

VYSOKÁ ŠKOLA STROJNÍ A TEXTILNÍ V LIBERCI

NOSITELKA RÁDU PRÁCE

Fakulta textilní

Obor 31 - 12 - 8

TECHNOLOGIE TEXTILU A ODEVNICTVÍ

Zaměření

Ne - Zu

Návrh optimálního časově - teplotního režimu
při barvení bavlněné tkaniny vybranými
substantivními barvivy.

Kopecký Jiří

NeZu č. 77

Vedoucí práce : Ing. Hana Schejbalová,
Konzultant : Mř. prof. Ing. Dr. J. Kais, CSc

55

Bočet stran:

ZADÁNÍ DIPLOMOVÉ PRÁCE

(PROJEKTU, UMĚLECKÉHO DÍLA, UMĚLECKÉHO VÝKONU)

pro Ing. s. Jiřího Kopeckého

obor 31-12-8 Technologie textilu a oděvnictví

Vedoucí katedry Vám ve smyslu nařízení vlády ČSSR č. 90/1980 Sb., o státních závěrečných zkouškách a státních rigorózních zkouškách, určuje tuto diplomovou práci:

Název tématu: Návrh optimálního časově-teplotního režimu
při barvení bavlněné tkaniny vybranými
substantivními barvivy.

Zásady pro vypracování:

- 1) Vypracujte přehled nejnovějších poznatků k danému tématu.
- 2) Vyhodnoťte neizotermní kinetiku barvení bavlněné tkaniny vybranými substantivními barvivy.
- 3) Na základě výsledků kvantitativního popisu soustavy substantivní barvivo/bavlna navrhnete optimální časový režim pro dosažení egálního vybarvení.

V 102/84 T

Pozn.: Všechny údaje v diplomové práci musí odpovídat mezinárodní soustavě SI podle ČSN 011300.

Autorské právo se řídí směrnicemi MŠK pro státní záv. zkoušky č. j. 31 727/62-lil/2 ze dne 13. července 1962-Věstník MŠK XVIII, sešit 24 ze dne 31. 8. 1962 § 19 aut. z. č. 115/53 Sb.

VYSOKÁ ŠKOLA STROJNÁ A TEXTILNÍ
Ústřední knihovna
LIBEREC 1, STUDENTSKÁ 5
PSČ 461 17

Rozsah grafických prací:

Rozsah průvodní zprávy: 30 - 40 str.

Seznam odborné literatury:

- 1) Hladík, V.: Základy teorie barvení, SNTL-Alfa, Praha, Bratislava, 1968."
- 2) Rais, J. : Kinetika barvení vláken, zpráva o řešení DÚ IV-1-2/4-03, VŠST Liberec, 1978.
- 3) Časopisy : Textil, Chemický průmysl, Techn.text.prom., J.Soc.D.Col.

Vedoucí diplomové práce: Ing. Hana Schejbalová

Datum zadání diplomové práce: 30.9.1983

Termín odevzdání diplomové práce: 25.5.1984

VYSOKÁ ŠKOLA STROJNÍ A TEXTILNÍ
fakulta textilní
Hájkova 6
461 17 LIBEREC

J. Bořek
Vedoucí katedry

Lenka
Děkan

V Liberci dne 7.11. 1983.

Místopřísežně prohlašuji, že jsem diplomovou práci
vypracoval samostatně s použitím uvedené literatury.

V Liberci dne 25. května 1984

Kopec' Jirí

Jirí Kopec'ký

OBSAH

- I. Úvod
 - I.1 Seznam použitých symbolů
- II. Literární rešerše
 - II.1 Vlastnosti celulosových vláken
 - II.2 Barvení substantivními barvivy
 - II.2.1 Charakteristika substantivních barviv
 - II.2.2 Vliv teploty, elektrolytu a doby barvení na průběh barvicího procesu
 - II.2.3 Optimalizace barvicích procesů
- III. Základní údaje z kterých bylo vycházeno při pozdějších výpočtech
 - III.1 Použitý materiál
 - III.2 Použitá barviva a chemikálie
 - III.2.1 Barvení bavlny
 - III.2.2 Barvení viskozy
 - III.3 Vytahovací křivky
 - III.4 Casově teplotní režim barvení
 - III.5 Způsob získání experimentálních hounot
- IV. Vyhodnocení izotermní kinetiky
 - IV.1 Výpočet pravděpodobné rovnovážné koncentrace barviva ve vlákně
 - IV.2 Výpočet exponentu času a rychlostní konstanty z izotermní oblasti
 - IV.3 Ověření přesnosti zvoleného modelu
- V. Vyhodnocení neizotermní kinetiky
 - V.1 Výpočet $\ln K$ pro body v neizotermní oblasti

- V.2 Výpočet $\ln K$ a aktivační energie
- V.3 Výpočet poločasu barvení a relaxačního času
- V.4 Výpočet okamžitých rychlostí barvení
- V.5 Relativní obarvenost vlákna, relativní barvitelnost vlákna a statistický moment
- V.6 Zhodnocení izotermní a neizotermní kinetiky
- VI. Optimalizace časově teplotního režimu barvení
 - VI.1 Konkrétní případy optimalizace
 - VI.2 Zhodnocení optimalizace
- VII. Závěr

I ÚVOD

Naše společnost plně podporuje využití možností, které skýtá VTR pro urychlený hospodářský rozvoj a k uspokojování potřeb všech členů společnosti. Výroba spotřebního zboží, t. j. zejména textilií a oděvů, je důležitým odvětvím národního hospodářství. Vyplývá to zejména z toho, že v rámci RVHP je náš vývoz spotřebního zboží spolu se strojírenskými výrobky vývozem hlavním.

V dnešní době se ve všech oborech textilního průmyslu hledají optimální technologické procesy, které by maximálně zhospodárnily výrobu.

V barvicích procesech je dnes snaha o omezení spotřeby vody a elektrické energie a o automatizaci řízení barvicích procesů.

Praxe klade požadavek na krátké barvicí časy k zlepšení hospodárnosti barvicích procesů s ohledem na kvalitní výrobky.

V této diplomové práci se navrhoval optimální časově-teplotní režim při barvení bavlny a viskozy vybranými substantivními barvivy. Cílem bylo dosáhnout egální vybarvení.

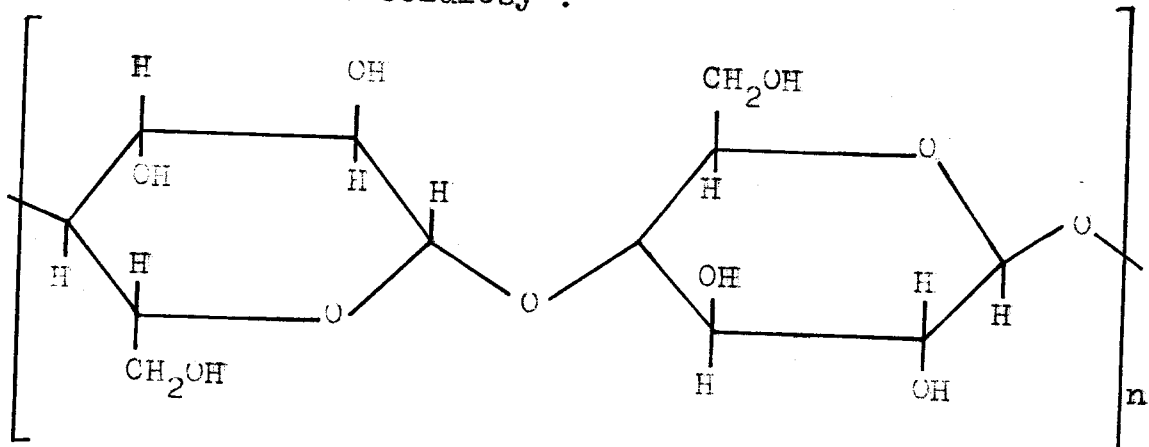
I.1 Seznam použitých symbolů

C_t koncentrace barviva ve vlákne [%]
C_∞ rovnovážná koncentrace barviva ve vlákne [%]
T teplota barvení [K] , [°C]
t barvicí čas [min]
v_t okamžitá rychlost barvení [% . min ⁻¹]
E_a aktivační energie [k J.mol ⁻¹]
R univerzální plynová konstanta [J. deg ⁻¹ .mol ⁻¹]
e základ přirozeného logaritmu
χ relativní chyba [%]
n exponent času
K rychlostní konstanta [min ⁻¹]
$t_{1/2}$ poločas barvení [min]
t_r relaxační čas [min]
ζ poměr ba:VS
L_{60} plocha pod křivkou [% . min]
\bar{c}_{0-60} střední koncentrace barviva [%]
P_{60} plocha nad křivkou [% . min]
λ_{60} statistický moment [min]
\bar{v} střední rychlost [% . min ⁻¹]

II LITERÁRNÍ REŠERŠE

II.1 VLASTNOSTI CELULOSOVÝCH VLÁKEN

Celulosa a její deriváty jsou nejrozšířenější makromolekulární látky v přírodě, především v rostlinstvu. Celulosa je polysacharid, jehož základní jednotkou je β -D-glukopyranosa. Vzorec celulosy :



Reaktivnost - OH skupin celulosy je často využívána např. při barvení reaktivními barvivy. Tyto hydroxylové skupiny jsou hydrofilní, a proto je poměrně vysoce hydrofilní i celulosa.

Celulosa se sice ve vodě nerozpouští, ale botná v ní. Dlouhodobý účinek vody celulosu pozvolna hydrolyzuje.

Alkalické roztoky značně zvyšují botnání celulosy. Využívá se toho při louhování nebo merceraci bavlny. Roztoky koncentrovanějších alkalických hydroxidů vyvolávají změnu struktury a vlastností celulosových vláken a zvyšují barvitelnost přírodních vláken. Při barvení je tedy nutno počítat s botnáním celulosových vláken ve vodě a zvláště v hydroxidech. Nestejnoměrným botnáním může vzniknout nestejně vybarvení.

Nestejně vybarvení, nebo dokonce neprobarvená místa mohou také vzniknout tam, kde je barvený materiál hustě stěs-

nán, neboť botnání zhoršuje průchod barvicí lázně.

Při sorpci vody nebo roztoku alkalických hydroxidů na celulosová vlákna vzniká sorpční teplo, které je tím větší, čím je materiál sušší. Toto teplo zvyšuje zvláště u velmi krátkých barvicích lázní významně teplotu barvicí lázně. Vlhký materiál je pak méně kvalitně vybarven. Sušením se botnavost některých celulosových vláken snižuje. Kyseliny celulosu hydrolyzují. Tím se vlastnosti vláken i jejich barvitelnost mění.

Významný vliv mají oxidační činidla. Silná oxidační činidla oxidují primární i sekundární alkoholické skupiny celulosy. Takto oxidované celulosy nazýváme oxycelulosami. Jsou pochopitelně rovněž jinak barvitelné než celulosa. Vlastnosti celulosových vláken a jejich barvitelnost však závisejí nejen na chemickém složení celulosy, ale i na uspořádání makromolekul ve vlákne. Čím více jsou makromolekuly uspořádány, tím obtížnější je barvitelnost. [4]

Celulosová vlákna se dělí podle svého původu na

- vlákna přírodní (ba, ju, ln, km)
- vlákna chemická na bázi celulosy
 - z regenerované celulosy (VS, mědnaté hedvábí a stříž)
 - z esterů celulosy (AT, AC) [6]

Z přírodních celulosových vláken se v ČSSR barví vlastně jen bavlna a len. Barvitelnost bavlny je ovlivňována původem, zralostí i před úpravou bavlny a klimatickými podmínkami, při jejím růstu a sklizni. Vyvařená a vybělená bavlněná vlákna se skládají z téměř čisté celulosy. Vlákna, která byla na kultivačních plochách zasažena deští nebo mrazem,

ztrácejí lesk, bývají našedlá a poněkud odlišně se barví. Podmínky růstu mají vliv i na zralost bavlny. Vlákna zralá mají plně vyvinutou sekundární celulosovou stěnu, polozralá a nezralá mají tuto stěnu slabší, mrtvá vlákna ji prakticky nemají. Protože sekundární celulosová stěna je nositelem vybarvovacích schopností vlákna, mrtvá bavlněná vlákna se nebarví a zůstávají i po barvení bílá, ostatní vlákna se barví podle stupně zralosti. Barvení různě zralých bavlněných vláken směsí barviv s různými difuzními koeficienty může způsobit nerovnoměrnost výpadu nejen v sytosti vybarvení, ale i v odstínu. [4]

Mercerovaná bavlna má větší podíl amorfni celulosy a tím i větší vnitřní povrch vlákna než nemercerovaná bavlna. Barví se proto rychleji a intenzivněji. Čím více byla vlákna při merceraci napínána, tím nižší je počáteční rychlost barvení. [2]

Vlákna z regenerované celulosy jsou tvořena velmi čistou celulosou. Jejich vlastnosti závisejí na průměrném polymerizačním stupni a na nadmolekulární struktuře. Rozdíly ve vybarvovacích schopnostech jsou větší než u bavlny, a to proto, že struktura těchto vláken se vědomě mění podle požadovaného účelu použití. Normální viskozová vlákna mají vysoký amorfni podíl a barví se poměrně snadno, pokud po zbotnání nebrání průchodu barvicí lázně. Nekonečná vlákna z regenerovaných celulos mají značný sklon k pruhovitému neegálnimu vybarvení. [4]

II.2 BARVENÍ SUBSTANTIVNÍMI BARVIVY

II.2.1 CHARAKTERISTIKA SUBSTANTIVNÍCH BARVIV

Barviva tohoto typu jsou ve vodě rozpustná, ve většině případu anionaktivní azobarviva, se silnou afinitou k celulo-

sovým materiálům. Jejich charakteristickou vlastností je schopnost vytahovat z vodného roztoku na celulosová vlákna a upevňovat se na nich. Tato vlastnost se nazývá substantivita. Československá barviva této třídy se dělí z hlediska svých hlavních barvířských vlastností do čtyř skupin:

- přímá barviva
- saturnová barviva /na světle stálá přímá barviva/
- rybantinová barviva (dodatečně ustalovaná měďnatými solemi)
- azogenová barviva (barviva ustalovaná diazotací a kopulací) [6]

Přímá barviva se používají všude tam, kde nejsou požadovány vysoké stálosti na světle a kde postačí nízké až průměrné mokré stálosti. Mokré stálosti lze zvýšit ustalováním Syntefixem.

Saturnová barviva se vyznačují dobrou stálostí na světle a dobře mokré stálosti lze ještě zvýšit dodatečným ustalováním.

Rybantinová barviva jsou polyazové sloučeniny, které mají v molekule seskupení schopná tvorby stabilních měďnatých komplexů. Vybarvení ustálená měďnatými solemi vykazují dobré stálosti na světle a vysoké mokré stálosti.

Azogenová barviva se aplikují stejně jako ostatní substantivní barviva. Po barvení se však materiál důkladně oplachuje studenou vodou a v další lázni za studena diazotuje dusitá-
nem sodným a kyselinou chlorovodíkovou. Na zdiazotované barvivo se kopuluje některá z vývojek. Tímto pochodem se na vlákne vytvoří z původního barviva barvivo nové s podstatně vyššími mokrymi stálostmi. [7]

Substantivita uvedených skupin barviv spočívá především v adsorpci barviva na vlákno a v jeho difúzi do nitra vlákna, což umožňuje kanálkovitý způsob vnitřní stavby vlákna po jeho zbobtnání vodou. Barvivo je v roztoku ve formě částíček, jejichž velikost se pohybuje od jednotlivých molekul až k velkým molekulárním shlukům, takže se může hovořit o molekulárních až koloidních disperzích. Z hlediska barvicího procesu je optimální stupeň disperze u jednotlivých barviv rozdílný a závislý především na teplotě roztoku, na přítomnosti elektrolytu, případné dalších látek. Optimálním se jeví takový stupeň disperze, při kterém je barvivo schopno v maximální míře přecházet z roztoku do celulosového vlákna a pevně se v něm vázat.

Průběh barvení celulosových vláken substantivními barvivy lze z teoretického hlediska popsat takto. Na počátku barvicího pochodu probíhá adsorpce, t. j. ukládání částic barviva z lázně na povrchu vlákna. Brzy po začátku adsorpce dochází k difuzi barviva s povrchu vlákna do jeho nitra, přičemž částičky barviva pronikají do kapilárních pórů a kanálek, které se zbobtnáním vlákna ve vodě zozšířily. Již v počáteční fázi barvicího pochodu probíhá adsorpce a difuze současně. Difuze ovšem pomaleji než adsorpce, takže je nutno během barvicího procesu počítat s delším časem pro průnik barviva do vlákna. V další fázi dochází k upevňování barviva ve vlákne. Toto upevňování není způsobeno chemickou vazbou mezi barvivem a vláknem, nýbrž mnohem slabšími přitažlivými silami mezi molekulami celulosy a barviva. Tyto síly jsou svou povahou fyzikálně chemické a závisejí především na konstituci vlákna i barviva a na velikosti částic barviva v lázni i na vlákne.

K zajištění egality a dobrých stálostí je důležité, aby

před barvením nebo v jeho průběhu došlo k dokonalému a stejnoměrnému zbotnění celulosového vlákna. Tím se uvolní a otevřou jeho vnitřní i povrchové prostory, do kterých v průběhu barvení difundují částice barviva. Materiál musí být tedy zbaven dobrou předúpravou cizích látek, jako jsou škrob, oleje, aviváže a jiné nečistoty.

II.2.2 Vliv teploty, elektrolytu a doby barvení na průběh barvicího procesu

Zahřátím roztoku barviva dochází k postupnému rozpadu hrubých agregátů na útvary menší, které mohou snáze difundovat do vnitřních prostor vlákna. Stav barviva v roztoku se tak přibližuje optimální disperzi. Účinek zvýšené teploty se však neprojevuje u všech barviv stejně. Některá barviva např. vytvářejí optimální disperzi již za nízkých teplot, tj. zabarvují vlákno již při 30 - 40 °C, jiná teprve při 80 - 95 °C.

Protože vlivem teploty se agregáty barviva v roztoku rozpadají i na částice menší, než je optimální stupeň disperze, tyto sice snadno difundují do vlákna, ale nejsou tam dostatečně pevně vázány a přecházejí zpět do lázně, je třeba tento stav regulovat přísadou elektrolytu. Přísada Glauberovy soli nebo jiných vhodných elektrolytů do barvicí lázně způsobuje shlukování dispergovaných částic barviva v agregáty, které se blíží optimální velikosti. To se projeví zvýšením afinity barviva k vláknu. Koncentrace elektrolytu v lázni však nesmí překročit určitou mez, za níž afinita dále nevzrůstá, naopak může dojít i k nepříznivému ovlivnění stavu roztoku např. vysrážení.

Soustava vlákno /lázeň/ barvivo je v průběhu barvení v dynamické rovnováze, která je až do dosažení konečného rov-

novážného stavu za daných podmínek barvení neustále porušována difuzí menších částic barviva z roztoku do vlákna a vyrovnávána rozpadem dalších agregátů v menší útvary. Tento proces není závislý pouze na čase, nýbrž také na řadě dalších skutečností, jako jsou vlastnosti barveného vlákna, intenzita styku lázně s materiálem, teplota a přísady elektrolytu, což spolu s dobou potřebnou pro egalizaci vybarvení určuje čas potřebný k barvení v rozmezí 60 - 90 minut. [6]

II.2.3 Optimalizace barvicích procesů

V poslední době je věnována zvýšená pozornost otázce optimalizace barvicích procesů, tj. nalezení takové technologie, která by zajistila při co nejmenší spotřebě všech složek barvicí lázně a energie, v co nejkratším čase bezchybné vybarvení. Tento problém však není možno řešit bez hlubší znalosti dějů probíhajících při barvení.

Egální vybarvení lze získat dvojím způsobem:

- klasickou metodou, kdy se nekontroluje první fáze barvení a volí se zpravidla rychlost ohřevu maximální. Při maximální teplotě se pak prodlužuje dostatečné fáze difuze a migrace, aby se dosáhlo egálního vybarvení.
- rychlobarvicím postupem, kdy se kontroluje a řídí rychlost sorpce barviva v první fázi barvení tak, aby se zabránilo neegálnostem. Postačuje pak podstatně kratší migrační fáze a celý barvicí pochod se zrychluje [7]

Největší pravděpodobnost dosažení egálního vybarvení poskytuje systém s konstantní rychlostí sorpce, tj. takový, kde sorpce barviva je lineární funkcí doby barvení. Tyto systémy se nazývají izoreaktivní.

Při odvození časově teplotních programů odpovídajících podmínce izoreaktivity je nutné nejprve určit kinetickou rovnici popisující dostatečně přesně experimentálně získané vybarvovací křivky. Je tedy třeba nalézt vztah

$$C_t = f(K, C_\infty, t) \quad / \text{II.} /$$

Dále je třeba určit závislost rychlostní konstanty na teplotě

$$K = f(T) \quad / \text{II.2} /$$

Podmínkou izoreaktivity je možno vyjádřit vztahem

$$\frac{dC_t}{dt} = \frac{C_n}{t_n} = \frac{C_t}{t_i} \quad / \text{II.3} /$$

Průměrná rychlost barvení

$$v_p = \frac{C_n}{t_n} = \frac{C_t}{t_i} \quad / \text{II.4} /$$

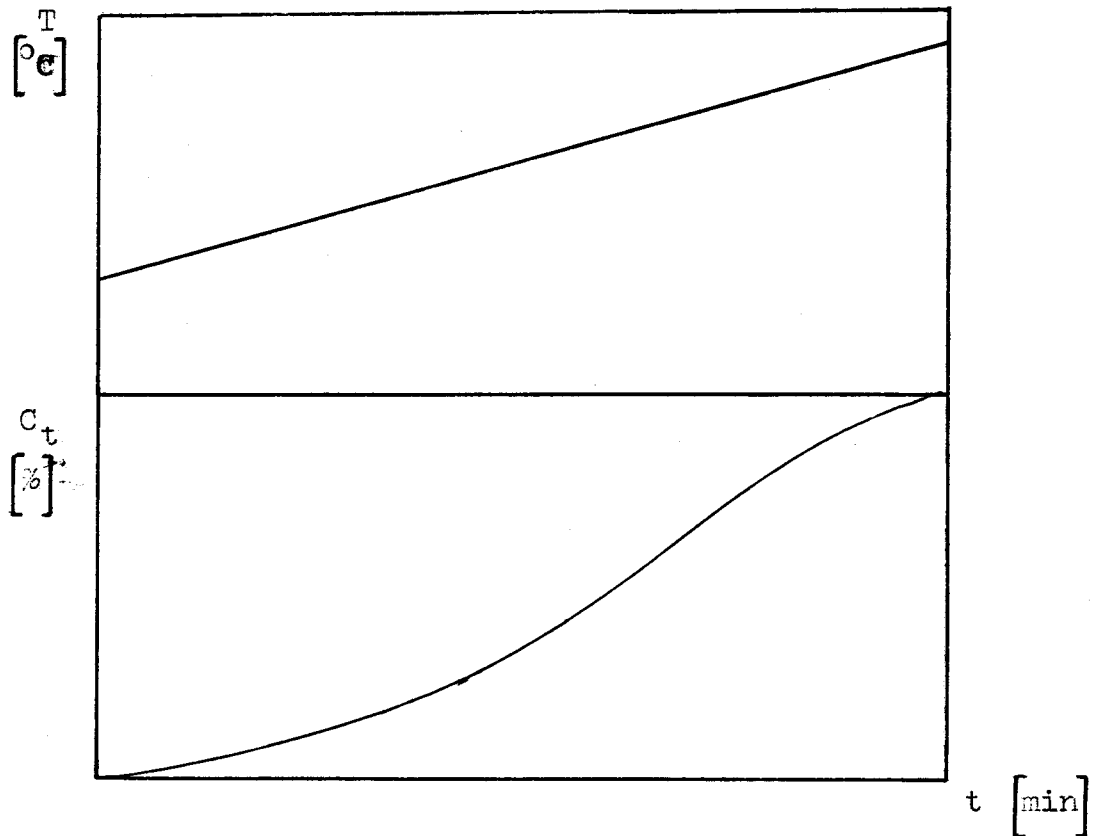
Časově teplotní režim barvení pro izoreaktivní podmínky definuje rovnice

$$T = f(t_i, t_n, C_n) \quad / \text{II.5} /$$

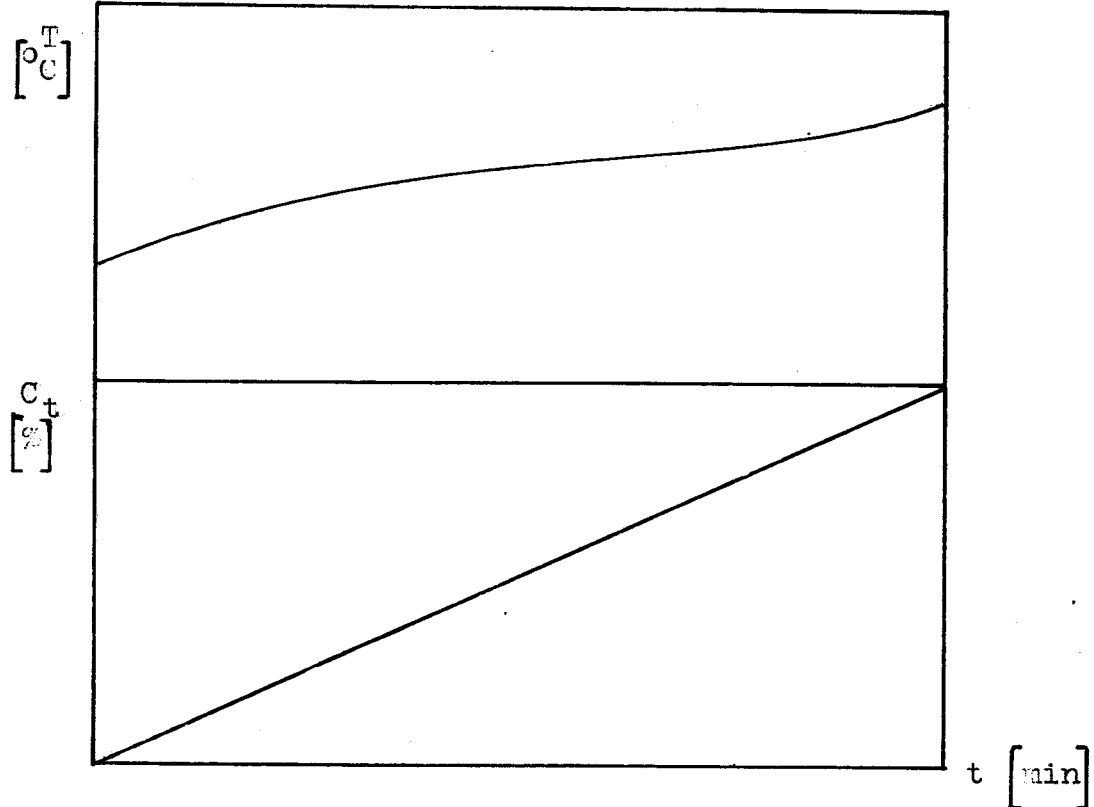
Obecně se tato rovnice řeší numericky, tj. pro různé časy t_i se hledají její kořeny, což jsou odpovídající teploty T . Na obr. II.1 je znázorněna závislost T, C_t na době barvení pro neizoreaktivní a izoreaktivní systém.

Obr. II.1

Systém, kde teplota stoupá lineárně s časem



Izoreaktivní systém



III. ZÁKLADNÍ ÚDAJE Z KTERÝCH BYLO VYCHÁZENO PŘI POZDĚJŠÍCH VÝPOČTECH

III.1 Použitý materiál

Byly vyhodnocovány afinitní křivky barvení bavlněné mercerované tkaniny a tkaniny z viskozového hedvábí ze vzorkovnice substantivních barviv.

III.2 Použitá barviva a chemikálie

Podmínkou pro vybrání substantivního barviva bylo, aby barvivo mělo monotónně stoupající afinitní křivku a aby to bylo barvivo saturnové.

III.2.1 Barvení bavlny

Barvicí lázeň obsahovala:

1 % vybarvení

poměr lázně 1 : 20

20 % síran sodný kalc.

1 % soda kalc.

III.2.2 Barvení viskozy

Barvicí lázeň shodná s barvicí lázní pro bavlnu. Přídavek sody kalc. s ohledem na citlivost a botnatelnost materiálu odpadá.

III.3 Vytahovací křivky

Vytahovací křivky znázorňují grafický průběh barvicího procesu, rychlost přechodu barviva z lázně na vlákno. Grafy byly sestaveny na základě údajů získaných kolorimetrickým měřením na přístroji Praxitest 100 firmy Original Hanau.

Na svislé ose grafu se odečítá množství barviva v %, které za podmínek uvedených v grafu přešlo z lázně na vlákno. Za 100 % se počítá to množství barviva, které bylo obsaženo v lázni na počátku barvení, tj. 1 % z váhy barveného materiálu. Na vodorovné ose je udána doba barvení a teplota. [1]

III.4 Časově teplotní režim barvení

Počáteční teplota barvení do 2 min.: 313,15 K

Od 2. do 10. min. byla teplota zvýšena na 333,15 K

Barvení probíhalo podle rovnice

$$T [K] = 2,5 t + 308 \quad / \text{III.1} /$$

Od 10. do 20. min. byla teplota zvýšena na 353,15 K

Barvení probíhalo podle rovnice

$$T [K] = 2 t + 313 \quad / \text{III.2} /$$

Od 20. do 30. min. byla teplota zvýšena na 368,15 K

Barvení probíhalo podle rovnice

$$T [K] = 1,5 t + 323 \quad / \text{III.3} /$$

Od 30. min. byla teplota udržována na 368,15 K

Celková doba barvení byla 60 min.

Grafický průběh barvení je na obr. III.1

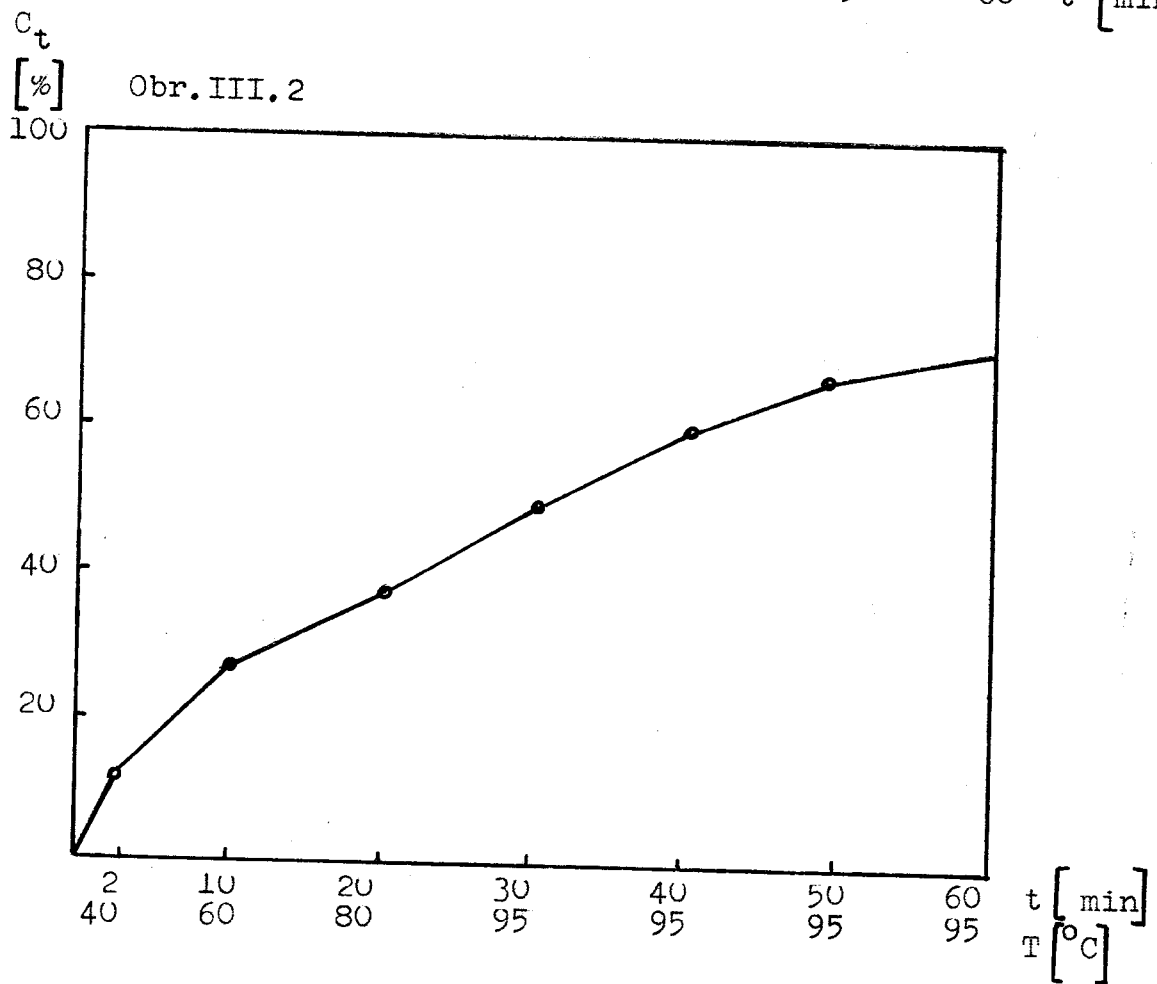
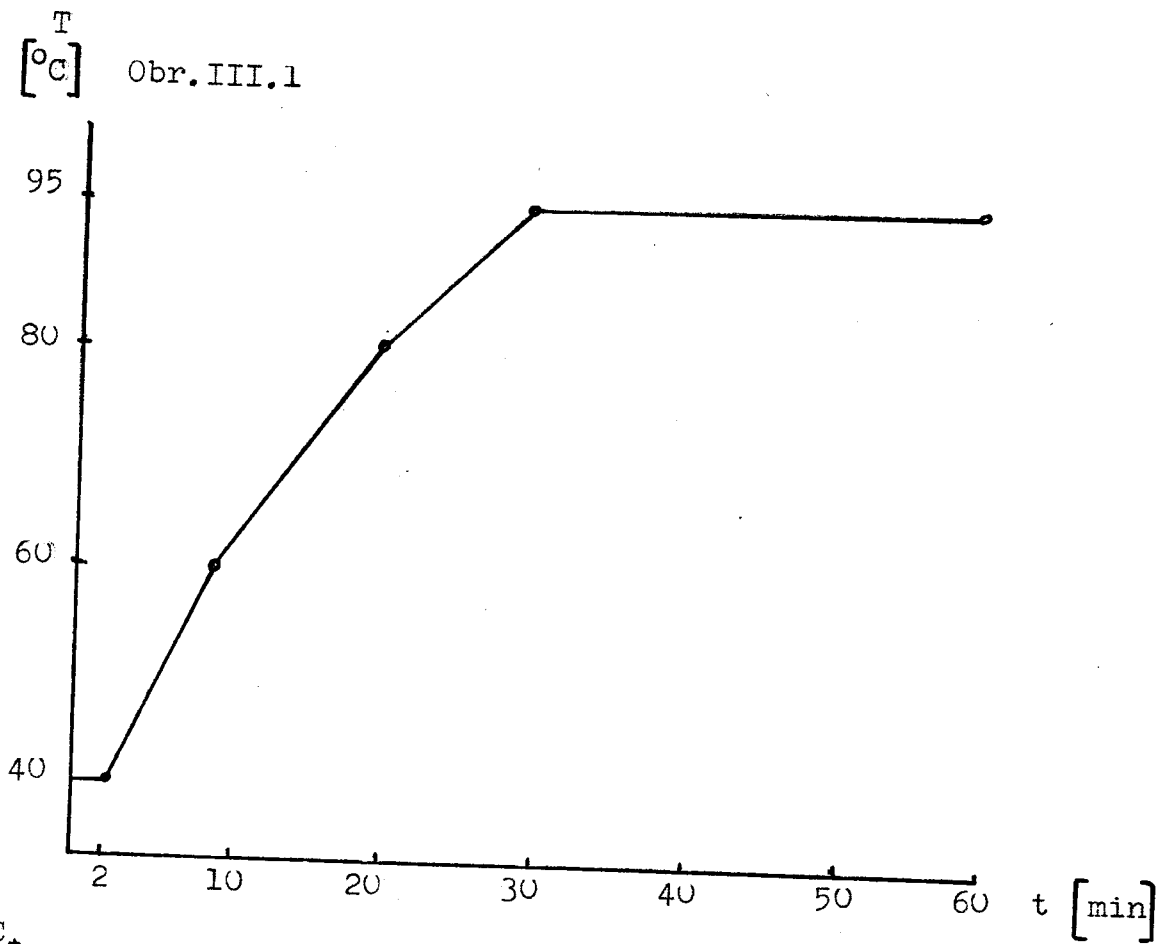
Vytahovací křivka se skládala ze dvou oblastí. Do 30 min. to byla neizotermní křivka a od 30 min. izotermní. Dále ji charakterizoval poměrně malý teplotní rozsah od 40 °C do 95 °C.

III. 5 Způsob získání experimentálních hodnot

Hodnoty C_t byly odečteny na 2 desetinná místa z grafů obr. III.2 ve vzorkovnici [1] a to pro bavlnu a viskozu, protože mají podobné barvířské vlastnosti (jsou tvořena celulosou téměř stejné chemické povahy.) [2]

Odečtené hodnoty C_t pro jednotlivá barviva jsou v tab. III.1-

III.6



Tab. III.1

Barvivo		Sat. violet L4B		Sat. žluť LFF	
t [min]	T [K]	C _t (ba) [%]	C _t (VS) [%]	C _t (ba) [%]	C _t (VS) [%]
2	313,15	31,50	25,46	25,09	16,61
10	333,15	50,18	54,24	71,59	51,29
20	353,15	69,23	71,96	93,36	86,72
30	368,15	81,68	80,44	94,10	92,62
40	368,15	84,62	81,55	94,46	93,36
50	368,15	84,98	82,66	94,83	94,46
60	368,15	84,98	83,39	95,94	95,57

Tab. III.2

Barvivo		Sat. žluť LRT		Sat. zeleň L5G	
t [min]	T [K]	C _t (ba) [%]	C _t (VS) [%]	C _t (ba) [%]	C _t (VS) [%]
2	313,15	25,46	14,76	22,06	0,00
10	333,15	49,08	42,80	50,74	55,88
20	353,15	68,27	70,11	58,09	70,59
30	368,15	76,38	76,38	65,81	72,43
40	368,15	85,24	76,75	68,38	73,16
50	368,15	85,98	79,70	68,38	76,10
60	368,15	87,82	84,50	68,38	79,41

Tab. III.3

Barvivo		Sat. šarlat LGN		Sat. červen F3B	
t [min]	T [K]	C _t (ba) [%]	C _t (VS) [%]	C _t (ba) [%]	C _t (VS) [%]
2	313,15	21,03	9,23	32,47	10,33
10	333,15	50,92	33,58	53,87	27,68
20	353,15	54,24	59,78	74,17	59,78
30	368,15	58,30	65,68	84,50	80,07
40	368,15	62,36	66,42	86,34	87,08
50	368,15	64,57	67,53	88,19	87,45
60	368,15	66,79	69,74	86,97	87,82

Tab. III. 4

Barvivo		Sat.nám.modř LFG konc.		Sat.modř.tyrkysová LG	
t [min]	T [K]	C _t (ba) [%]	C _t (VS) [%]	C _t (ba) [%]	C _t (VS) [%]
2	313,15	12,18	20,30	13,65	12,55
10	333,15	34,69	27,31	32,47	21,03
20	353,15	48,34	34,32	39,85	29,52
30	368,15	51,66	45,76	47,97	38,38
40	368,15	54,98	55,72	55,35	39,85
50	368,15	58,67	67,16	56,46	40,95
60	368,15	62,73	77,86	58,67	42,81

Tab. III. 5

Barvivo		Sat.hněd [✓] L2R		Sat.hněd SBR	
t [min]	T [K]	C _t (ba) [%]	C _t (VS) [%]	C _t (ba) [%]	C _t (VS) [%]
2	313,15	20,30	15,13	16,97	13,28
10	333,15	33,21	27,68	37,64	25,46
20	353,15	45,39	39,85	55,35	36,90
30	368,15	59,04	51,29	69,74	47,97
40	368,15	71,59	63,10	77,49	60,15
50	368,15	77,12	64,94	81,18	65,68
60	368,15	78,60	66,05	88,56	77,86

Tab. III. 6

Barvivo		Sat.hněd [✓] LB		Sat.čern [✓] G supra	
t [min]	T [K]	C _t (ba) [%]	C _t (VS) [%]	C _t (ba) [%]	C _t (VS) [%]
2	313,15	23,25	11,07	32,84	17,34
10	333,15	40,22	17,71	59,78	56,46
20	353,15	59,78	32,10	70,85	68,27
30	368,15	71,22	54,24	70,85	70,48
40	368,15	79,70	62,73	75,28	73,80
50	368,15	81,55	67,53	80,00	76,75
60	368,15	84,50	70,48	85,24	79,70

IV. VYHODNOCENÍ IZOTERMNÍ KINETIKY

IV.1 Výpočet pravděpodobné rovnovážné koncentrace barviva ve vlákně

Pravděpodobná rovnovážná koncentrace C_∞ byla počítána z izotermní oblasti, tedy od $t = 30$ do $t = 60$ podle vzorce

$$C_\infty = C_1 C_2 \sqrt[m]{\frac{1 - \alpha}{C_1^m - C_2^n \cdot \alpha}} \quad / \text{IV.1} /$$

n, m jsou konstanty, pro náš případ $n = 1, m = 2$

$$\alpha = \left(\frac{t_1}{t_2} \right)^n \quad [8]$$

Do vzorce / IV.1 / byly postupně dosazovány kombinace všech hodnot C_t z izotermní oblasti. Dostali jsme tak šest hodnot C_∞ , u kterých jsme spočítali relativní chybu výpočtu. Dvě hodnoty s největší chybou byly vyřazeny a ze zbylých spočítána průměrná hodnota rovnovážné koncentrace barviva ve vlákně. U barviv, která měla C_∞ větší než 100 %, bylo C_∞ počítáno z grafů, kde na vodorovné ose bylo $1/t$ a na svislé $1/C_t$, případně $1/C_t^2$, z lineární oblasti metodou nejmenších čtverců. [3] Jestliže i potom vycházelo C_∞ větší než 100 %, byla za C_∞ vzata hodnota 100 %, to znamená, že jsme uvažovali 100 % ní vytažení barviva z lázně na vlákno.

Hodnoty C_∞ jsou uvedeny v tab. IV.1, kde jsou i hodnoty C_{60} , tedy hodnoty C_t po skončení barvení a jejich porovnání u bavlny a viskozy.

Tab. IV.1

Barvivo	mat.	C_{60} [%]	$\delta(C_{60})$	C_{∞} [%]	$\delta(C_{\infty})$
Sat. žluť LFF	ba	95,94	1,003	97,33	0,983
	VS	95,57		99,01	
Sat. žluť LRT	ba	87,82	1,039	95,12	0,978
	VS	84,50		97,25	
Sat. zeleně L5G	ba	68,38	0,860	70,79	0,778
	VS	79,41		90,89	
Sat. violetě L4B	ba	84,98	1,019	88,45	1,017
	VS	83,39		86,97	
Sat. šarlatě LGN	ba	66,79	0,957	81,50	1,101
	VS	69,74		74,02	
Sat. červeně F3B	ba	89,67	1,021	96,34	1,008
	VS	87,82		95,54	
Sat. nám. modř LFG konc.	ba	62,73	0,805	88,03	0,880
	VS	77,86		100,00	
Sat. modř tyrkysová LG	ba	58,67	1,371	78,83	1,632
	VS	42,81		48,30	
Sat. hněď L2R	ba	78,60	1,190	96,40	1,148
	VS	66,05		83,94	
Sat. hněď SBR	ba	88,56	1,137	100,00	1,000
	VS	77,86		100,00	
Sat. hněď LB	ba	84,50	1,199	99,25	0,993
	VS	70,48		100,00	
Sat. černě G supra	ba	85,24	1,069	100,00	1,066
	VS	79,70		93,82	

IV.2 Výpočet exponentů času n a rychlostní konstanty K z izotermní oblasti

Dále byla počítána rychlostní konstanta K_{95} z bodů v izotermní oblasti a exponent času n . Rychlostní konstanta je mírou celkové rychlosti barvení, čím je větší, tím obecně větší rychlostí barvení proběhlo. [3]
 K_{95} a n jsme počítali z rovnice

$$\ln K + n \ln t + \ln \frac{c_{\infty}^2 - c_t^2}{c_t^2} = 0 \quad / \text{IV.2} /$$

kterou jsme dostali upravením a zlogaritmováním rovnice

$$c_t^2 = \frac{K c_{\infty}^2 \cdot t^n}{1 + K t^n} \quad / \text{IV.3} /$$

Dále byla řešena soustava dvou rovnic o dvou neznámých, vždy pro dvě různá t z izotermní oblasti. Při výpočtech byla vyloučena 1/3 největších relativních chyb a spočítány průměrné hodnoty n a $\ln K_{95}$, které jsou uvedeny v tab. IV.2. Dále je tam uvedena korigovaná rychlostní konstanta (resp. její logaritmus), která byla získána podle vzorce

$$K_{95} \text{ korig.} = \left(K_{95} \text{ nekorig.} \right)^{\frac{1}{n}} \quad / \text{IV.4} /$$

Hodnoty n musí vždy vyjít větší než 0, protože v opačném případě afinitní křivka dostává opačný průběh - s přibývajícím časem klesá koncentrace barviva ve vlákne.

Tab. IV. 2

Barvivo	mat	n	$\phi(n)$	$\ln K_{95}$	$\phi(\ln K_{95})$	$\ln K_{95} \text{ kor.}$
Sat. žlut LFF	ba	1,068399	0,973	-1,098186	0,560	-1,027880
	VS	1,098579		-1,960673		-1,784733
Sat. žlut LRT	ba	1,425092	1,461	-4,133668	1,370	-2,900633
	VS	0,975609		-3,016445		-3,091860
Sat. zelen L5G	ba	1,796522	1,821	-4,439571	1,498	-2,471204
	VS	0,986114		-2,963962		-3,005702
Sat. violeř L4B	ba	1,104606	1,092	-2,013594	1,167	-1,822906
	VS	1,011710		-1,725949		-1,705970
Sat. řarlat LGN	ba	0,961389	0,941	-3,227488	1,404	-3,357190
	VS	1,022015		-2,299669		-2,250132
Sat. řerven ř3B	ba	1,004996	1,222	-2,278195	1,461	-2,266687
	VS	0,822565		-1,559510		-1,895911
Sat. nám. modř LFG konc.	ba	0,993306	0,379	-4,085068	0,393	-4,112598
	VS	2,620697		-10,39451		-3,966321
Sat. modř tyrkysová LG	ba	0,931303	0,925	-3,627596	1,230	-3,895185
	VS	1,007344		-2,948562		-2,927065
Sat. hněd L2R	ba	1,671042	1,529	-6,021099	1,555	-3,603201
	VS	1,092445		-3,872177		-3,544502
Sat. hněd SBR	ba	1,777974	0,801	-6,077894	0,697	-3,418440
	VS	2,218885		-8,718086		-3,929042
Sat. hněd LB	ba	1,213773	1,013	-4,029287	0,826	-3,319627
	VS	1,198469		-4,878029		-4,070222
Sat. čern G supra	ba	1,416208	1,409	-4,910202	1,533	-3,467148
	VS	1,004867		-3,203101		-3,187585

IV.3 Ověření přesnosti zvoleného modelu

Vypočítané hodnoty n a K_{95} byly zpětně dosazeny do vzorce /IV.3/ a byly spočítány teoretické hodnoty C_t za předpokladu, že by barvení probíhalo stále při stejné teplotě $T = 368,15 \text{ K}$. Byla spočítána i průměrná relativní chyba χ [%] popisu izotermní oblasti. Hodnoty C_t a χ jsou v tabulce IV.3 - IV.6.