

活性染料分子结构与染色性能的构效关系及合成工艺改进

祝超

湖北丽源科技股份有限公司 湖北 荆州 434000

【摘要】：为优化活性染料在纤维素纤维染色中的应用效果，本文系统研究活性染料分子结构与染色性能的构效关系，结合浸染、连续染色及散纤维阳离子改性染色等实际应用工艺，提出染料合成工艺的改进方向。研究表明，磺酸基等水溶性基团的数量与位置直接影响染料溶解性与分散性，双活性基团的合理组合可提升固色率与染色稳定性，而阳离子改性技术能有效降低染色盐耗与废水排放。通过分子结构优化与合成工艺革新，可实现活性染料染色的高效化、绿色化，为棉、麻等纤维素纤维印染产业的高质量发展提供技术支撑。

【关键词】：活性染料；分子结构；构效关系；合成工艺；染色性能；合成工艺

DOI:10.12417/2705-0998.26.02.078

活性染料因分子中含可与纤维素纤维羟基形成共价键的活性基团，具有色泽鲜艳、色谱齐全、湿牢度优良等特点，已成为棉、麻等纤维素纤维染色的主流染料品种。其染色工艺主要包括浸染、连续染色及散纤维阳离子改性染色等，在纺织印染行业中应用广泛，但传统工艺仍面临高盐耗、高废水排放、色花风险等问题。染料分子结构是决定染色性能的核心因素，水溶性基团、发色母体、桥连基团及活性基团的结构差异，会直接影响染料的溶解性、上染率、固色率及匀染性等关键指标。随着环保要求的不断提高与产业升级需求，通过解析构效关系、优化合成工艺以提升染色性能、降低环境负荷，已成为活性染料领域的研究热点。本文基于实际生产工艺需求，深入探讨分子结构与染色性能的内在关联，提出针对性的合成工艺改进方案，为活性染料的技术创新与产业应用提供参考。

1 活性染料分子结构与染色性能的构效关系

活性染料的化学结构通式为 W-D-B-R，即水溶性基团 W、发色母体 D、桥连基团 B、活性基团 R，各结构单元的特性及组合方式共同决定染色性能。

1.1 水溶性基团与染色性能的关联

水溶性基团是保障染料在染液中均匀分散的关键，主要包括磺酸基、羧酸基等，其中磺酸基应用最为广泛。磺酸基的数量直接影响染料溶解度，每分子染料含 2-3 个磺酸基时，可在水中形成稳定的阴离子分散体系，避免染料聚集导致的色花问题；若磺酸基数量不足，染料易沉淀，降低上染均匀性，而过多磺酸基会增强染料亲水性，降低与纤维素纤维的亲合力，造成上染率下降^[1]。此外，磺酸基的位置也会影响染料与纤维素纤维的亲合力，当磺酸基远离活性基团时，可减少染料-纤维键合反应的空间阻碍，提升上染率与固色率，而靠近活性基团的磺酸基会因空间位阻效应抑制亲核反应的发生，导致固色率降低 10%-15%^[2]。羧酸基虽亲水性弱于磺酸基，但能通过氢键增强染料与纤维的结合力，在低碱染色体系中可改善色牢度，同时羧酸基改性的活性染料在阳离子改性棉纤维染色中表现

出更优的吸附性能，能有效提升上染速率^[3]。在实际生产中，可通过控制磺化反应的温度、酸浓度及反应时间，精准调控磺酸基的数量与取代位置，满足连续染色工艺对染液稳定性的要求。

1.2 发色母体对染色性能的影响

发色母体决定染料的色泽、耐晒牢度及摩尔吸光系数，常见类型包括偶氮、蒽醌、酞菁结构。偶氮类母体合成工艺简单、成本较低，单偶氮结构染料颜色鲜艳、上染速率快，适用于中浅色色织产品，但耐晒牢度较差，通常仅能达到 3-4 级；通过引入硝基、磺酸基等取代基或采用双偶氮结构，可增强共轭体系稳定性，提升耐光性能至 4-5 级^[4]。蒽醌类母体具有优异的耐晒牢度与色泽稳定性，其大环共轭结构使染料在光照下不易降解，适合高端户外纺织品染色，但合成工艺复杂、成本较高，且染料溶解度较低，需搭配专用分散剂使用。酞菁类母体主要呈现鲜艳的蓝绿色调， π 电子共轭体系稳定，耐光、耐热性能突出，耐晒牢度可达 5 级以上，但溶解性较差，需通过引入磺酸基等水溶性基团改善染色分散性，同时酞菁类活性染料的摩尔吸光系数较高，在低用量下即可获得深浓色泽，能有效降低染料使用成本与废水色度^[5]。不同发色母体的染料需匹配对应的染色工艺，偶氮类染料适合低温浸染工艺，在棉纤维浸染中，上染率可达 75%-80%，而蒽醌与酞菁类染料则更适用于高温连续染色工艺，在 100-120℃ 的热风拉幅染色中，固色率可维持在 80% 以上，充分发挥其结构优势。

1.3 桥连基团的调控作用

桥连基团连接发色母体与活性基团，其结构柔性及电子效应直接影响染料反应活性。柔性桥连基团如亚氨基、甲亚胺基可使染料分子具有更好的空间灵活性，便于活性基团与纤维羟基接触，提升反应速率，采用柔性桥连基团的活性染料，其固色反应速率可提升 20%-30%^[6]；刚性桥连基团则会限制分子构象变化，降低反应活性，但能增强染料-纤维键的稳定性，使染色织物的湿摩擦牢度提升 0.5-1 级。电子效应方面，吸电子性

桥连基团如芳香基可降低活性基团电子云密度,增强其亲电性,促进与纤维羟基的亲核反应,提高固色率,而供电子性桥连基团则会抑制反应活性,需通过调整染色温度与碱度补偿,通常需将染色温度提高5-10℃,碱剂用量增加15%-20%^[7]。桥连基团的选择需结合活性基团类型,一氯均三嗪型活性基团搭配柔性吸电子桥连基团,可兼具高反应活性与高固色率,在棉纤维连续染色中,固色率可达85%以上;乙烯砜基活性基团搭配刚性桥连基团,能提升染料的耐碱稳定性,适用于高碱浓度的连续染色工艺,在碱剂浓度为20-30g/L的染液中,染料水解率可控制在10%以内。

1.4 活性基团的选择与染色性能

活性基团是染料与纤维形成共价键的核心,常见类型包括一氯均三嗪、乙烯砜基、二氟一氯嘧啶等,双活性基团组合已成为提升染色性能的重要方向。其中一氟均三嗪型活性基团反应活性高,但易水解,需严格控制pH值与温度,通常染色pH值控制在10-11,温度控制在40-50℃,低温条件下即可与纤维素纤维羟基发生亲核取代反应;若参数控制不当,水解率会超过20%,导致染色牢度下降;乙烯砜基活性基团匀染性好、耐碱性强,在连续染色工艺中表现稳定,其染色温度范围较宽,可在50-80℃内调整,适合大规模工业化生产。将两种活性基团如一氟氯均三嗪与乙烯砜基引入同一分子,可兼具两者优势,使固色率提升至85%以上,同时改善染色适应性,适用于浸染与连续染色等不同工艺场景。含磺酰胺基取代的双活性基团染料,其反应活性与键合稳定性更优,能有效降低色光偏差,色光重现性可达95%以上,满足纺织品对色精度的要求。此外,三活性基团的活性染料也逐渐成为研究热点,其固色率可进一步提升至90%以上,但合成工艺更为复杂,需平衡多活性基团的反应活性,避免过度水解,在棉纤维阳离子改性染色中,三活性基团染料的无盐上染率可达85%,显著优于传统双活性基团染料。

2 活性染料合成工艺改进

基于构效关系研究,结合浸染、连续染色及棉纤维阳离子改性染色等实际工艺需求,从绿色化、高效化角度提出合成工艺改进方向。

2.1 分子结构定向设计

针对传统染料固色率低、污染大的问题,优化活性基团组合方式,优先采用双活性基团或多活性基团结构,通过调整桥连基团的电子效应与空间结构,平衡反应活性与水解稳定性。在水溶性基团修饰方面,采用精准磺化技术,控制磺酸基的数量与取代位置,确保染料溶解度的同时提升与纤维的亲合力,减少染色过程中电解质的添加量,采用该技术的染料可将盐耗降低30%-40%。对于酞菁类等难溶性染料,通过引入柔性链段或复合水溶性基团,改善其分散性能,扩大在连续染色工艺中

的应用范围,改性后的酞菁染料分散稳定性提升,在高温染液中放置24小时无沉淀生成。此外,针对阳离子改性棉纤维染色需求,设计含季铵盐基团的活性染料,增强染料与阳离子化纤维的静电吸附作用,实现低盐染色,该类染料在无盐条件下的上染率可达80%以上,远高于传统活性染料的50%-60%。分子结构定向设计需结合计算机辅助模拟技术,通过分子动力学模拟预测染料分子与纤维的相互作用,例如采用Gaussian软件模拟磺酸基位置对染料吸附能的影响,可缩短研发周期30%-40%,降低研发成本。

2.2 绿色合成工艺开发

替代传统重氮偶合路线中的高盐反应体系,采用微通道连续流反应技术,通过精准控制反应温度、压力与物料配比,提升反应选择性与转化率,使无机盐用量下降80%以上,高盐废水排放量减少35-45吨/吨产品。该技术的优势在于反应传热效率高,可实现连续化生产,避免间歇反应中的批次差异,产品纯度提升至98%以上,在偶氮型活性染料合成中,重氮盐生成速率提升50%,偶合反应转化率可达99%。引入酶催化偶联技术,在温和条件下实现发色母体与活性基团的连接,降低反应能耗与副产物生成,使COD排放浓度控制在8000mg/L以内,酶催化反应的温度通常为30-40℃,远低于传统化学催化的60-80℃,可节约能耗40%-50%。采用膜分离与MVR蒸发技术回收反应体系中的溶剂与盐类,实现废水回用率95%以上,构建闭环生产模式,膜分离技术可有效截留染料分子,回收率达99%以上,MVR蒸发技术则可回收废水中的无机盐,用于染色工艺的电解质补充,实现资源循环利用。此外,采用超临界CO₂流体合成技术,可避免有机溶剂的使用,进一步降低环境污染,该技术在活性染料合成中的应用已取得阶段性成果,产品纯度与性能均达到传统工艺水平,且无有机废水排放。

2.3 工艺参数优化与质量控制

针对不同染色工艺需求定制染料合成参数,用于浸染工艺的染料需优化反应条件以提升匀染性,控制染料颗粒粒径均匀性,粒径分布系数需控制在0.2以下,避免因颗粒大小不均导致的色花问题;连续染色用染料则需增强耐温稳定性与扩散性,避免高温染色时的水解失效,通常需在合成过程中引入耐热基团,提升染料的热稳定性。在棉纤维阳离子改性染色体系中,开发适配性染料,通过调整活性基团反应活性,使染料与阳离子化纤维的结合效率提升,实现低盐甚至无盐染色,降低废水TDS负荷,适配性染料与阳离子改性棉纤维的结合常数比传统染料高2-3倍,吸附速率更快。引入数字化监控系统,对合成过程中的温度、pH值、反应时间等参数进行实时监测,将产品批次色差 ΔE 值控制在1.0以内,提升染色质量稳定性,数字化监控系统可实现参数偏差的实时预警,确保生产过程的稳定性与一致性。同时,建立染料性能预测模型,通过合成参

数预测染料的上染率、固色率等关键指标,实现产品的精准定制,满足不同客户的染色需求。在实际应用中,优化后的合成工艺已在多家印染企业推广,浸染工艺的染料利用率提升至85%,连续染色工艺的生产效率提高20%,阳离子改性染色工艺的盐耗降低60%,废水处理成本下降30%,取得了显著的经济与环境效益。

3 结论

活性染料的分子结构与染色性能存在显著构效关系,水溶

性基团的数量与位置决定染料溶解性与分散性,发色母体结构主导色泽与耐晒牢度,桥连基团调控反应活性,活性基团类型直接影响固色率与键合稳定性。结合浸染、连续染色及棉纤维阳离子改性染色等实际工艺,通过分子结构定向设计、绿色合成技术应用及工艺参数数字化控制,可实现活性染料上染率、固色率的显著提升,同时降低盐耗与废水排放。未来研究应进一步强化AI辅助分子设计与高通量筛选技术的应用,开发更多适配绿色染色工艺的新型活性染料,推动纤维素纤维印染产业的可持续发展。

参考文献:

- [1] 王雪燕,李丽,张健.纤维素纤维活性染色色花防控全流程优化[J].印染助剂,2024,41(8):32-37.
- [2] 陈志强,刘敏,黄伟.双活性基团活性染料的合成及染色性能研究[J].染料与染色,2023,60(5):1-6+11.
- [3] 林建国,赵娟,吴涛.活性染料染色工艺优化及节能减排效果[J].纺织学报,2025,46(2):89-95.
- [4] 南通纺织职业技术学院染化系.活性染料化学结构与染色工艺[J].纺织教育,2022,37(3):56-61.
- [5] 赵小明,孙莉,周强.活性染料固色机理及稳色剂应用研究[J].印染,2023,49(12):28-33.
- [6] 中国染料工业协会.活性染料绿色制造技术发展报告[J].中国染料,2024,58(4):1-8+15.
- [7] 李敏,王浩,张宇.棉纤维阳离子改性及无盐活性染色技术研究[J].棉纺织技术,2023,51(7):45-50.