

УДК 541.64

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАВНОВЕСНОГО ГЛИКОЛИЗА ПОЛИЭТИЛЕНТЕРЕФТАЛАТА, СОПРОВОЖДАЕМОЕ ОТГОНКОЙ НИЗКОМОЛЕКУЛЯРНОГО ПРОДУКТА

В. В. Олейник

Аспирант*

Контактный тел.: (06453)5-03-97, (06453) 7-54-38

E-mail: valerija-olejnik@rambler.ru

С. А. Кондратов

Доктор химических наук, профессор, заведующий кафедрой

*Кафедра высшей математики та компьютерных технологий

Институт химических технологий

Восточноукраинский национальный университет им. В. Даля

ул. Ленина, 31, г. Рубежное, Луганская обл., Украина, 93000

Контактный тел.: (06453)5-03-97, (06453) 7-54-38

E-mail: kondratov@rune.lg.ua

К. Ю. Кудюков

Соискатель

Кафедра технологии органических веществ и топлива

Технологический институт Восточноукраинского национального

университета им. В. Даля

пр. Советский, 59-а, г. Северодонецк, Луганская обл., Украина,

93400

Контактный тел.: 050-162-79-77

E-mail: kudukov@list.ru

Розроблено комп'ютерну модель рівноважного гліколізу ПЕТФ, що супроводжується процесом дистиляції. Вивчено вплив співвідношення ПЕТФ до ДЕГ, кроку відгонки, тиску вакууму на ММ олігомерів і склад суміші відгон. Досліджено зміни ММ олігомерів і складу відігнаної суміші

Ключові слова: поліконденсація, дистиляція, ПЕТФ, ДЕГ, моделювання

Разработана компьютерная модель равновесного гликолиза ПЭТФ, сопровождаемого процессом дистилляции. Изучено влияние соотношения ПЭТФ к ДЭГ, шага отгонки, давления вакуума на ММ олигомеров и состав смеси отгона. Исследованы изменения ММ олигомеров и состава отогнанной смеси

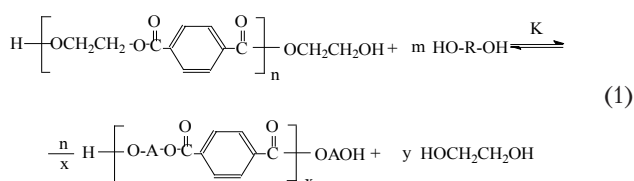
Ключевые слова: поликонденсация, дистилляция, ПЭТФ, ДЭГ, моделирование

A computer model of equilibrium PET glycolysis, followed by a distillation process is developed. The influence of the ratio of PET to the DEG, the distillation step, the vacuum pressure in the MM composition of the mixture of oligomers and distillation is studied. The changes in the composition of MM oligomers and distilled mixture are investigated

Keywords: polycondensation, distillation, PET, DEG, modelling

1. Введение

Один из путей переработки отработанного полиэтилентерефталата (ПЭТФ) - гликолиз полимера под действием диэтиленгликоля (ДЭГ) или других гликолей [1, 2] в условиях равновесных реакции (1):



где HO-R-OH – гликоль-реагент, HO-A-OH – этиленгликоль (ЭГ) или гликоль-реагент. Продукты гликолиза, низкомолекулярные олигомеры, можно использовать для получения ненасыщенных смол, полиуретанов, компонентов печатных красок [3-5].

На практике в качестве реагента чаще всего используют диэтиленгликоль (ДЭГ), триэтиленгликоль, бутиленгликоль. Процесс гликолиза проводят, нагревая ПЭТФ с гликолем (обычно в присутствии катализатора) с последующей вакуумной отгонкой низкокипящего компонента для регулирования молекулярной массы.

Актуальная проблема – выявление характера изменения молекулярно-массового распределения и состава олигомеров в ходе гликолиза ПЭТФ. Эти величины, определяют не только потребительские свойства олигомеров, но также управление технологическим процессом. Они трудно поддаются экспериментальному изучению.

Современный подход к исследованию явлений, которые трудно или невозможно изучать экспериментально, заключается в создании математической (компьютерной) имитационной модели явления и последующего выявления характерных закономерностей на этой модели [6, 7]. Целью настоящей работы является разработка имитационной компьютерной модели равновесной полиэтерификации и отгонки, изучение на ней изменения средней молекулярной массы олигомеров и их состава.

2. Описание модели

В основу модели положены следующие соображения:

а) на практике отгонку гликоля производят после длительного нагревания реагентов, поэтому можно считать, что в системе ПЭТФ-гликоль перед отгонкой установились равновесия транс-этерификации (1);

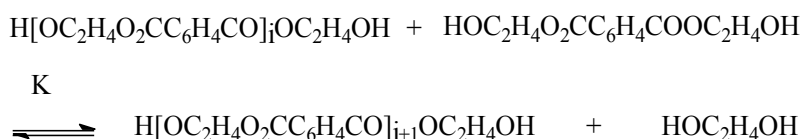
б) можно также считать, что отгонка производится медленно, так что в системе при отгонке каждой порции успевают установиться равновесия (1).

Такое чисто термодинамическое рассмотрение является идеализированным, однако оно поможет выявить основные тенденции и закономерности протекающего процесса гликолиза ПЭТФ.

При моделировании использовали системный подход, основанный на выделении подсистем, разработке их моделей, на основании которых проводится синтез модели химико-технологической системы в целом [8, 9]. В соответствии с этим в системе «гликолиз» можно выделить 2 таких подсистемы: «Равновесие» и «Перегонка», исследовать отдельно особенности каждой из подсистем, а затем – произвести синтез модели в целом.

2.1 Подсистема «Равновесие»

В соответствии с (1) при взаимодействии ПЭТФ с этиленгликолем протекают реакции деструкции-гомополиконденсации, которые можно представить в виде системы линейно-независимых обратимых реакций [10]:



Если принять, что в системе выполняется принцип Флори о независимости реакционной способности от

длины цепи [11], то, в соответствии с [11] после наступления равновесия концентрации олигомеров формулы $\text{H}[\text{OC}_2\text{H}_4\text{O}_2\text{CC}_6\text{H}_4\text{CO}]_i\text{OC}_2\text{H}_4\text{OH}$ ($i=1,2,\dots$) образуют геометрическую прогрессию с знаменателем:

$$\gamma = K \cdot \frac{x_1}{b}, \quad (3)$$

где x_1 – равновесная концентрация мономера $\text{HOC}_2\text{H}_4\text{O}_2\text{CC}_6\text{H}_4\text{CO}_2\text{C}_2\text{H}_4\text{OH}$, моль/кг,

b – равновесная концентрация низкомолекулярного побочного продукта (этиленгликоля), моль/кг.

Для нахождения этих величин составляем систему уравнений материального баланса всех полимеров по общему содержанию фрагментов мономеров и этиленгликоля, которые после вычисления бесконечных сумм сходящихся геометрических прогрессий (при условии, что $\gamma < 1$, являющегося необходимым для существования решения), принимают вид:

$$\begin{cases} \frac{x_1}{\left(1 - K \cdot \frac{x_1}{b}\right)^2} = C_r \\ \frac{x_1}{\left(1 - K \cdot \frac{x_1}{b}\right)} + b = C_r \end{cases} \quad (4)$$

где C_m, C_z – исходные концентрации фрагментов терефталевой кислоты и этиленгликоля (свободного и связанного), моль/кг.

Система (4) имеет 2 положительных решения: (5) и (6):

$$\begin{cases} b = \frac{C_r + C_r(2K-1) - \sqrt{(C_r - C_r)^2 + 4KC_rC_r}}{2(K-1)}; \\ x_1 = \frac{(C_r - b)^2}{C_1} \end{cases} \quad (5)$$

$$\begin{cases} b = \frac{C_1 + C_2(2K-1) + \sqrt{(C_1 - C_2)^2 + 4KC_1C_2}}{2(K-1)}; \\ x_1 = \frac{(C_2 - b)^2}{C_1} \end{cases} \quad (6)$$

Путем численного моделирования установлено, что из этих корней при $K \neq 1$ имеет физический смысл только второй корень, так как только он обеспечивает

выполнение условия сходимости геометрической прогрессии: $\gamma < 1$. Первый корень всегда дает $\gamma > 1$.

Из значений x_1 и b , можно рассчитать другие характеристики полимерных систем в равновесном состоянии: среднюю степень полимеризации, среднечисловую молекулярную массу и др.

(2) но рассчитать другие характеристики полимерных систем в равновесном состоянии: среднюю степень полимеризации, среднечисловую молекулярную массу и др.

В случае, когда гликолиз проводится другими гликолями, необходимо учитывать более широкий круг

взаимодействий, что усложняет задачу. Как известно [12], в процессах равновесной поликонденсации гликоли, независимо от строения, обладают практически одинаковой реакционной способностью. Это позволяет рассматривать смесь гликолей как некий «усредненный» гликоль с концентрацией, равной суммарной концентрацией обоих компонентов смеси и молекулярной массой, обусловленной их мольными долями и на этой основе оценить такие практически важные характеристики, как изменение средней степени полимеризации (ССП) и средней молекулярной массы в ходе процесса.

В литературе отсутствуют данные о константах равновесия процессов (1) для разных гликолей. Однако, ввиду структурной близости исходных и конечных продуктов реакции (1), можно ожидать, что эти константы будут близки к 1. Доводом в пользу этого предположения может служить и константа равновесия близкой к (1) реакции поликонденсации диметилтерефталата с этиленгликолем, которая равна примерно 0,5-1 [13], а также константа равновесия поликонденсации бис-(гидроксиэтилен) терефталата, которая составляет 0,8-1 [14]. Ввиду того, что $K \sim 1$, при моделировании можно приближенно считать, что константа равновесия не изменяется с температурой.

2.2 Подсистема «Дистилляция». Синтез модели системы

Известно, что системы гликоль-гликоль образуют идеальные растворы [15]. Ввиду структурной близости гликолей и продуктов поликонденсации принимали, что они также образуют идеальные растворы. Тогда для смеси из двух летучих гликолей температура кипения (t_b , °C) и парциальные давления компонентов (P_1 и P_2 , мм рт.ст.) могут быть рассчитаны в соответствие с законом Рауля и уравнением Антуана [16]:

$$P_{\text{ит}} = P_1 + P_2 = \mu_1 \cdot \exp\left(A_1 + \frac{B_1}{t_b + C_1}\right) + \mu_2 \cdot \exp\left(A_2 + \frac{B_2}{t_b + C_2}\right) \quad (7)$$

где μ_1, μ_2 - мольные доли гликолей в жидкой фазе,
 A, B, C - параметры уравнения Антуана

$$\ln P = A + \frac{B}{t + C} \quad \text{для описания зависимости давления}$$

паров индивидуальных веществ от температуры,

$P_{\text{ит}}$ - давление в системе, мм рт.ст.

Обычно процессы периодической дистилляции описываются системами дифференциальных уравнений. В рассматриваемом случае процесс дистилляции осложнен равновесиями (1), что затрудняет получение дифференциального уравнения в явной форме. Однако можно составить имитационную компьютерную модель, которая будет разностным аналогом этого дифференциального уравнения. Суть модели заключается в следующем:

- полагали, что процессы установления равновесия и дистилляции протекают дискретно, в пределах отгонки малой порции h моль смеси гликолей;

- считали, что в пределах отгонки этой порции состав жидкой фазы не изменяется и отвечает равновесию перед началом отгонки. Состав новой порции устанавливается скачком.

Алгоритм этой модели (в расчете на использование 1 моль исходного ПЭТФ и диэтиленгликоля, как второго гликоля) имеет следующий вид:

а) вводили исходные данные: константу равновесия K , исходную степень полимеризации ПЭТФ, исходное соотношение молей ПЭТФ-ДЭГ, параметры уравнения Антуана для гликолей, давление в системе $P_{\text{ит}}$, количество молей отгона M , количество шагов расчетов N . Рассчитываем шаг расчета $h = M/N$;

б) на каждом шаге рассчитывали:

- общее количество молей гликолей в системе, молекулярную массу «усредненного» гликоля;

- величины C_T и C_z системы (4), равновесные количества мономерной формы x_1 и усредненного гликоля b (исходя из соображений, изложенных выше). По значению x_1 рассчитывают суммарное равновесное количество полимеров в системе, как сумма сходящейся геометрической прогрессии:

$$XS = x_1 + x_2 + \dots = x_1 \cdot (1 + \gamma + \gamma^2 + \dots) = \frac{x_1}{1 - \gamma} = \frac{x_1}{1 - K \cdot \frac{x_1}{b}} \quad (8)$$

- рассчитывали мольные доли μ_1, μ_2 гликолей в жидкой фазе;

- решением уравнение (8), находили температуру кипения смеси и парциальные давления каждого из гликолей. Считая паровую фазу идеальным газом, рассчитывают y_1, y_2 - мольные доли гликолей в паровой фазе (делением их парциальных давлений на общее давление в системе);

- учитывая, что на каждом шаге уходит с дистиллятом h моль отгона с мольными долями гликолей y_1, y_2 , рассчитывали, сколько каждого из гликолей (свободного и связанного) осталось в жидкой фазе после очередного шага. Рассчитывали средний состав дистиллята после каждого шага.

Результаты на каждом шаге выводили на экран дисплея в форме строки матрицы.

Рассмотренный алгоритм реализован программно в системе MS Excel под управлением макросов VBA. Основные исследования были выполнены для полимера со средней степенью полимеризации 50.

3. Результаты моделирования и их обсуждение

Ключевым для моделирования является вопрос сходимости результатов. Для этого исследовали расчетные значения средней степени полимеризации (и среднечисловой молекулярной массы полимера) в жидкой фазе после отгонки определенных количеств молей гликолей в зависимости от шага отгонки. Как следует из табл. 1, при уменьшении длины шага h от 0,025 до 0,001 результаты (средняя степень полимеризации и молекулярная масса) с практической точки зрения не изменяются (изменения происходят в 5-6 знаках). Это свидетельствует о сходимости рассмотренного алгоритма.

Поскольку точное значение константы равновесия неизвестно, мы провели серию расчетов при разных значениях K , генерируемых равномерно в диапазоне (0,5;2). При этом большое количество полученных точек (20-40 тыс.) на графике создает образ области допустимых значений и позволяют визуально оценить, в каком диапазоне изменяется выходная величина в зависимости от значения константы равновесия.

При изучении тенденций в изменении молекулярной массы полимера в жидкой фазе было установлено, что в начальный период, после добавления ДЭГ, наблюдается резкое снижение степени полимеризации (с 50 до 1,5-2) и молекулярной массы. При отгонке наблюдается сначала медленное увеличение степени полимеризации и молекулярной массы. При приближении к концу процесса наблюдается резкое возрастание молекулярной массы (рис. 1), вплоть до переполнения рядной сетки компьютера при попадании в окрестность сингулярной точки, отвечающей образованию высокополимера. Давление в системе слабо влияет на характер кривых: при давлениях от 20 до 200 мм рт.ст. области, полученные моделированием при разных K , налагаются друг на друга. Сравнительно небольшая «толщина» области говорит также о слабом влиянии величины K в рабочем диапазоне (0,5 – 2).

Обращает на себя внимание, что в отгоне присутствует значительное количество диэтиленгликоля (в зависимости от остаточного давления от 20-25 % в начале и 30-35 К% в конце). Это указывает, что, несмотря на значительную разницу в температурах кипения обеих гликолей (более 50°C) в процессе происходит отгонка смеси этиленгликоля и диэтиленгликоля, и, следовательно, олигомеры в жидкой фазе также содержат остатки обеих гликолей. С увеличением давления в системе возрастает количество ДЭГ в отгоне (рас. 1). При этом влияние величины константы равновесия поликонденсации в диапазоне 0,5 – 2 оказывается небольшим, на что указывает небольшая «толщина» линий на рис. 1.

Качественно аналогичные закономерности наблюдали также при использовании ПЭТФ со степенью полимеризации 100 и 200. Наличие ДЭГ в отгоне свидетельствует, что в составе олигомеров в жидкой фазе будут содержаться фрагменты как ДЭГ, так и этиленгликоля. Как следует из рис. 3, в рассмотренном примере после отгонки практически всего свободного гликоля (при этом молекулярная масса олигомеров в жидкой фазе достигает почти 6000) мольная доля этиленгликоля (свободного и связанного в полимеры) составляет почти 50 % от первоначальной. В этой связи возникает практический вопрос о возможности регулирования соотношения ЭГ-ДЭГ в составе полимера путем введения различных количеств ДЭГ в процесс. Поскольку увеличение молекулярной массы протекает в конце отгонки и весьма резко (рис. 1), после достижения достаточно высокой молекулярной массы (4000-5000) дальнейшая отгонка и увеличение молекулярной массы не сопровождается заметным изменением содержания этиленгликоля в жидкой фазе. Поэтому для оценки влияния первоначального соотношения ДЭГ-ЭГ исследовали содержание ЭГ в системе после достижения полимером молекулярной массы 5000. Было установлено, что при постоянных K в диапазоне 0,5-2 и давлениях (50-200 мм рт.ст.) зави-

симости логарифма соотношения ЭГ-ДЭГ в полимере с $M_{cp} = 5000$ от первоначального соотношения ЭГ-ДЭГ в системе описывается линейной зависимостью. В совокупности при разных K и P эти прямые образуют достаточно узкую треугольную область, расширяющуюся в области очень малых содержаний этиленгликоля. Это свидетельствует о сравнительно слабом влиянии величин константы равновесия и давления в указанных практических диапазонах. Вся совокупность результатов при разных P и K можно описать линейным уравнением:

$$\ln p_{Э} = 0,337 - 1,849 \cdot n_{ДЭГ} \quad (9)$$

Коэффициент детерминации зависимости составляет 0,99, стандартные отклонения: свободного члена 0,027; углового коэффициента 0,016.

С помощью уравнения (7) можно рассчитать количество ДЭГ, необходимое для получения полимера с заданным содержанием этиленгликоля.

Мы проанализировали, насколько результаты моделирования соотносятся с результатами экспериментальных исследований. Анализ литературных данных [1-5, 17] свидетельствует, что в процессе гликолиза ПЭТФ степень полимеризации падает после нагревания до 1,5 – 2, то есть, в тех же пределах, что в рассмотренной модели. При отгонке гликоля наблюдается сначала небольшой, а в конце – резкий рост степени полимеризации [17].

С целью выяснения, содержится ли в отгоне после гликолиза диэтиленгликоль, мы провели следующие эксперименты. 62 г ПЭТФ ($n_{cp}=50$) и 34,2 г ДЭГ (50 моль ДЭГ на 1 моль ПЭТФ) нагревали при 160-180° в течение 16 часов, после чего при остаточном давлении 50 мм рт. ст. отогнали и проанализировали 2 порции отгона (соответственно, после отгонки 0-8 и 8-21,5 % моль от количества загруженного диэтиленгликоля). В обеих пробах методом газо-жидкостной хроматографии было обнаружено наличие ДЭГ (соответственно, 20 и 30 %). Это близко к величинам, полученным в результате моделирования

Таким образом, разработанная модель не противоречит имеющимся экспериментальным данным и может быть использована для решения задач проектирования технологии и синтеза систем управления

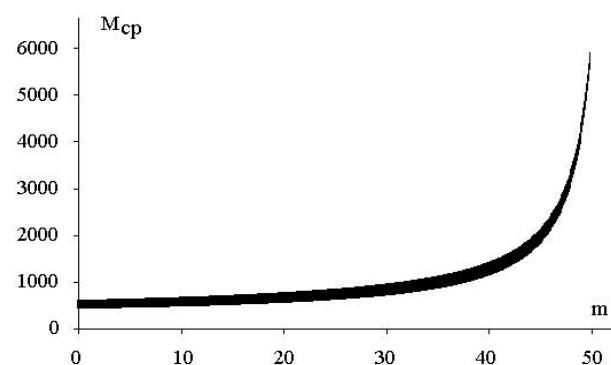


Рис. 1. Зависимость средней молекулярной массы олигомеров от количества отогнанной смеси гликолей. ССП ПЭТФ – 50, мольное соотношение ДЭГ : ПЭТФ = 51:1, давление в системе 100 мм рт.ст.

Таблица 1

Зависимость средней степени полимеризации (ССП) и среднечисловой молекулярной массы (M_{cp}) полимера от количества отогнанного гликоля (моль/моль исходного ПЭТФ) при разных шагах отгонки h . Параметры процесса: ССП ПЭТФ: 50, мольное соотношение ДЭГ : ПЭТФ = 51:1, $K=0,5$; $P = 50$ мм рт.ст.

m	h=0,25 моль		h=0,1 моль		h=0,05 моль		h=0,01 моль	
	ССП	M_{cp}	ССП	M_{cp}	ССП	M_{cp}	ССП	M_{cp}
1	1,69	446	1,69	446	1,69	446	1,69	446
5	1,76	463	1,76	463	1,76	463	1,76	463
10	1,87	490	1,87	490	1,87	490	1,87	490
20	2,21	568	2,21	568	2,21	568	2,21	568
30	2,88	723	2,88	723	2,88	723	2,88	723
40	4,73	1144	4,76	1151	4,73	1144	4,73	1144
45	7,68	1813	7,68	1813	7,68	1813	7,68	1813
49	17,2	3960	17,2	3960	17,2	3960	17,2	3960
49,5	20,5	4712	20,5	4712	20,5	4712	20,5	4712
49,6			21,3	4900	21,3	4900	21,3	4900
49,7			22,3	5104	22,3	5104	22,3	5104
49,8			23,2	5327	23,2	5327	23,2	5327
49,9			24,3	5571	24,3	5571	24,3	5571

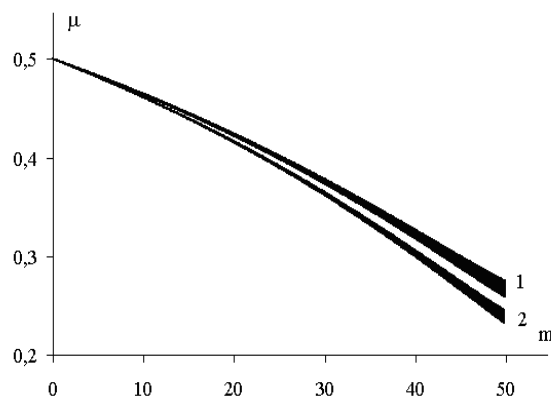


Рис. 3. Зависимость мольной доли этиленгликоля в составе олигомеров от количества отогнанной смеси гликолей. ССП ПЭТФ – 50, мольное соотношение ДЭГ : ПЭТФ = 51:1, давление в системе 50 мм рт.ст. (1) и 200 мм рт.ст. (2)

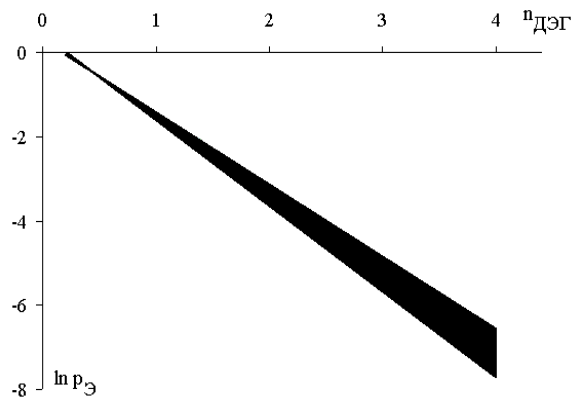


Рис. 4. Зависимость логарифма мольной доли этиленгликоля в жидкой фазе при средней молекулярной массе полимера 5000 от первоначального соотношения ДЭГ-этиленгликоль в системе

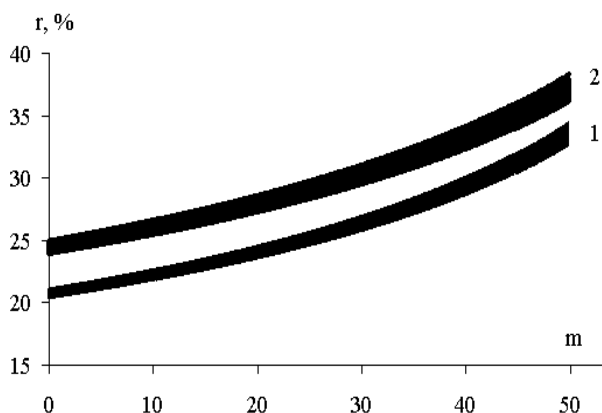


Рис. 2 Зависимость массовой доли диэтиленгликоля в отгоне (r , %) от количества моль отгона на 1 моль ПЭТФ (m). ССП ПЭТФ – 50, мольное соотношение ДЭГ : ПЭТФ = 51:1, давление в системе 50 мм рт.ст. (1) и 200 мм рт.ст. (2)

Литература

1. Klein P. Recycling and recovery of plastics [Text] / P. Klein, J.Brahdrup // Munich – Vienna – N.Y.: Hansen, 1996. – P. 494-504.
2. Carta D. Chemical Recycling of Poly(ethylene terephthalate) (PET) by Hydrolysis and Glycolysis [Text] / G. Cao, C. D'Angeli // Environ Sci & Pollut. Res. – 2003. – V.10, №6. – P. 390-394.
3. Коршак В.В. Равновесная поликонденсация [Текст] / В.В. Коршак, С.В. Виноградова. – М.: Наука, 1968. – 444 с.
4. Oudian G. Principles of polymerization [Text] / G. Oudian. – New Jersey: Wiley Interscienc. – № 4. – 2004. – 812 P.
5. Виноградова С.В. Поликонденсационные процессы и полимеры [Текст] / С.В.Виноградова, В.А. Васнев. – М.: Наука, МАИК «Наука» / Интерпериодика, 2000. – 373 с.

6. Мышкис А.Д. Элементы теории математического моделирования [Текст] / А.Д. Мышкис. – М.: Комкнига, 2007. – 192 с.
7. Самарский А.А. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры [Текст] / А.А. Самарский, А.П. Михайлов. – М.: Физматгиз, 2001. – 320 с.
8. Кафаров В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии [Текст] / В.В. Кафаров. – М.: Высшая школа, 1985. – 448 с.
9. Гартман Т.Н. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов [Текст] / Т.Н.Гартман, Д.В.Клишин. – М.: ИКП «Академкнига», 2006. – 416 с.
10. Ellias H.-G. Polycondensations as Multiple Equilibria [Text] / H.-G. Ellias // J. Macromol. Chem., 1978. - V.A12, № 1. – P. 183-190.
11. Flory P.J. Principles of polymer chemistry [Text] / P.J. Flory// Ithaka: Cornell University. – 1953. - 676 p.
12. Силинг М.И. Поликонденсация: физико-химические основы и математическое моделирование [Текст] / М.И. Силинг. – М.: Химия, 1988. – 256 с.
13. Fontana C. M. Polycondensation equilibrium and the kinetics of the catalyzed transesterification in the formation of polyethylene terephthalate [Text] / C.M. Fontana // J.Polym.Sci, Part A-1: Polymer Chemistry. – 1968. - V. 8, № 8 – P. 2343-2358.
14. Hovenkamp S. G. Kinetic aspects of catalyzed reactions in the formation of poly(ethylene terephthalate) [Text] / S.G. Hovenkamp // J.Polym.Sci. Part A-1: Polymer Chemistry. – 1971.– V. 9, № 12. – P. 3617–3625.
15. Surový J. Vapour-liquid equilibrium in the binary systems formed by ethylene glycol, diethylene glycol, and N-methylpyrrolidone / J.Surový, E.Graczová J.Ovečková // Collect. Czech. Chem. Commun [Text]. – 1989. – V.54, № 11. – P. 2856-2862.
16. Уейлес С. Фазовые равновесия в химической технологии: в 2-х частях. Ч. 2. [Текст] : пер. с англ. – С. Уейлес ; М. : Мир, 1989. – 360 с.
17. Гак В.С. Изучение процесса переэтерификации полиэтилентерефталата диэтиленгликолем [Текст] / В.С. Гак, Ю.П. Кудюков // Вопросы химии и химической технологии. – 2005. - №6. – С. 133-135.

У статті досліджено вплив органічних сполук на термодинамічні характеристики процесу фарбування активними барвниками. Встановлено, що застосування в технології колорування органічних сполук підвищує спорідненість активних барвників до целюлозного волокна

Ключові слова: активні барвники, термодинаміка

В статье исследовано влияние органических соединений на термодинамические характеристики процесса крашения активными красителями. Установлено, что применение в технологии колорирования органических соединений повышает сродство активных красителей к целлюлозному волокну

Ключевые слова: активные красители, термодинамика

In the article the influence of organic compounds on the thermodynamic characteristics of the process of a dyeing is investigated by reactive dyes. It is established that the use of technology in the coloring of organic compounds increases the affinity of reactive dyes for cellulose fiber

Keywords: reactive dyes, thermodynamics

УДК 677.84

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ НА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРАСИЛЬНОЙ СИСТЕМЫ

Л.А. Нестерова

Кандидат технических наук, доцент, докторант
Кафедра химической технологии и дизайна

волокнистых материалов

Херсонский национальный технический университет
Бериславское шоссе, 24, г. Херсон, Украина, 73008

Контактный тел.: 050-675-98-66

E-mail: kate-maiden@mail.ru

Введение

Активные красители являются одним из важнейших классов красителей для крашения и печатания

текстильных материалов из целлюлозных волокон. Наличие ковалентной связи активных центров красителя с нуклеофильными группами волокна обеспечивает получение ярких и прочных окрасок. В ка-