکی از دلایل اصلی بحران آب در جهان مطرح کرده‌اند [۲].

اخیراً تئوری "فاضلاب مایع صفر" توسط تامسون<sup>۱</sup> و همکاران پیشنهاد شده و در مناطقی که با بحران کمبود منابع آبی مواجه هستند، اجرا می‌شود. هرچند که بازیابی و استفاده مجدد از آب می‌تواند موجب افزایش غلظت مواد آلی و معدنی، تجمع باکتری‌ها، بودار شدن و یا سبب خوردگی آن شود [۳].

انواع بسیار زیادی از فاضلاب‌های صنعتی وجود دارند که هر یک از آنها ویژگی‌های مربوط به خود را داشته و گروه‌های مشخصی از آلاینده‌ها را به خود اختصاص داده‌اند. در این میان ترکیبات رنگی شامل رنگزها<sup>۲</sup> و پیگمنت‌ها<sup>۳</sup> از متنوع‌ترین و پرکاربردترین مواد شیمیایی هستند. آلودگی‌های ناشی از این ترکیبات رنگی از طریق فعالیت‌های صنعتی متعددی نظیر صنایع کاغذ، پلاستیک، مواد آرایشی، چرم و بویژه صنایع رنگ و نساجی به محیط زیست منتقل می‌گردند. در این میان صنعت نساجی بزرگترین مصرف‌کننده ترکیبات رنگی است که به دلیل مصرف بسیار زیاد آب در طی فرایندهای مختلف آن، روزانه حجم عظیمی از فاضلاب را که حاوی مقادیر بسیار زیادی از ترکیبات رنگی است، تولید می‌کند [۴].

مشکل فاضلاب‌های صنعتی و تخلیه آنها بدون تصفیه کافی به محیط زیست، یکی از مسائلی است که در بسیاری از کشورها بویژه در کشورهای در حال توسعه هنوز به قوت خود باقی مانده است. هرچند که اعمال محدودیت‌ها و قوانین سخت از سوی مجامع بین‌المللی، موجب شده تا صاحبان صنایع بیش از پیش درصدد حل مشکلات فاضلاب خود باشند. این در حالی است که در بسیاری از کشورهای توسعه یافته نظیر ژاپن و آمریکا، هدف از تصفیه فاضلاب‌های صنعتی، نه تنها جلوگیری از آلودگی محیط زیست است، بلکه

---

<sup>1</sup> Thampson

<sup>2</sup> Dyes

<sup>3</sup> Pigments

احیا و استفاده مجدد از این فاضلاب‌ها اهداف مهمتری هستند که در این کشورها با تلاش زیاد دنبال شده و به دست آمده‌اند.

رنگزها ترکیباتی به شدت پایدار هستند و بدون تصفیه مناسب و کافی قادرند به مدت طولانی بدون تغییر در محیط باقی بمانند [۵]. رهاسازی فاضلاب‌های حاوی این مواد به منابع پذیرنده، همواره موجب برهم خوردن اکوسیستم آبهای پذیرنده می‌شود. در ضمن اثبات اثرات سرطان‌زایی و جهش‌زایی در رابطه با بسیاری از این ترکیبات، موجب منع استفاده از برخی از آنها شده است. از اینرو مشکل فاضلاب‌های رنگی به دلیل داشتن حجم و بار آلودگی زیاد، در حال حاضر به یکی از مسائل چالش برانگیز در تصفیه آب و فاضلاب تبدیل شده و مورد توجه هرچه بیشتر مسئولان و محققان در سراسر دنیا قرار گرفته است.

امروزه روش‌های مختلفی برای حذف رنگزها از پساب وجود دارد که از جمله آنها می‌توان به روش‌های انعقاد و لخته‌سازی، تصفیه بیولوژیکی، جذب سطحی، فرایندهای غشایی، اکسیداسیون و غیره اشاره کرد که هر یک مزایا و معایب مخصوص خود را دارا هستند [۶و۵]. مشکل عمده در رابطه با بیشتر این روش‌ها، هزینه‌های بهره‌برداری و نگهداری بسیار زیاد است که موجب می‌شود استفاده از آنها در بسیاری از کشورها مناسب و مقرون به صرفه نباشد [۷]. در این میان، انعقاد و لخته‌سازی فرایندی است که اگر چه مانند سایر روش‌ها دارای معایبی نیز هست، اما به دلیل داشتن توجیه اقتصادی، سادگی عملکرد، عدم تولید محصولات جانبی خطرناک و مصرف انرژی کم، هنوز هم در کشورهای توسعه یافته و در حال توسعه بصورت وسیعی مورد استفاده قرار می‌گیرد [۵].

در این پژوهش سعی شده است تا با انجام آزمایشات مختلف و تحلیل نتایج بدست آمده، بررسی جامعی در رابطه با پارامترهای موثر در فرایند انعقاد و لخته‌سازی و چگونگی عملکرد این فرایند در حذف رنگزها از پساب سنتزی صورت گیرد.



# فصل دوم

مبانی نظری پژوهش

## ۲-۱- رنگزاها

رنگزاها ترکیباتی آلی با ساختارهای پیچیده و بسیار مقاوم هستند. ساختار شیمیایی یک رنگزا از سه گروه اصلی به شرح زیر تشکیل شده است [۸۵]:

- کروموفورها<sup>۱</sup>: گروه‌هایی از اتم‌ها هستند که دلیل اصلی رنگ دار بودن ترکیبات رنگی به حساب می‌آیند. مهمترین گروه‌های کروموفور عبارتند از گروه‌های آزو (-N=N-)، نیترو (-NO<sub>2</sub>)، نیتروزو (-N=O)، اتنیل (-C=C-)، کربونیل (-C=O) و تیو کربنیل (-CH=S).
- آکسوکروم‌ها<sup>۲</sup>: علاوه بر کروموفورها، یک یا چند گروه الکترون دهنده به نام آکسوکروم نیز در ساختار رنگزا وجود دارد که مهمترین تاثیر آن، شدت بخشیدن به رنگ کروموفورها می باشد. میزان شدت رنگ نیز به تعداد گروه‌های آکسوکروم موجود در رنگزا بستگی دارد. مهمترین گروه‌های آکسوکروم عبارتند از آمین (-NH<sub>3</sub>)، کربوکسیل (-COOH)، سولفونیل (-SO<sub>3</sub>H) و هیدروکسیل (-OH).
- کروموژن<sup>۳</sup>: ترکیبات بنزنی حاوی رادیکال‌های کروموفوری هستند.

## ۲-۱-۱- طبقه بندی مواد رنگزا

برخی از ترکیبات، علی رغم رنگی بودنشان، رنگزا محسوب نمی‌شوند، چرا که قابلیت و توانایی ترکیب شدن با منسوجات را ندارند. این مواد برای تبدیل شدن به رنگزا، علاوه بر داشتن گروه‌های کروموفوری، بایستی دارای گروه‌های آکسوکروم نیز باشند. آکسوکروم در کنار شدت بخشیدن به رنگ کروموفورها، ویژگی تجزیه الکترولیتی (یعنی جدایش مولکول‌های رنگزا از ترکیب خود و تشکیل نمک‌های اسیدی یا قلیایی) را نیز به رنگزا می‌دهند که سبب ایجاد گروه‌های مختلفی از رنگزاها می‌شود [۵].

مواد رنگزا را می‌توان بر اساس ساختار شیمیایی آنها و نیز بر اساس روش کاربرد آنها طبقه بندی نمود. در ادامه انواع رنگزاها از دیدگاه کاربردی و ساختار شیمیایی معرفی شده‌اند [۸۵].

<sup>1</sup> Chromophores

<sup>2</sup> Auxochromes

<sup>3</sup> Chromogen

## ۲-۱-۱-۱- طبقه بندی مواد رنگزا از دیدگاه کاربردی

بر اساس این طبقه بندی، مواد رنگزا به دو گروه تقسیم می‌شوند.

### ۱. مواد رنگزای گروه اول

تمامی رنگزاهای این گروه در آب محلول هستند، به جز مواد رنگزای دیسپرس که به مقدار جزئی در

آب حل می‌شوند. رنگزاهای این گروه عبارتند از [۹۸ و ۱۰]:

- **رنگزاهای اسیدی<sup>۱</sup>**: رنگزاهای اسیدی در آب محلول هستند و از آنجا که جزء رنگی موجود در آنها بصورت آنیون است، به آنها رنگزاهای اسیدی گفته می‌شود. این دسته از رنگزاها معمولاً نمک‌های سدیم اسید سولفوریک هستند و گروه‌های آنیونی موجود بر روی آنها عبارتند از هیدروکسیل، کربوکسیل و سولفونیک. فرایند رنگزایی توسط رنگزاهای اسیدی از طریق برقراری پیوند یونی و همچنین پیوند هیدروژنی با بارهای مثبت موجود در ترکیبات الیاف، صورت می‌گیرد. رنگزاهای اسیدی معمولاً برای رنگزایی الیاف ابریشمی، پشمی و نایلونی بکار می‌روند.
- **رنگزاهای بازی<sup>۲</sup>**: رنگزاهای بازی در آب محلول هستند و از آنجا که جزء رنگی فعال در آنها بصورت کاتیون است، به این نام شناخته می‌شوند. گروه‌های کاتیونی موجود بر روی رنگزاهای بازی عبارتند از گروه‌های آمینو و آلکیل آمینو. این دسته از رنگزاها معمولاً برای الیاف آکرلیک، پلی استر و همچنین برای رنگزایی کاغذ بکار می‌روند و فرایند رنگزایی توسط آنها از طریق برقراری پیوند یونی با بارهای منفی موجود در ترکیبات الیاف، صورت می‌گیرد.
- **رنگزاهای مستقیم<sup>۳</sup>**: این دسته از رنگزاها معمولاً آنیونیک بوده و به دلیل داشتن گروه‌های سولفونیک، در آب محلول می‌باشند. ترکیبات اصلی این رنگها را نمک‌های سدیم، مواد تثبیت کننده و ترکیبات فلزی مانند کروم و مس تشکیل می‌دهند. مکانیسم اصلی این رنگزاها در فرایند رنگزایی، از طریق دو مکانیسم پیوند هیدروژنی و پیوند یونی انجام می‌گیرد. رنگزاهای مستقیم معمولاً برای رنگزایی کتان، چرم، الیاف مصنوعی، نایلون و ... مورد استفاده قرار می‌گیرند.
- **رنگزاهای دیسپرس<sup>۴</sup>**: رنگزاهای دیسپرس فاقد گروه‌های محلول کننده در آب مانند سولفونیک هستند و به همین دلیل جزء مواد رنگزای محلول در آب به حساب می‌آیند. این دسته از رنگزاها برای رنگزایی الیاف پلی استر، پلی آمید، آکرلیک، پلاستیک و استات سلولز بکار می‌روند.

<sup>1</sup> Acid Dyes

<sup>2</sup> Basic Dyes

<sup>3</sup> Direct Dyes

<sup>4</sup> Disperse Dyes

## ۲. مواد رنگزای گروه دوم

این دسته از رنگزها توسط مکانیسم ویژه‌ای بصورت نامحلول بروی الیاف قرار می‌گیرند و به همین دلیل دارای ثبات بالایی می‌باشند. مواد رنگزای این گروه عبارتند از [۱۰و۸]:

- رنگزهای گوگردی<sup>۱</sup>: این رنگزها از طریق حرارت دادن برخی ترکیبات آلی با گوگرد یا پلی سولفیدهای قلیایی تهیه می‌شوند و ساختمان شیمیایی غالب آنها ناشناخته است. رنگزهای گوگردی غالباً در آب نامحلول هستند و برای استفاده باید آنها را با سولفید سدیم مایع احیا و محلول در آب نمود. رنگزهای گوگردی غالباً برای رنگزری کتان و الیاف مصنوعی بکار می‌روند.
- رنگزهای کرومی یا دندانهای<sup>۲</sup>: این رنگزها در ساختمان خود دارای ترکیبات کرومی غالباً به شکل دی کرومات سدیم هستند و به دلیل داشتن یک یا چند گروه اسیدی هیدروکسیل و کربوکسیل، در رنگزری مانند رنگزهای اسیدی رفتار می‌کنند. برخی از آنها نیز دارای گروه‌های کاتیونی آمینو هستند. رنگزهای کرومی بیشتر برای رنگزری پشم بکار می‌روند.
- رنگزهای خمی<sup>۳</sup>: این دسته از رنگزها معمولاً در آب نامحلول هستند و برای بکارگیری ابتدا آنها را با استفاده از یک محلول قلیایی احیا می‌کنند تا قابل حل در آب شوند. رنگزهای خمی معمولاً برای الیاف پشم، پنبه، کتان و الیاف مصنوعی بکار می‌روند.
- رنگزهای راکتیو<sup>۴</sup>: این رنگزها بیشتر برای رنگزری کتان و در مواردی الیاف پشمی و ابریشمی و نایلونی بکار می‌روند. مکانیسم رنگزری این رنگزها از طریق برقراری پیوند کوالانسی با الیاف می‌باشد. کلرید سدیم، سود و اتان دی آمین از جمله موادی هستند که در ساختمان شیمیایی این رنگزها وجود دارد.
- پیگمنت‌ها: پیگمنت‌ها عموماً مواد رنگین، بی‌اثر، پایدار و نامحلول در آب هستند که در رنگین کردن یک کالا شرکت دارند.

### ۲-۱-۱-۲- طبقه بندی مواد رنگزا با توجه به ساختار شیمیایی

از دیدگاه ساختار شیمیایی، رنگزها معمولاً به سه گروه زیر تقسیم می‌شوند (گروه‌های دیگری نیز وجود دارند، اما از آنجا که کاربرد و تعداد رنگزهای آنها بسیار کم است، از ذکر آنها صرفنظر می‌گردد):

- رنگزهای آزویک<sup>۵</sup>: رنگزها و پیگمنت‌های آزو بزرگترین گروه از تمام مواد رنگ کننده (بالغ بر ۵۰٪ کل مواد رنگزا) را تشکیل می‌دهند [۱۱و۱۲]. شاخص تمام رنگزهای گروه آزو، وجود حداقل یک گروه آزو به شکل  $-N=N-$  در ساختار مولکولی آنها می‌باشد. گروه‌های آزو معمولاً توسط

<sup>1</sup> Sulfur Dyes

<sup>2</sup> Chrome or Mordant Dyes

<sup>3</sup> Vat Dyes

<sup>4</sup> Reactive Dyes

<sup>5</sup> Azoic Dyes