

# ПРОЦЕССЫ И АППАРАТЫ ХИМИЧЕСКИХ И ДРУГИХ ТЕХНОЛОГИЙ

---

УДК 667-12:543.421/.424

*Д. П. Ростова, Н. С. Бакунин\**

## ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСЕЙ НА КОЛОРИСТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЛАКА КРАСНОГО ЖБ

Качество готового продукта – главное в производстве. Оно зависит от технологических параметров и качества сырья.

При анализе пигментов на качество рассматривают такие характеристики как: тон, колористическую концентрацию, грансостав и т.д.

Примеси могут существенно влиять на качество готового пигмента, и определить их наличие и концентрацию не всегда является тривиальной задачей.

В данной работе будет рассмотрено влияние примесей в сырье и побочных продуктов синтеза на тон лака красного ЖБ.

Для описания колористических характеристик существует несколько цветовых пространств:

- CIE XYZ
- RGB
- HSI
- CIE L\*a\*b
- CIE L\*c\*h

Более удобными для человеческого восприятия и анализа являются модели, которые построены не на цветах, а на других характеристиках излучения, как например цветовой тон, насыщенность и светлота. Мы остановимся на CIE L\*c\*h.

Характеристики модели CIE L\*c\*h будем рассчитывать методами молекулярного моделирования на уровне теории TDDFT/PBE0/cc-pVTZ через энергии электронных переходов [1.].

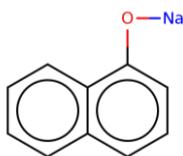
На основании химизма процесса и паспортов на сырье были определены все возможные примеси в лаке красном ЖБ [1.]. Те примеси, что не влияют на цвет продукта не учитывались, остальные представлены в табл. 1.

---

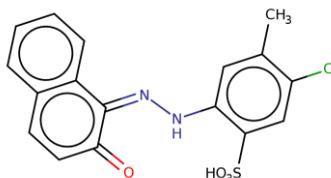
\* Работа выполнена под руководством канд. техн. наук, доцента ФГБОУ ВО «ТГТУ» А. А. Дегтярева.

## 1. Примеси в конечном продукте

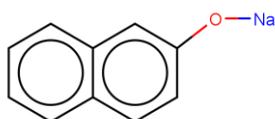
$\alpha$ -нафталят натрия



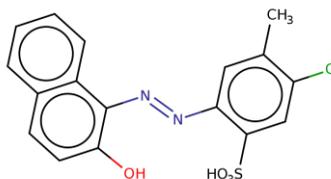
5-хлор-2-[(2-гидрокси-1-нафтил)азо]-4-метилбензолсульфоикслота



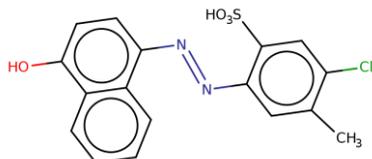
$\beta$ -нафталят натрия



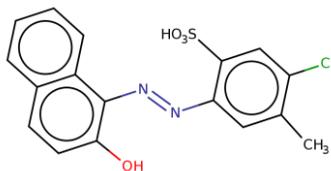
5-хлор-2-[(2-гидрокси-1-нафтил)азо]-4-метилбензолсульфоикслота (конформер 1)

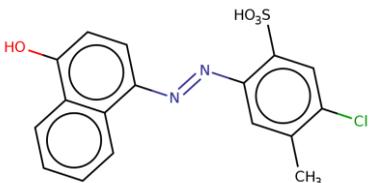
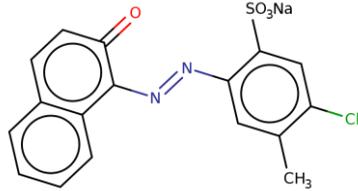
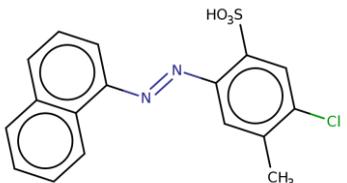
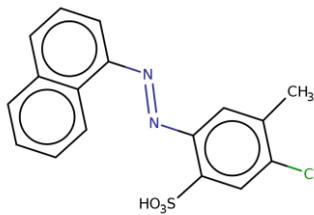


5-хлор-2-[(4-гидрокси-1-нафтил)азо]-4-метилбензолсульфоикслота (конформер 1)



5-хлор-2-[(2-гидрокси-1-нафтил)азо]-4-метилбензолсульфоикслота (конформер 2)



<p>5-хлор-2-[(4-гидрокси-1-нафтил)азо]-4-метилбензолсульфокислота (конформер 2)</p> 	<p>5-хлор-2-[(2-окси-1,2-дигидро-нафтален)-1-гидразо]-4-метилбензолсульфонат натрия</p> 
<p>5-хлор-2-нафтилазо-4-метилбензолсульфокислота (конформер 1)</p> 	<p>5-хлор-2-нафтилазо-4-метилбензолсульфокислота (конформер 2)</p> 

С помощью программного обеспечения рассчитываем сначала координаты модели RGB, а далее переводим их в значения для Lch.

В таблице 2 представлены значения параметров Lch для каждого соединения.

## 2. Параметры Lch

Соединение	L	C	H
$\alpha$ -нафталят натрия	99,98	0,23	121,07
$\beta$ -нафталят натрия	99,87	0,56	186,95
5-хлор-2-[(2-гидрокси-1-нафтил)азо]-4-метилбензолсульфокислота	96,54	96,99	104,81
5-хлор-2-[(2-окси-1,2-дигидро-нафтален)-1-гидразо]-4-метилбензолсульфонат натрия	96,13	95,78	101,86

5-хлор-2-[(2-гидрокси-1-нафтил)азо]-4-метилбензолсульфокислота (конформер 1)	89,74	83,28	94,65
5-хлор-2-[(2-гидрокси-1-нафтил)азо]-4-метилбензолсульфокислота (конформер 2)	66,80	85,71	59,53
5-хлор-2-[(4-гидрокси-1-нафтил)азо]-4-метилбензолсульфокислота (конформер 1)	90,89	66,59	95,32
5-хлор-2-[(4-гидрокси-1-нафтил)азо]-4-метилбензолсульфокислота (конформер 2)	96,90	96,92	103,62
5-хлор-2-нафтилазо-4-метилбензолсульфокислота (конформер 1)	94,79	94,35	100,51
5-хлор-2-нафтилазо-4-метилбензолсульфокислота (конформер 2)	90,93	76,15	95,93

Анализировать результаты будем по тону. Будет прослеживаться зависимость: при увеличении значения координаты Н цвет смещается в желтую область спектра, при уменьшении – смещается в пурпурную область.

Для всех соединений, интенсивность цвета (параметр С) которых значительно выше 0, параметр Н относится к желтой или желто-зеленой области спектра.

Для исходного лака красного ЖБ параметр Н равен 34. На основании этого можно сказать, что при наличии данных примесей в концентрациях отличных от следовых, будет наблюдаться смещение исходного тона в желтую область.

### Список литературы

1. Химия синтетических красителей. Т. 3 / под ред. К. Венкатарамана. – Л. : Химия, 1974. – 464 с.
2. Лаптев, Н. Г. Химия красителей / Н. Г. Лаптев, Б. М. Богословский. – М. : Химия, 1970. – 424 с.