

بِسْمِ اللّٰهِ الرَّحْمٰنِ الرَّحِیْمِ

رساله‌ی حاضر، حاصل پژوهش‌های نگارنده در دوره‌ی کارشناسی ارشد رشته‌ی شیمی، گرایش آلی است که در آذرماه سال ۱۳۸۹ در دانشکده‌ی علوم پایه، دانشگاه یاسوج به راهنمایی جناب آقای دکتر علیرضا سلیمی بنی و مشاوره‌ی جناب آقای دکتر علیرضا نجفی چرمهینی از آن دفاع شده است و کلیه‌ی حقوق مادی و معنوی آن متعلق به دانشگاه یاسوج است.



دانشکده علوم
گروه شیمی

پایان نامه‌ی کارشناسی ارشد رشته‌ی شیمی گرایش آلی

سنتز تعدادی از رنگ‌های آزوی جدید مشتقات تیوزانتون

استاد راهنما:

دکتر علیرضا سلیمی بنی

استاد مشاور:

دکتر علیرضا نجفی چرمهینی

پژوهشگر:

زهرا جعفری چرمهینی

آذرماه ۱۳۸۹



سنتز تعدادی از رنگ‌های آزوی جدید مشتقات تیوزانتون

به وسیله‌ی:
زهرا جعفری چرمهینی

پایان نامه

ارائه شده به تحصیلات تکمیلی دانشگاه به عنوان بخشی از فعالیت‌های تحصیلی لازم برای اخذ درجه‌ی
کارشناسی ارشد

در رشته‌ی:
شیمی آلی

در تاریخ ۱۳۹۹ توسط هیات داوران زیر بررسی و با درجه‌ی عالی به تصویب نهایی رسید.

۱- استاد راهنما: دکتر علیرضا سلیمی بنی با مرتبه‌ی علمی استادیار امضا

۲- استاد مشاور: دکتر علیرضا نجفی چرمهینی با مرتبه‌ی علمی استادیار امضا

۳- استاد داور داخل گروه: دکتر مسعود نصر اصفهانی با مرتبه‌ی علمی دانشیار امضا

۴- استاد داور خارج از گروه: دکتر حشمت الله صمیمی با مرتبه‌ی علمی استادیار امضا

۵- مدیر گروه شیمی: دکتر مرتضی منتظر ظهوری با مرتبه‌ی علمی دانشیار امضا

تقديم به

خانواده‌ی عزیزم

سپاسگزاری

حمد و سپاس خدای را، آن نخستین بی‌پیشین را و آن آخرین بی‌پسین را، خداوندی را که دیده بینایان از دیدارش قاصر آید و اندیشه واصفان از نعت او فروماند، آفریدگان را به قدرت خود ابداع کرد و به مقتضای مشیت خویش جامه هستی پوشید و به همان راه که ارادت او بود روان داشت و رهسپار طریق محبت خویش گردانید.

اکنون که این رساله به پایان رسیده است بر خود فرض می‌دانم از اساتید ارجمند، جناب آقای دکتر علیرضا سلیمی که راهنمایی و جناب آقای دکتر علیرضا نجفی که مشاوره‌ی اینجانب را عهده‌دار بوده‌اند، سپاسگزاری نمایم. همچنین از خانواده‌ی عزیزم به خاطر زحمات بی‌دریغ و تمامی دوستانم کمال تشکر را دارم.

نام: زهرا

نام خانوادگی: جعفری چرمهینی

مقطع تحصیلی: کارشناسی ارشد

رشته و گرایش: شیمی آلی

استاد راهنما: دکتر علیرضا سلیمی بنی

تاریخ دفاع: ۱۳۸۹/۹/۱

سنتز تعدادی از رنگ‌های آزوی جدید مشتقات تیوزانتون

رنگ‌های آزو مهم‌ترین گروه رنگ‌های سنتزی بوده و از قدرت رنگ‌آمیزی بالایی برخوردارند. آن‌ها توجه زیادی را به خود معطوف داشته‌اند و به طور گسترده در کاربردهای عملی فراوانی مانند رنگ‌آمیزی فیبرها، کاربردهای فوتوالکترونیکی، سیستم‌های پرینت، تکنولوژی ذخیره‌ی نوری، رنگ‌های الیاف و همچنین در واکنش‌های زیستی بسیار و در شیمی تجزیه وارد شده‌اند. رنگ‌هایی که دارای قدرت رنگ‌آمیزی و خواص ثابت ماندن بالایی باشند، بسیار مهم هستند. رنگ‌های آزو برپایه‌ی ترکیبات کربونیل درخشنده بوده و دارای چنین خواص ثابت ماندن که شامل ثبوت در برابر نور است، می‌باشند. تیوزانتون‌ها دسته‌ی بزرگی از ترکیبات کربونیل‌دار بوده که به طور گسترده به عنوان پوشش‌های سطحی کاربرد دارند. آن‌ها به عنوان مواد مقاوم در برابر نور و آغازگر نوری و ترکیباتی با قابلیت پلیمریزه شدن نوری در فرایند پلیمریزه شدن ترکیبات غیراشباع و همچنین جوهرها استفاده می‌شوند. در این کار، رنگ‌های آزو برپایه‌ی تیوزانتون توسط واکنش دی‌آزوت‌ه شدن- جفت شدن سنتز گردیدند. برای سنتز رنگ‌های جدید، آمین‌های آروماتیک مختلف با استفاده از سدیم نیتريت در حضور هیدروکلریک اسید در دمای ۵-۰ درجه‌ی سانتیگراد، دی‌آزوت‌ه و سپس با مشتقات هیدروکسی تیوزانتون جفت شدند. طیف این رنگ‌ها گرفته شد و ساختار هر کدام با استفاده از آنالیز طیفی تایید گردید. این رنگ‌ها از لحاظ تئوری بررسی و ویژگی‌هایی مانند طول، زاویه‌ی پیوند، انرژی و بار اتم‌ها مورد مطالعه قرار گرفت.

فهرست مطالب

عنوان	صفحه
فصل اول: مقدمه	
۱-۱-رنگ.....	۱
۱-۱-۱- تقسیم‌بندی رنگ‌ها.....	۱
۱-۱-۱-۱- تقسیم‌بندی شیمیایی.....	۲
۱-۱-۱-۲- تقسیم‌بندی براساس روش کاربرد.....	۳
۲-۱- رنگ‌های آزو.....	۵
۱-۲-۱- تاریخچه.....	۶
۲-۲-۱- سنتز رنگ‌های آزو.....	۶
۱-۲-۲-۱- واکنش دی‌آزوتی شدن.....	۷
۲-۲-۲-۱- واکنش جفت شدن آزو.....	۹
۳-۲-۱- تاتومری در رنگ‌های آزو.....	۱۱
۴-۲-۱- تقسیم‌بندی رنگ‌های آزو.....	۱۳
۱-۴-۲-۱- تقسیم‌بندی رنگ‌های آزو براساس ساختار شیمیایی.....	۱۳
۲-۴-۲-۱- تقسیم‌بندی رنگ‌های آزو براساس کاربرد.....	۱۶
۵-۲-۱- رنگ‌های آزوی کمپلکس شده.....	۱۹
۳-۱- رنگ‌های آزو بر پایه‌ی آنتراکینون.....	۲۰
۴-۱- تیوزانتون.....	۲۱
فصل دوم: بخش تجربی	
۱-۲- دستگاه‌های مورد استفاده.....	۲۴
۲-۲- مواد شیمیایی و حلال‌های مورد استفاده.....	۲۴
۳-۲- خالص‌سازی ترکیبات سنتز شده.....	۲۴
۴-۲- انجام محاسبات.....	۲۴
۵-۲- سنتز مشتقات هیدروکسی تیوزانتون.....	۲۵
۶-۲- سنتز عمومی رنگ‌های آزو.....	۲۵
۱-۶-۲- ترکیب ۳- (۳- هیدروکسی فنیل دی‌آزنیل)-۲- هیدروکسی تیوزانتون.....	۲۵
۲-۶-۲- ترکیب ۳- (۴- نیترو فنیل دی‌آزنیل)-۲- هیدروکسی تیوزانتون.....	۲۶
۳-۶-۲- ترکیب ۳- (۴- کلرو فنیل دی‌آزنیل)-۲- هیدروکسی تیوزانتون.....	۲۶
۴-۶-۲- ترکیب ۳- (۳- برمو فنیل دی‌آزنیل)-۲- هیدروکسی تیوزانتون.....	۲۷
۵-۶-۲- ترکیب ۳- (فنیل دی‌آزنیل)-۲- هیدروکسی تیوزانتون.....	۲۷
۶-۶-۲- ترکیب ۳- (۴- متیل فنیل دی‌آزنیل)-۲- هیدروکسی تیوزانتون.....	۲۸
۷-۶-۲- ترکیب ۳- (۴- متوکسی فنیل دی‌آزنیل)-۲- هیدروکسی تیوزانتون.....	۲۹
۸-۶-۲- ترکیب ۳- (۴- متوکسی فنیل دی‌آزنیل)-۴- هیدروکسی-۱- متیل تیوزانتون.....	۲۹

۳۰	۲-۶-۹ ترکیب ۳- (۳- برموفنیل دی‌آزنیل)-۴- هیدروکسی- ۱- متیل تیوزانتون.....
۳۰	۲-۶-۱۰ ترکیب ۳- (۴- کلروفنیل دی‌آزنیل)-۴- هیدروکسی- ۱- متیل تیوزانتون.....
۳۱	۲-۶-۱۱ ترکیب ۳- (فنیل دی‌آزنیل)-۴- هیدروکسی- ۱- متیل تیوزانتون.....
۳۲	۲-۶-۱۲ ترکیب ۳- (۴- متیل فنیل دی‌آزنیل)-۴- هیدروکسی- ۱- متیل تیوزانتون.....
۳۲	۲-۶-۱۳ ترکیب ۳- (۳- هیدروکسی فنیل دی‌آزنیل)-۴- هیدروکسی- ۱- متیل تیوزانتون.....
۳۳	۲-۶-۱۴ ترکیب ۳- (۴- نیترو فنیل دی‌آزنیل)-۴- هیدروکسی- ۱- متیل تیوزانتون.....
۳۴	۲-۶-۱۵ ترکیب ۳- (۶- متیل بنزوتیازیل- ۲- دی‌آزنیل)- ۲- هیدروکسی تیوزانتون.....

فصل سوم: بحث و نتیجه‌گیری

۳۵	۳-۱ مقدمه.....
۳۶	۳-۲ سنتز رنگ‌های آزو.....
۳۶	۳-۲-۱ مرحله‌ی دی‌آزوته شدن.....
۳۶	۳-۲-۲ مرحله‌ی جفت شدن.....
۳۹	۳-۳ شناسایی رنگ‌ها.....
۳۹	۳-۳-۱ ترکیب ۵۹.....
۳۹	۳-۳-۱-۱ طیف مادون قرمز.....
۳۹	۳-۳-۱-۲ طیف $^1\text{H NMR}$
۴۰	۳-۳-۱-۳ طیف ماوراء بنفش.....
۴۰	۳-۳-۱-۴ طیف جرمی.....
۴۰	۳-۳-۲ ترکیب ۶۲.....
۴۰	۳-۳-۲-۱ طیف مادون قرمز.....
۴۱	۳-۳-۲-۲ طیف $^1\text{H NMR}$
۴۱	۳-۳-۲-۳ طیف ماوراء بنفش.....
۴۱	۳-۳-۲-۴ طیف جرمی.....
۴۱	۳-۳-۳ ترکیب ۶۵.....
۴۲	۳-۳-۳-۱ طیف مادون قرمز.....
۴۲	۳-۳-۳-۲ طیف $^1\text{H NMR}$
۴۲	۳-۳-۳-۳ طیف ماوراء بنفش.....
۴۲	۳-۳-۳-۴ طیف جرمی.....
۴۲	۳-۳-۴ ترکیب ۶۸.....
۴۲	۳-۳-۴-۱ طیف مادون قرمز.....
۴۳	۳-۳-۴-۲ طیف $^1\text{H NMR}$
۴۳	۳-۳-۴-۳ طیف ماوراء بنفش.....
۴۳	۳-۳-۴-۴ طیف جرمی.....
۴۳	۳-۳-۵ ترکیب ۷۱.....
۴۴	۳-۳-۵-۱ طیف مادون قرمز.....
۴۴	۳-۳-۵-۲ طیف $^1\text{H NMR}$
۴۴	۳-۳-۵-۳ طیف ماوراء بنفش.....
۴۴	۳-۳-۵-۴ طیف جرمی.....
۴۴	۳-۳-۶ ترکیب ۷۴.....
۴۵	۳-۳-۱-۶ طیف مادون قرمز.....

۴۵..... ¹ H NMR طیف ۲-۶-۳-۳
۴۵..... ¹³ C NMR طیف ۳-۶-۳-۳
۴۵..... طیف ماوراء بنفش ۴-۶-۳-۳
۴۵..... طیف جرمی ۵-۶-۳-۳
۴۶..... ترکیب ۷۷ ۷-۳-۳
۴۶..... طیف مادون قرمز ۱-۷-۳-۳
۴۶..... ¹ H NMR طیف ۲-۷-۳-۳
۴۶..... طیف ماوراء بنفش ۳-۷-۳-۳
۴۷..... طیف جرمی ۴-۷-۳-۳
۴۷..... ترکیب ۷۹ ۸-۳-۳
۴۷..... طیف مادون قرمز ۱-۸-۳-۳
۴۷..... ¹ H NMR طیف ۲-۸-۳-۳
۴۸..... طیف ماوراء بنفش ۳-۸-۳-۳
۴۸..... طیف جرمی ۴-۸-۳-۳
۴۸..... ترکیب ۸۰ ۹-۳-۳
۴۸..... طیف مادون قرمز ۱-۹-۳-۳
۴۹..... ¹ H NMR طیف ۲-۹-۳-۳
۴۹..... طیف ماوراء بنفش ۳-۹-۳-۳
۴۹..... طیف جرمی ۴-۹-۳-۳
۴۹..... ترکیب ۸۱ ۱۰-۳-۳
۴۹..... طیف مادون قرمز ۱-۱۰-۳-۳
۵۰..... ¹ H NMR طیف ۲-۹-۳-۳
۵۰..... طیف ماوراء بنفش ۳-۱۰-۳-۳
۵۰..... طیف جرمی ۴-۱۰-۳-۳
۵۰..... ترکیب ۸۲ ۱۱-۳-۳
۵۰..... طیف مادون قرمز ۱-۱۱-۳-۳
۵۰..... ¹ H NMR طیف ۲-۱۱-۳-۳
۵۰..... طیف ماوراء بنفش ۳-۱۱-۳-۳
۵۱..... طیف جرمی ۴-۱۱-۳-۳
۵۱..... ترکیب ۸۳ ۱۲-۳-۳
۵۱..... طیف مادون قرمز ۱-۱۲-۳-۳
۵۱..... ¹ H NMR طیف ۲-۱۲-۳-۳
۵۲..... طیف ماوراء بنفش ۳-۱۲-۳-۳
۵۲..... طیف جرمی ۴-۱۲-۳-۳
۵۲..... ترکیب ۸۴ ۱۳-۳-۳
۵۲..... طیف مادون قرمز ۱-۱۳-۳-۳
۵۲..... ¹ H NMR طیف ۲-۱۳-۳-۳
۵۳..... طیف ماوراء بنفش ۳-۱۳-۳-۳
۵۳..... طیف جرمی ۴-۱۳-۳-۳
۵۳..... ترکیب ۸۵ ۱۴-۳-۳
۵۳..... طیف مادون قرمز ۱-۱۴-۳-۳

۵۴.....	طیف $^1\text{H NMR}$ ۲-۱۴-۳-۳
۵۴.....	طیف ماوراء بنفش ۳-۱۴-۳-۳
۵۴.....	طیف جرمی ۴-۱۴-۳-۳
۵۴.....	ترکیب ۱۵-۳-۳ ۸۸
۵۴.....	طیف مادون قرمز ۱-۱۵-۳-۳
۵۵.....	طیف $^1\text{H NMR}$ ۲-۱۵-۳-۳
۵۵.....	طیف ماوراء بنفش ۳-۱۵-۳-۳
۵۵.....	طیف جرمی ۴-۱۵-۳-۳
۵۶.....	۴-۳ مطالعات نظری (تئوری) بر روی ترکیبات سنتز شده
۵۶.....	۱-۴-۳ محاسبه‌ی انرژی حالت پایه
۵۷.....	۵-۳ مطالعات ساختاری رنگ‌ها
۷۰.....	مراجع
۷۲.....	پیوست ۱: شناسایی ترکیبات
۱۰۳.....	پیوست ۲: ساختار بهینه شده‌ی ترکیبات سنتز شده

فهرست جدول‌ها

عنوان	صفحه
جدول ۱-۱ تقسیم‌بندی شیمیایی رنگ‌ها.....	۲
جدول ۲-۱ تقسیم‌بندی رنگ‌ها بر اساس کاربرد.....	۴
جدول ۱-۳ رنگ‌های سنتز شده برپایه‌ی هیدروکسی تیوزانتون.....	۳۷
جدول ۲-۳ انرژي حالت پایه و ممان دوقطبی رنگ‌های سنتز شده برپایه‌ی ۲- هیدروکسی تیوزانتون.....	۵۶
جدول ۳-۳ انرژي حالت پایه رنگ‌های سنتز شده برپایه‌ی ۴- هیدروکسی- ۱-متیل تیوزانتون.....	۵۷
جدول ۴-۳ طول پیوند، زاویه‌ی پیوند، زاویه‌ی دووجهی رنگ‌های سنتز شده	۶۱
جدول ۵-۳ بار اتم‌ها در رنگ‌های سنتز شده.....	۶۵
جدول ۶-۳ مدهای ارتعاشی ترکیب ۳- (۳- هیدروکسی فنیل دی‌آزنیل)- ۲- هیدروکسی تیوزانتون.....	۶۷

فهرست شکل‌ها و شماها

عنوان	صفحه
شکل ۱-۱ طبقه‌های مختلف رنگ بر اساس ساختار شیمیایی.....	۳
شکل ۲-۱ دی‌آزوتی‌کردن بنزوفوران.....	۸
شکل ۳-۱ آزوپیرازولون‌ها، آزوپیریدون‌ها و آزواستوانیلیدین‌ها.....	۱۲
شکل ۴-۱ رنگ آمینوآزو و تانومر آن.....	۱۲
شکل ۵-۱ رنگ مونوآزو.....	۱۳
شکل ۶-۱ رنگ دی‌آزوی اولیه‌ی متقارن.....	۱۴
شکل ۷-۱ رنگ دی‌آزوی اولیه‌ی غیر متقارن.....	۱۴
شکل ۸-۱ رنگ دی‌آزوی ثانویه.....	۱۴
شکل ۹-۱ گروه‌های سدکننده.....	۱۵
شکل ۱۰-۱ گروه‌های سدکننده‌ی رایج.....	۱۵
شکل ۱۱-۱ رنگ دی‌آزوی متفرقه.....	۱۵
شکل ۱۲-۱ رنگ تری‌آزو.....	۱۶
شکل ۱۳-۱ رنگ تتراکیس‌آزو.....	۱۶
شکل ۱۴-۱ رنگ آزوی اسیدی.....	۱۷
شکل ۱۵-۱ رنگ آزوی بازی.....	۱۷
شکل ۱۶-۱ رنگ آزوی فعال.....	۱۸
شکل ۱۷-۱ واکنش رنگ فعال با فیبر.....	۱۸
شکل ۱۸-۱ رنگ آزوی پاشیده.....	۱۸
شکل ۱۹-۱ رنگ آزوی مستقیم.....	۱۹
شکل ۲۰-۱ کمپلکس رنگ آزو با مس.....	۱۹
شکل ۲۱-۱ کمپلکس رنگ آزو با کروم.....	۲۰
شکل ۲۲-۱ رنگ آنتراکینون.....	۲۰
شکل ۲۳-۱ رنگ آزوآنتراکینون.....	۲۱
شکل ۲۴-۱ تیوزانتون.....	۲۲
شکل ۲۵-۱ تیوزانتون‌های آغازگرنوری.....	۲۲
شکل ۱-۳ نحوه‌ی شماره‌گذاری رنگ‌ها.....	۶۱
شما ۱-۱ دی‌آزوتی‌کردن پیکرامیک اسید.....	۶
شما ۲-۱ واکنش دی‌آزوتی‌شدن.....	۶
شما ۳-۱ واکنش جفت شدن.....	۶
شما ۴-۱ مکانیسم واکنش دی‌آزوتی‌شدن.....	۷
شما ۵-۱ فرم‌های غیرموثر عامل دی‌آزوتی‌کننده در pH بالا.....	۸
شما ۶-۱ مکانیسم جفت شدن.....	۱۰

شمای ۷-۱ واکنش‌های رقابت کننده در جفت شدن.....	۱۰
شمای ۸-۱ تاتومری در رنگ‌های آزو.....	۱۱
شمای ۹-۱ تاتومری در رنگ‌های آمینوآزو.....	۱۲
شمای ۱۰-۱ تشکیل تاتومر آزونیوم.....	۱۳
شمای ۱۱-۱ واکنش جایگزینی هالوژن رنگ فعال.....	۱۷
شمای ۱۲-۱ واکنش افزایش در پیوند دوگانه‌ی رنگ فعال.....	۱۷
شمای ۱-۲ ترکیب ۳- (۳- هیدروکسی فنیل دی‌آزنیل)-۲- هیدروکسی تیوزانتون.....	۲۵
شمای ۲-۲ ترکیب ۳- (۴- نیترو فنیل دی‌آزنیل)-۲- هیدروکسی تیوزانتون.....	۲۶
شمای ۳-۲ ترکیب ۳- (۴- کلرو فنیل دی‌آزنیل)-۲- هیدروکسی تیوزانتون.....	۲۶
شمای ۴-۲ ترکیب ۳- (۳- برمو فنیل دی‌آزنیل)-۲- هیدروکسی تیوزانتون.....	۲۷
شمای ۵-۲ ترکیب ۳- (فنیل دی‌آزنیل)-۲- هیدروکسی تیوزانتون.....	۲۸
شمای ۶-۲ ترکیب ۳- (۴- متیل فنیل دی‌آزنیل)-۲- هیدروکسی تیوزانتون.....	۲۸
شمای ۷-۲ ترکیب ۳- (۴- متوکسی فنیل دی‌آزنیل)-۲- هیدروکسی تیوزانتون.....	۲۹
شمای ۸-۲ ترکیب ۳- (۴- متوکسی فنیل دی‌آزنیل)-۴- هیدروکسی -۱- متیل تیوزانتون.....	۲۹
شمای ۹-۲ ترکیب ۳- (۳- برمو فنیل دی‌آزنیل)-۴- هیدروکسی -۱- متیل تیوزانتون.....	۳۰
شمای ۱۰-۲ ترکیب ۳- (۴- کلرو فنیل دی‌آزنیل)-۴- هیدروکسی -۱- متیل تیوزانتون.....	۳۱
شمای ۱۱-۲ ترکیب ۳- (فنیل دی‌آزنیل)-۴- هیدروکسی -۱- متیل تیوزانتون.....	۳۱
شمای ۱۲-۲ ترکیب ۳- (۴- متیل فنیل دی‌آزنیل)-۴- هیدروکسی -۱- متیل تیوزانتون.....	۳۲
شمای ۱۳-۲ ترکیب ۳- (۳- هیدروکسی فنیل دی‌آزنیل)-۴- هیدروکسی -۱- متیل تیوزانتون.....	۳۲
شمای ۱۴-۲ ترکیب ۳- (۴- نیترو فنیل دی‌آزنیل)-۴- هیدروکسی -۱- متیل تیوزانتون.....	۳۳
شمای ۱۵-۲ ترکیب ۳- (۶- متیل بنزوتیازیل-۲- دی‌آزنیل)-۲- هیدروکسی تیوزانتون.....	۳۴
شمای ۱-۳ مکانیسم دی‌آزوته شدن.....	۳۶
شمای ۲-۳ مکانیسم جفت شدن هیدروکسی تیوزانتون در فرایند تشکیل رنگ آزو.....	۳۷
شمای ۳-۳ جزء به جزء شدن ترکیب ۵۹.....	۴۰
شمای ۴-۳ جزء به جزء شدن ترکیب ۶۲.....	۴۱
شمای ۵-۳ جزء به جزء شدن ترکیب ۶۸.....	۴۳
شمای ۶-۳ جزء به جزء شدن ترکیب ۷۱.....	۴۴
شمای ۷-۳ جزء به جزء شدن ترکیب ۷۴.....	۴۶
شمای ۸-۳ جزء به جزء شدن ترکیب ۷۷.....	۴۷
شمای ۹-۳ جزء به جزء شدن ترکیب ۷۹.....	۴۸
شمای ۱۰-۳ جزء به جزء شدن ترکیب ۸۰.....	۴۹
شمای ۱۱-۳ جزء به جزء شدن ترکیب ۸۲.....	۵۱
شمای ۱۲-۳ جزء به جزء شدن ترکیب ۸۳.....	۵۲
شمای ۱۳-۳ جزء به جزء شدن ترکیب ۸۴.....	۵۳
شمای ۱۴-۳ جزء به جزء شدن ترکیب ۸۵.....	۵۴
شمای ۱۵-۳ جزء به جزء شدن ترکیب ۸۸.....	۵۵
شمای ۱۶-۳ جزء به جزء شدن ترکیب ۸۸.....	۵۵
شمای ۱۷-۳ تاتومری در رنگ‌های برپایه‌ی ۲- هیدروکسی تیوزانتون.....	۵۶
شمای ۱۸-۳ تاتومری در رنگ ۸۸.....	۵۷

فهرست پیوست‌ها

عنوان	صفحه
شکل ۱-۱ طیف IR ترکیب ۵۹.....	۷۲
شکل ۱-۱ طیف UV ترکیب ۵۹.....	۷۲
شکل ۱-۲ طیف ¹ H NMR ترکیب ۵۹.....	۷۳
شکل ۱-۳ طیف جرمی ترکیب ۵۹.....	۷۳
شکل ۱-۴ طیف IR ترکیب ۶۲.....	۷۴
شکل ۱-۵ طیف UV ترکیب ۶۲.....	۷۴
شکل ۱-۶ طیف ¹ H NMR ترکیب ۶۲.....	۷۵
شکل ۱-۷ طیف جرمی ترکیب ۶۲.....	۷۵
شکل ۱-۸ طیف IR ترکیب ۶۵.....	۷۶
شکل ۱-۹ طیف UV ترکیب ۶۵.....	۷۶
شکل ۱-۱۰ طیف ¹ H NMR ترکیب ۶۵.....	۷۷
شکل ۱-۱۱ طیف جرمی ترکیب ۶۵.....	۷۷
شکل ۱-۱۲ طیف IR ترکیب ۶۸.....	۷۸
شکل ۱-۱۳ طیف UV ترکیب ۶۸.....	۷۸
شکل ۱-۱۴ طیف ¹ H NMR ترکیب ۶۸.....	۷۹
شکل ۱-۱۵ طیف جرمی ترکیب ۶۸.....	۷۹
شکل ۱-۱۶ طیف IR ترکیب ۷۱.....	۸۰
شکل ۱-۱۷ طیف ¹ H NMR ترکیب ۷۱.....	۸۰
شکل ۱-۱۸ طیف UV ترکیب ۷۱.....	۸۱
شکل ۱-۱۹ طیف جرمی ترکیب ۷۱.....	۸۱
شکل ۱-۲۰ طیف IR ترکیب ۷۴.....	۸۲
شکل ۱-۲۱ طیف UV ترکیب ۷۴.....	۸۲
شکل ۱-۲۲ طیف ¹ H NMR ترکیب ۷۴.....	۸۳
شکل ۱-۲۳ طیف ¹³ C NMR ترکیب ۷۴.....	۸۳
شکل ۱-۲۴ طیف جرمی ترکیب ۷۴.....	۸۴
شکل ۱-۲۵ طیف IR ترکیب ۷۷.....	۸۵
شکل ۱-۲۶ طیف ¹ H NMR ترکیب ۷۷.....	۸۵
شکل ۱-۲۷ طیف UV ترکیب ۷۷.....	۸۶
شکل ۱-۲۸ طیف جرمی ترکیب ۷۷.....	۸۶
شکل ۱-۲۹ طیف IR ترکیب ۷۹.....	۸۷
شکل ۱-۳۱ طیف ¹ H NMR ترکیب ۷۹.....	۸۷
شکل ۱-۳۰ طیف UV ترکیب ۷۹.....	۸۸

۸۸.....	شکل ۱- ۳۱ طیف جرمی ترکیب ۷۹.....
۸۹.....	شکل ۱- ۳۲ طیف IR ترکیب ۸۰.....
۸۹.....	شکل ۱- ۳۳ طیف UV ترکیب ۸۰.....
۹۰.....	شکل ۱- ۳۴ طیف ¹ H NMR ترکیب ۸۰.....
۹۰.....	شکل ۱- ۳۵ طیف جرمی ترکیب ۸۰.....
۹۱.....	شکل ۱- ۳۶ طیف IR ترکیب ۸۱.....
۹۱.....	شکل ۱- ۳۷ طیف UV ترکیب ۸۱.....
۹۲.....	شکل ۱- ۳۸ طیف ¹ H NMR ترکیب ۸۱.....
۹۲.....	شکل ۱- ۳۹ طیف جرمی ترکیب ۸۱.....
۹۳.....	شکل ۱- ۴۲ طیف IR ترکیب ۸۲.....
۹۳.....	شکل ۱- ۴۰ طیف ¹ H NMR ترکیب ۸۲.....
۹۴.....	شکل ۱- ۴۱ طیف UV ترکیب ۸۲.....
۹۴.....	شکل ۱- ۴۲ طیف جرمی ترکیب ۸۲.....
۹۵.....	شکل ۱- ۴۳ طیف IR ترکیب ۸۳.....
۹۵.....	شکل ۱- ۴۴ طیف ¹ H NMR ترکیب ۸۳.....
۹۶.....	شکل ۱- ۴۵ طیف UV ترکیب ۸۳.....
۹۶.....	شکل ۱- ۴۶ طیف جرمی ترکیب ۸۳.....
۹۷.....	شکل ۱- ۴۷ طیف IR ترکیب ۸۴.....
۹۷.....	شکل ۱- ۴۸ طیف ¹ H NMR ترکیب ۸۴.....
۹۸.....	شکل ۱- ۴۹ طیف UV ترکیب ۸۴.....
۹۸.....	شکل ۱- ۵۰ طیف جرمی ترکیب ۸۴.....
۹۹.....	شکل ۱- ۵۱ طیف IR ترکیب ۸۵.....
۹۹.....	شکل ۱- ۵۲ طیف UV ترکیب ۸۵.....
۱۰۰.....	شکل ۱- ۵۳ طیف ¹ H NMR ترکیب ۸۵.....
۱۰۰.....	شکل ۱- ۵۴ طیف جرمی ترکیب ۸۵.....
۱۰۱.....	شکل ۱- ۵۵ طیف IR ترکیب ۸۸.....
۱۰۱.....	شکل ۱- ۵۶ طیف ¹ H NMR ترکیب ۸۸.....
۱۰۲.....	شکل ۱- ۵۷ طیف UV ترکیب ۸۸.....
۱۰۲.....	شکل ۱- ۵۸ طیف جرمی ترکیب ۸۸.....
۱۰۳.....	شکل ۱-۲ ساختار بهینه شدهی ترکیب ۵۹.....
۱۰۳.....	شکل ۲-۲ ساختار بهینه شدهی ترکیب ۶۲.....
۱۰۳.....	شکل ۳-۲ ساختار بهینه شدهی ترکیب ۶۵.....
۱۰۴.....	شکل ۴-۲ ساختار بهینه شدهی ترکیب ۶۸.....
۱۰۴.....	شکل ۱-۲ ساختار بهینه شدهی ترکیب ۷۱.....
۱۰۴.....	شکل ۲- ۲ ساختار بهینه شدهی ترکیب ۷۴.....
۱۰۵.....	شکل ۳- ۲ ساختار بهینه شدهی ترکیب ۷۷.....
۱۰۵.....	شکل ۴- ۲ ساختار بهینه شدهی ترکیب ۷۹.....
۱۰۵.....	شکل ۵- ۲ ساختار بهینه شدهی ترکیب ۸۰.....
۱۰۶.....	شکل ۶- ۲ ساختار بهینه شدهی ترکیب ۸۱.....
۱۰۶.....	شکل ۷- ۲ ساختار بهینه شدهی ترکیب ۸۲.....
۱۰۶.....	شکل ۸- ۲ ساختار بهینه شدهی ترکیب ۸۳.....

شکل ۲-۹ ساختار بهینه شده‌ی ترکیب ۸۴.....	۱۰۷
شکل ۲-۱۰ ساختار بهینه شده‌ی ترکیب ۸۵.....	۱۰۷
شکل ۲-۱۵ ساختار بهینه شده‌ی ترکیب ۸۸.....	۱۰۷

فصل اول

مقدمه

۱-۱ رنگ

رنگ نقش مهمی را در زندگی روزمره ما بازی می‌کند و روی حالات و احساسات ما تأثیر می‌گذارد و عموماً روشی که ما می‌توانیم از محیط خود لذت ببریم را بهبود می‌دهد. رنگ‌های طبیعی در اطراف ما وجود دارند. تا نیمه‌های قرن ۱۹، قبل از اینکه ویلیام هنری پرکین^۱ اولین رنگ سنتزی را کشف کند، همه‌ی رنگ‌ها از منابع گیاهی به‌دست می‌آمدند. کشف پرکین تحول بزرگی در صنعت رنگ ایجاد کرد و تا چند دهه بعد، رنگ‌های جدیدی کشف شدند. امروزه رنگ‌های سنتزی در لباس‌هایی که ما می‌پوشیم، اشیای پلاستیکی، مجلات و روزنامه، عکاسی، مواد آرایشی، تلویزیون و ... به‌کار برده می‌شوند [۱ و ۲].

از لحاظ ساختار شیمیایی رنگ‌ها ممکن است ترکیبات آلی یا معدنی باشند. هر دو گروه رنگ می‌توانند به دو گروه طبیعی و سنتزی تقسیم شوند. از آنجایی که امروزه بسیاری از رنگ‌دانه‌های طبیعی به‌طور سنتزی تولید می‌شوند، این تقسیم‌بندی همیشه با معنی نیست.

براساس معیار مهم‌تری رنگ‌ها به دو دسته‌ی رنگینه^۲ و رنگدانه^۳ تقسیم می‌شوند. رنگدانه‌ها شامل ذرات کوچکی هستند که عملاً در محیطی که بکار برده می‌شوند، نامحلول‌اند. به عبارت دیگر رنگدانه‌ها به سوبسترا توسط ترکیبات افزایشی (برای مثال نمک‌ها) متصل می‌شوند. در مقابل، رنگینه‌ها در آب محلول‌اند و تمایل ویژه‌ای برای اتصال به سوبسترا دارند [۳].

۱-۱-۱ تقسیم‌بندی رنگ‌ها

رنگ‌ها ممکن است براساس ساختار شیمیایی یا روش کاربرد آن‌ها تقسیم‌بندی شوند.

¹William Henry Perkin

²Dye

³Pigment

۱-۱-۱-۱ تقسیم‌بندی شیمیایی

در این روش رنگ‌ها مطابق با طرح ساختار شیمیایی مخصوص دسته‌بندی می‌شوند. مهم‌ترین رنگ‌های آلی متعلق به آزوها، کربونیل (شامل آنتراکینون)، فتالوسیانین، یون آریل کربانیوم (شامل تری فنیل متان، سولفور، متین و متین و گروه عاملی نیترو می باشند [۱]. جمع‌بندی خواص دسته‌های شیمیایی اصلی رنگ‌ها در جدول ۱-۱ آمده است.

جدول ۱-۱ تقسیم‌بندی شیمیایی رنگ‌ها

دسته‌ی شیمیایی	طرح ساختاری مشخص	رنگ	طبقه‌ی کاربرد اصلی
آزو	$— N = N —$	همه‌ی رنگ‌ها، بیشتر زرد تا قرمز	استفاده از این رنگ‌ها اکثراً غالب است.
کربونیل	$C = O$	همه‌ی رنگ‌ها، اما آبی مهم‌تر است.	مهم در اکثر کاربردها
فتالوسیانین	کمپلکس‌های فلزی با حلقه‌ی هتروسیکل ۱۶ عضوی	فقط سبز و آبی	دارای بیشترین اهمیت به عنوان پیگمنت
تری آریل کربونیوم یون	اتم کربن دارای بار مثبت	همه‌ی رنگ‌ها، بیشتر قرمز و آبی	رنگ‌های کاتیونی و پیگمنت‌ها
رنگ‌های سولفور	گونه‌های پلیمری شامل گوگرد	اغلب رنگ‌های تیره مثل سیاه و قهوه‌ای	رنگ‌های سولفور
رنگ‌های متین	$— CH =$	همه‌ی رنگ‌ها اما زرد اهمیت بیشتری دارد.	کاتیونی و رنگ‌های پاشیده ^۱
نیترو	NO_2	اساساً زرد	رنگ مو

شکل ۱-۱ نشان‌دهنده‌ی مثال‌هایی از طبقه‌های مختلف رنگ بر اساس ساختار شیمیایی می‌باشد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، شماره‌ی ۱ تا ۶ به ترتیب رنگ‌هایی با ساختار شیمیایی آزو، کربونیل، تری آریل کربونیوم یون، فتالوسیانین، متین و نیترو را نشان می‌دهد.

^۱Disperse