

Excel建模用于混合酸性染料组分的分析

刘平华^{1,2}, 陈建芳¹, 吕小兰², 许克宽², 麦志伟³

(1. 湖南工程学院 化学化工学院, 湖南 湘潭 411100;

2. 广东德美高新材料有限公司, 广东 佛山 528305;

3. 民乐兴源染整厂, 广东 佛山 528213)

摘要: 选用混合组分为酸性黑MR:酸性蓝5R:分散黑EXSF=70:15:15, 对引入分散黑的酸性染料体系进行分析, 通过采用分光光度法检测各组分的最大吸收波长、计算吸光度系数及浓度误差, 对浓度误差可控性进行了探索。同时用Excel表建立了几只弱酸性染料的“吸光度-浓度”基础数据库, 用Excel的矩阵、逆矩阵功能, 计算了混合染液中各组分染料的浓度。结果表明, 混合染料溶液中有分散染料时, 求解误差较大, 若直接忽略分散组分浓度所得酸性染料组分结果误差约5%; 使用Excel表格及利用其矩阵、逆矩阵命令, 可以使得分光光度法分析酸性染料残液组分浓度求解更方便。

关键词: 分光光度法; 酸性染料体系; 分散黑; Excel建模; 浓度分析

中图分类号: TS 190.2

文献标志码: B

文章编号: 1000-4033(2017)11-0049-03

Excel Modeling for Component Analysis of Acid Dyes

Liu Pinghua¹, Chen Jianfang¹, Lv Xiaolan², Xu Kekuan², Mai Zhiwei³

(1. School of Chemistry & Chemical Engineering, Hunan Institute of Engineering, Xiangtan, Hunan 411100, China;

2. Guangdong Dymatic Chemicals High-tech Materials Co., Ltd., Foshan, Guangdong 528305, China;

3. Minle Xingyuan Dyeing and Finishing Factory, Foshan, Guangdong 528213, China)

Abstract: In this paper the mixed dyes system acid black MR:acid blue 5R:disperse black EXSF=70:15:15 was analyzed for the component of acid dye system with disperse black, the maximum absorption wavelength of each component was tested, and the absorbance coefficient and the concentration error were calculated by spectrophotometry to explore the control performance of concentration error. At the same time, the “absorbance-concentration” basic database of several weak acid dyes was established with Excel table, the concentration of dyes in the mixed solution was calculated by Excel matrix and inverse matrix function. The results show that when disperse dyes in mixed dye solution, the solution error is greater, if the concentration of dispersed components is directly ignored, the error of acid dye composition are only about 5%. The use of Excel form and its matrix, inverse matrix command, can make spectrophotometric analysis of mixed acid dyes system residue component concentration analysis more convenient, and has a certain reference value for production.

Key words: Spectrophotometric Analysis; Mixed Acid Dyes System; Disperse Black; Excel Mode; Concentration Analysis

锦氨混纺针织物, 锦纶、氨纶与棉或锦纶、氨纶与黏胶混纺针织物多用作泳衣、内衣面料, 染色工

序大多采用浸渍加工方式。随着染整长车上均匀轧辊的应用, 针织物平幅加工方式逐渐增多^[1-2]。生产

实践中, 仅用酸性染料染锦氨混纺针织物, 氨纶丝会产生“露白”现象, 通常会加入分散染料如分散黑加

作者简介: 刘平华(1977—), 男, 助理工程师, 硕士研究生。主要从事纺织印染助剂的应用研究工作。

通讯作者: 陈建芳(1965—), 女, 教授, 博士。E-mail: cjf1228@aliyun.com。

以盖染^[3]。本文对引入分散黑的酸性染料体系,通过采用分光光度法检测其组分浓度的误差,对误差可控性进行了探索。同时用 Excel 表建立了几只弱酸性染料的“吸光度-浓度”基础数据库,用 Excel 的矩阵、逆矩阵功能,简化了纯组分混合染液叠加原理^[4]的求解过程,以期对实际生产起一定的指导作用。

1 试验

1.1 试验材料与仪器

染化料:酸性黑 MR、酸性蓝 5R、分散黑 EXSF(浙江闰土股份有限公司),冰醋酸(分析纯,市售),去离子水(自制,等同 3 级水标准)。

仪器:722 型分光光度计(山东纺织科学研究所),UV759S 型紫外分光光度计(上海精密科学仪器有限公司),JA2003 型电子天平(丹纳赫西特传感工业控制天津有限公司),SH2129B 型电磁炉(美的集团有限公司)。

1.2 试验方法

1.2.1 染液配制

用热水溶解酸性黑 MR、酸性蓝 5R 染料,分别配制 1%酸性染料母液,稀释定容至 2×10^{-5} g/L。用冷水配制 1%分散黑 EXSF 染液,置于磁力搅拌器上充分搅拌,溶解定容至 2×10^{-5} g/L。用配制好的酸性染料、分散染料稀溶液按预定比例混合,配制酸性黑 MR:酸性蓝 5R:分散黑 EXSF=70:15:15 的混合染液。

1.2.2 确定最大吸收波长及吸光系数

最大吸收波长的确定:用分光光度计测试 1.2.1 染料稀溶液的吸光度 A_i ,找出最大吸光度 $A_{\max}$ 下的最大吸收波长 $\lambda_{\max}$,吸光系数的确定:依据所测的各酸性染料的最大吸收波长,测试 1.2.1 染料稀溶液在各自染料最大吸收波长 $\lambda_{\max}$ 下对

应的吸光度。各波长 $\lambda_{\max}$ 下对应的吸光系数 K 计算公式见式(1)。

$$K = \frac{A}{LC} \quad (1)$$

式中: A 为最大吸收波长下的吸光度; L 为测试比色皿厚度,cm; C 为染料浓度,g/L。

1.2.3 各组分浓度计算

混合染液中,弱酸性染料混合溶液的吸光度等于各组分吸光度之和见式(2)。

$$A = \sum (A_i \times K_i) \quad (2)$$

式中: A 为弱酸性染料混合溶液在给定波长下的总吸光度; A_i 为混合溶液中某一组分在给定波长下的吸光度; K_i 为混合溶液中某一组分在给定波长下的吸光度系数。

该公式适用于低浓度均匀非散射体系溶液浓度的分析,且在一定条件下具有“加和性、叠加性”^[3-4]。依据 1.2.2 求出的吸光系数 K 为常数,设混合组分浓度值为自变量,对应的吸光度 A 为因变量,所测出的值即为因变量值。将式(1)、式(2)建立方程组,求解自变量,即得出混合染液中各组分浓度。

1.3 染厂应用实践

对混入少量分散黑的酸性染料混合溶液进行试验,配制染厂现用酸性染料稀溶液、酸性染料混合稀溶液、混合(分散黑)染液稀溶液,并用分光光度计测试,建立酸性染料基础光学数据并测试各组分浓度并与实际理论浓度比较,利用 Excel 的矩阵、逆矩阵功能,计算混合溶液中各组分染料的浓度。

2 结果与讨论

2.1 确定最大吸收波长及吸光系数

配制任意低浓度的单支酸性染料分别用 722 型分光光度计、UV759S 型紫外分光光度计测试酸性黑 MR、酸性蓝 5R 最大吸收波长,结果见表 1。

表 1 染料最大吸收波长

染料	722 型分光光度计/ nm	UV759S 型 紫外分光光度计/nm
酸性黑 MR	570	571
酸性蓝 5R	574	574

从表 1 可知,两种方法所测染料的最大吸收波长非常接近,由于仪器的精密度不同,使二者的最大吸收波长稍微有些差别,但差别不大。UV759S 型紫外分光光度计^[6]提供了另一种更快捷的方式,可以选择波谱模式,直接从波谱图曲线上找出单只酸性染料稀溶液的最大波长,在最大吸收波长下对应的吸光度可计算出单只染料对应的吸光度系数,结果见表 2。

2.2 混合染液各组分浓度计算

测试混合染液中各组分浓度,酸性黑 MR:酸性蓝 5R:分散黑 EXSF=70:15:15;配制的总浓度为 2×10^{-5} g/L,测试结果见表 3。

分散染料溶液是不溶或微溶于水的体系,忽略其体系分散属性,假定低浓度分散染液满足吸光度“叠加原理”,由表 2 吸光系数、表 3 吸光度数据根据式(1)、式(2)建立方程组,求解得各组分浓度及误差,从表 3 可知,酸性染料溶液中有分散染料,求解结果误差很大,不能满足生产需要。该方法不适用含分散染料溶液。因此,对混有分散染料的酸性染液体系,需分离出分散染料。

2.3 混合染液各组分浓度修正

假定混合溶液中没有分散黑 EXSF,建立 2 个联合方程,求解得各组分浓度及误差见表 4。

如果直接忽略酸性黑 MR:酸性蓝 5R:分散黑 EXSF=70:15:15 中分散组分浓度所得酸性染料组分结果误差约 5%,误差较小。因此,可以先采用膜过滤等方式剔除分

散染料的影响,用分光光度法分析锦氨织物的浸轧连续染色加工技术残液中各组分浓度。

2.4 Excel 建模分析混合染料组分

用 Excel 建模对工厂生产实践中混合染料的组分进行分析,首先建立单只染料的基础数据,然后利用 Excel 矩阵逆矩阵功能计算混合染液各组分浓度。

2.4.1 基础数据库的建立

在 Excel 表中,按从小到大顺序建立系列波长 380~780 nm,在第一行,输入染料名称、第二行输入对应浓度、第 3 行输入公式(得出最大波长)。本示例,选择第 4 行至第 211 行为输入吸光度区域,以 B 列第 6 行建立公式为:IF(MAX(B7:B211)>0,INDEX(\$A4:\$A211,MATCH(MAX(B7:B211),B7:B211,0)),0),输入系列波长下吸光度后,则自动得出酸性黑 MR 最大吸收波长为 572 nm。在对应 B7:B211 的吸光系数区域,按公式(1)计算吸光系数,本实例酸性黑 MR 对应区域 F4:F211 自动计算对应的吸光系数,如图 1 所示。同理,建立其他酸性染料吸光度基础数据及对应区域公式。

2.4.2 利用 Excel 计算混合染液各组分浓度

对酸性黑 MR:酸性蓝 5R:分散黑 EXSF=70:15:15 混合染液中各组分浓度进行求解。参照图 2,新建 Excel 表,在酸性染料二拼或 3 拼“对应行、列、区域”系列引用 2.4.1 基础数据库的数据,分别输入:染料名称、最大吸收波长、吸光系数。最右侧输入混合染液在不同波长下的吸光度。然后用“minverse”命令,在 Excel 表中求出对应 [K11...Knn] 的逆矩阵;再用“mmult”命令,在 Excel 表中(最右列)求出 [K11...Knn] 逆矩阵的系

表 2 单只染料的最大吸收波长、吸光度、吸光度系数

染料	波峰范围/nm	最大吸收波长/nm	吸光度	吸光系数
酸性黑 MR	565~579	571	0.541 0	13.53
酸性蓝 5R	556~575	566	1.042 0	26.05
分散黑 EXSF	572~612	589	0.484 4	12.11

表 3 UV759S 型紫外分光光度计测混合染液各组分浓度及误差

染料	$\lambda_{\max}/\text{nm}$	吸光度	理论浓度/(g·L ⁻¹)	实测浓度/(g·L ⁻¹)	误差/%
酸性黑 MR	571	0.587 1	2.82×10^{-2}	2.51×10^{-2}	-11.10
酸性蓝 5R	566	0.585 3	6.05×10^{-3}	7.56×10^{-3}	24.98
分散黑 EXSF	589	0.553 7	6.12×10^{-3}	1.17×10^{-3}	-80.82

表 4 UV759S 型紫外分光光度计测混合染液各组分浓度修正及误差

染料	$\lambda_{\max}/\text{nm}$	吸光度	理论浓度/(g·L ⁻¹)	实测浓度/(g·L ⁻¹)	误差/%
酸性黑 MR	571	0.587 1	2.70×10^{-2}	2.82×10^{-2}	-4.40
酸性蓝 5R	566	0.585 3	5.72×10^{-3}	6.05×10^{-3}	-5.35

A	B	C	D	E	F	G	H
染料	酸性黑MR	酸性蓝5R	分散黑EXSF		酸性黑MR	酸性蓝5R	分散黑EXSF
浓度 g/L	0.04	0.04	0.04		.04	0.04	0.04
$\lambda_{\max}$	572 nm	566 nm	588 nm		吸光系数		
564 nm							
566 nm	0.5379	1.042	0.4783		13.45	26.05	11.96
568 nm							
572 nm	0.541	1.038	0.4748		13.53	25.95	11.87
574 nm							
588 nm	0.5079	0.9523	0.4844		12.70	23.81	12.11

图 1 单只染料最大吸收波长及吸光度系数计算实例

A	B	C	D	F	G	H	I	J
残液组份	酸性克MR	酸性兰5R	待测染液	残液组份	酸性克MR	酸性兰5R	fensan克	待测染液吸
开稀倍数	1			开稀倍数	1			光度
572 nm	13.53	25.95	0.5871	572 nm	13.53	25.95	11.87	0.5871
566 nm	13.45	26.05	0.5853	566 nm	13.45	26.05	11.96	0.5853
588 nm				588 nm	12.70	23.81	12.11	0.5537
二拼混逆矩阵				三拼混逆矩阵				组份浓度
572 nm	7.7446	-7.7149	0.03134	572 nm	6.9701	-7.1676	0.2453	0.0328
566 nm	-3.9979	4.0210	0.00629	566 nm	-2.4946	2.9086	-0.4762	0.0034
				588 nm	-2.4040	1.6953	0.7615	0.0046

(a) 2 组分拼混

(b) 3 组分拼混

图 2 Excel 计算混合染液各组分浓度

列解,此解即表示所测稀溶液对应各组分酸性染料的浓度,乘以过程中总稀释倍数,即得待测组分浓度。

3 结论

3.1 用分光光度法定量分析染色残液,混合染料溶液中有分散染料时,求解误差很大,若直接忽略分散组分浓度所得酸性染料组分误差约 5%,可以先采用膜过滤等方式剔除分散染料的影响,用分光光度法分析残液中各组分浓度。

3.2 使用 Excel 表格及利用其矩阵、逆矩阵命令,可以使分光光度法分析酸性染料残液组分浓度的求解更

方便,对生产有一定的参考价值。

参考文献

- [1]徐顺成,杨大千,杨华.针织物平幅连续化湿处理加工的设备与工艺[J].针织工业,2005(5):19-21.
- [2]王深喜,何欢,李世琪,等.棉针织物平幅双堆连续化练漂加工技术[J].针织工业,2016(2):44-48.
- [3]宋玉兰,龚正君,平倩,等.紫外可见分光光度法研究染料的吸附性能[J].产业与科技论坛,2011(9):76-78.
- [4]于雪莲.分光光度法在多组分染料调色中的应用[J].染料与染色,2009(3):39-41,56.

收稿日期 2017 年 5 月 2 日