



分散蓝 354 和分散彩蓝 QS-B 匀染性的影响因素分析

万 慧¹,余培泽²,钱 涛³,陈维国¹,崔志华¹

(1.浙江理工大学,a.生态染整技术教育部工程研究中心;b.先进纺织材料与制备技术教育部重点实验室,杭州 310018;
2.传化智联股份有限公司,杭州 311215;3.杭州吉华高分子材料股份有限公司,杭州 311228)

摘 要:分散蓝 354 和分散彩蓝 QS-B 对涤纶进行染色时易产生染色不匀现象;为探究这 2 种染料匀染性差的原因,以匀染性能优良的分散蓝 60 为参照,对影响染料匀染性的因素进行分析,评价染料的匀染性,测试高温分散稳定性、透染性、动力学及热力学性能,模拟计算分子晶胞参数,并测试移染性。结果表明:分散蓝 60 的分子体积小、半染时间短,对涤纶进行染色时表现出良好的扩散性与移染性,使得匀染性能优良;分散蓝 354 分子平面性较好,对涤纶的标准亲和力较大;分散彩蓝 QS-B 分子体积较大,扩散性能较差,使得两者匀染性不佳。该研究结果可为提升分散染料的匀染性提供参考。

关键词:分散染料;涤纶;染色热力学;染色动力学;移染性;匀染性

中图分类号:TS193.1

文献标志码:A

文章编号:1673-3851(2023)07-0449-08

引文格式:万慧,余培泽,钱涛,等.分散蓝 354 和分散彩蓝 QS-B 匀染性的影响因素分析[J].浙江理工大学学报(自然科学),2023,49(4):449-456.

Reference Format: WAN Hui, YU Peize, QIAN Tao, et al. Analysis of influencing factors on levelness of Disperse Blue 354 and Disperse Blue QS-B[J]. Journal of Zhejiang Sci-Tech University, 2023, 49(4): 449-456.

Analysis of influencing factors on levelness of Disperse Blue 354 and Disperse Blue QS-B

WAN Hui¹, YU Peize², QIAN Tao³, CHEN Weiguo¹, CUI Zhihua¹

(1a.Engineering Research Center for Eco-Dyeing & Finishing of Textiles, Ministry of Education;

1b.Key Laboratory of Advanced Textile Materials and Manufacturing Technology, Ministry of Education, Zhejiang Sci-Tech University, Hangzhou 310018, China; 2.Transfar Zhilian Co., Ltd., Hangzhou 311215, China; 3.Hangzhou Jihua Polymer Material Co., Ltd., Hangzhou 311228, China)

Abstract: Disperse Blue 354 and Disperse Blue QS-B are prone to uneven dyeing when used to dye polyester fibers. In order to explore the reasons for the poor levelness of these two dyes, we took Disperse Blue 60 with excellent levelness as reference, analyzing the factors affecting levelness from the dyes themselves. Specifically, we evaluated the levelness of the dyes, tested the high-temperature dispersion stability, dye penetration, kinetics and thermodynamic properties, simulated and calculated the molecular cell parameters, and tested the dye transfer. It is shown that, Disperse Blue 60 has a small molecular volume and a short half-dyeing time. When dyeing polyester, it shows good diffusivity and migration, which makes the level dyeing performance excellent. Disperse blue 354 has good planarity and high standard affinity for polyester, and Disperse Blue QS-B has a large molecular volume and poor diffusion

收稿日期:2022-10-17 网络出版日期:2023-04-10

基金项目:国家自然科学基金项目(21808210);浙江省“尖兵”“领雁”研发攻关计划项目(2023C01096);浙江省重点研发计划项目(2021C01058)

作者简介:万 慧(1999—),女,安徽宿州人,硕士研究生,主要从事纺织化学与染整方面的研究。

通信作者:崔志华,E-mail:zhhcui@zstu.edu.cn

performance, which makes their levelness poor. The conclusion of this study can provide reference for improving the levelness of disperse dyes.

Key words: disperse dyes; polyester; dyeing thermodynamics; dyeing kinetics; migration; levelness

0 引言

涤纶具有优良的物理化学性能,在合成纤维中占据着重要地位。分散染料与涤纶分子存在较强的亲和力,是涤纶的专用染料。分散染料中蓝色系染料品种较少,主要包括蒽醌型、偶氮型和杂环型。分散蓝 60 是传统的蓝色蒽醌型染料,染色性能优异,应用较为成熟,但生产成本偏高。含有杂环结构的蓝色分散染料,如分散蓝 354、分散彩蓝 QS-B 等,具有发色力高、色彩鲜艳、生产成本低等特点,在生产应用中有取代分散蓝 60 的趋势^[1]。但是分散蓝 354、分散彩蓝 QS-B 易发生染色不匀的现象,甚至出现色花、色点等瑕疵。

分散染料染涤纶通常会经历染料转变为单分子态,再通过扩散和吸附行为进入纤维的过程。在此过程中,如果染料分子在纤维上显著聚集,那么会在宏观上表现为织物的颜色不匀^[2]。影响织物颜色均匀性的因素主要有染色工艺、织物、染料等。对于特定织物,染色工艺会在一定程度上影响所染织物颜色的均匀性,所用的染料会显著影响布面颜色的均匀性。陆辉^[3]、梁静等^[4]发现,分散染料的不同晶型

会影响分散稳定性、上染速率等性能;展义臻^[5]发现,染料的分子结构与相对分子质量会影响上染速率和上染量。因此,染料的分子结构会对上染速率、与纤维的亲和力等染色性能产生影响,而染色性能的不同会使得染料的匀染性能存在差异^[6-8]。

本文以匀染性能优良的分散蓝 60 为参照,测试了分散蓝 354、分散彩蓝 QS-B 和分散蓝 60 在染色热力学、动力学等方面的性能,结合分子晶胞参数的模拟计算结果,从染料的分子结构角度分析了染料上染性能对匀染性方面的影响,从而为提升分散蓝 354 和分散彩蓝 QS-B 等蓝色杂环染料的匀染性提供参考,同时为研究染料分子结构与匀染性能之间的构效关系提供参考。

1 实验部分

1.1 实验材料、试剂及仪器

材料:涤纶(米西丁,平方米质量 150 g/m²,纤维平均半径 10.57 μm)购自传化智联股份有限公司;锆珠(直径 0.5 mm)购自浙江金琨锆业有限公司;染料滤饼分散蓝 354、分散彩蓝 QS-B 和分散蓝 60 购自吉华集团有限公司,分子结构式如图 1 所示。



图 1 3 种蓝色分散染料的分子结构式

试剂:丙酮(浙江汉诺化工科技有限公司);冰醋酸(杭州高晶精细化工有限公司);醋酸钠(无锡市展望化工试剂有限公司);苯酚(上海泰坦化学有限公司);氯苯和氢氧化钠(上海麦克林生化科技有限公司);亚甲基双萘磺酸钠(NNO,安阳市双环助剂有限责任公司);保险粉(上海梯希爱化成工业发展有限公司)。以上试剂均为分析纯。

实验仪器:DYE-24 型可调向式打色机(上海千立自动化设备有限公司)、JJ-1 精密增力电动搅拌器(常州普天仪器制造有限公司)、Y172 型哈氏纤维切片器(常州纺织仪器厂)、KH-7700 三维(3D)视频显

微镜(日本浩视有限公司)、FA224 型电子分析天平(上海舜宇恒平科学仪器有限公司)、SF600X 型测色配色仪(美国 DataColor 公司)和 UV-2600 型紫外可见分光光度计(日本岛津公司)。

1.2 染色工艺

染料预处理:取分散蓝 354 染料滤饼 1.00 g、NNO 2.00 g、锆珠 40.00 g、去离子水 40.0 mL,混合,研磨 12 h 后过滤洗涤。滤液和洗涤液一并转移至 500 mL 容量瓶中,得到 2 g/L 的分散染料染液。分散彩蓝 QS-B 和分散蓝 60 的预处理方法同分散蓝 354。

染色工艺:涤纶 1.00 g,分散蓝 354 用量 6%

(owf),染液 pH 值 4.5~5.5,浴比 1:40,30℃始染,升温速率为 2℃/min,染色温度分为 110℃和 130℃,110℃时保温 600 min,130℃时保温 60 min;之后以 2℃/min 降温至 60℃,水洗,最后得到染色涤纶。分散彩蓝 QS-B 和分散蓝 60 的染色方法同分散蓝 354。

1.3 测试方法

1.3.1 匀染性评价

按照 1.2 所述工艺染色,染色温度 130℃,为清晰显示 3 种蓝色分散染料的匀染性差异,将浴比调小至 1:10。采用测色配色仪在 D65 光源和 10°视角下测量染色涤纶在 400~700 nm 波长下的 K/S 值,并取最大吸收波长处的 K/S 值。在染色涤纶上随机取 10 个点,得到各点的 K/S 值,根据统计学方法计算该组 K/S 值的平均值 $\overline{(K/S)}$ 与标准偏差 S_r [9]。 S_r 可用来评价染色涤纶的匀染性, S_r 越小,说明匀染性越好。 $\overline{(K/S)}$ 和 S_r 的计算方法见式(1)和式(2):

$$\overline{(K/S)} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (K/S)_i \quad (1)$$

$$S_r = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n \left[\frac{(K/S)_i}{\overline{(K/S)}} - 1 \right]^2}{n-1}} \quad (2)$$

其中:样本容量 n 为 10。

1.3.2 高温分散稳定性测试

配制 100.0 mL 染液,染料为 0.5 g/L,pH 值 4.5~5.5。对染液进行高温处理,处理工艺为 50℃始染,以 3℃/min 升至 130℃,保温 30 min,再以 3℃/min 降温至 90℃。同时,将两张中性滤纸叠放于布氏漏斗中,用 90℃去离子水预热滤纸与布氏漏斗,将高温处理后的染液抽滤,晾干后观察上层滤纸表面的染料聚集情况。聚集的颗粒越细少,表明高温分散性能越好。

1.3.3 透染性实验

为方便观察染料对 PET 的透染情况,自制 PET 长丝,将 PET 吹塑瓶沿径向裁剪出长度为 8 cm、宽度和厚度相近的长丝。将 PET 长丝与涤纶一同放入染液中,按照 1.2 所述工艺染色,其中保温温度为 135℃,保温时间为 60 min。用哈式切片器对 PET 长丝进行切片,置于三维视频显微镜下观察。

1.3.4 染色热力学实验

标准工作曲线绘制:分别配制 3 种蓝色分散染料在不同浓度下的丙酮溶液,通过紫外分光光度计测量其最大吸收波长对应的吸光度,绘制散点图,线性拟合后得到标准工作曲线。

上染量测定:将 0.04 g 染色涤纶和未染涤纶剪碎,滴加氯苯和苯酚质量比为 1:1 的混合溶液 1.0 mL,于沸水中加热至溶解;取出冷却至室温后,向溶液滴加 2.5 mL 丙酮,边滴加边充分搅拌;静置分层,分离出上清液,稀释定容;以未染涤纶处理液为参比,测定染色涤纶处理液的吸光度,最后根据工作曲线计算得到染料对涤纶的上染量。

恒温上染速率曲线绘制:按照 1.2 所述方法配制染液 12 份,准确称取 1.00 g 涤纶 12 份,待染液升温至所需温度后立即放入涤纶,保温不同时间取出染色涤纶。按 1.3.4 所述上染量测定方法,计算不同时间 t 取出的涤纶的分散染料上染量 C_t ,绘制上染速率曲线。

动力学参数的计算:根据恒温上染时间 t 和对应的上染量 C_t ,进一步计算得到 t/C_t 关于 t 的线性拟合方程, $\text{tg}\alpha$ 为线性方程斜率, b 为截距。根据式(3)~式(5),可以计算得出 C_∞ 、 k 、 $t_{1/2}$ [10]:

$$C_\infty = 1/\text{tg}\alpha \quad (3)$$

$$k = 1/(bC_\infty^2) \quad (4)$$

$$t_{1/2} = 1/(kC_\infty) \quad (5)$$

其中: C_∞ 为平衡时纤维上的染料浓度,即平衡上染量,mg/g; k 是染色速率常数,g/(mg·min); $t_{1/2}$ 为半染时间,min。

染色时进行充分搅拌,扩散系数可用希尔(Hill)公式[11]计算:

$$\frac{C_t}{C_\infty} = 1 - 4 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-v_n^2 Dt/r^2}}{v_n^2} = 1 - 4 \left(\frac{1}{5.785} e^{-5.785 Dt/r^2} + \frac{1}{30.47} e^{-30.47 Dt/r^2} + \frac{1}{74.89} e^{-74.89 Dt/r^2} + \frac{1}{130.9} e^{-130.9 Dt/r^2} + \dots \right) \quad (6)$$

其中: D 为扩散系数, m^2/min ; t 为染色时间,min; r 为纤维半径, μm ; v_n 是上染百分率的函数。

1.3.5 染色动力学实验

染色工艺:涤纶 0.04 g、浴比均为 9000:1,染料用量分别为 1%、2%、3%、4% (owf),升温速率为 2℃/min。

布样染色结束后水洗,晾干称重,用 1.3.4 所述上染量测定方法,计算 4 组染色平衡后染料在纤维上的浓度 $[D]_f$,进而求出染料在染液中的浓度 $[D]_s$ 。以 $[D]_f$ 为纵坐标、 $[D]_s$ 为横坐标,绘制吸附等温线,并对吸附等温线中的点进行线性拟合。拟合曲线的斜率为分配系数 K ,染料和纤维间的标准亲和力和 $-\Delta\mu_0$ [12] 按式(7)计算:

$$-\Delta\mu_0 = RT\ln[D]_f/[D]_s = RT\ln K \quad (7)$$

其中: R 是摩尔气体常数, 即 $8.314 \text{ J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$; T 是绝对温度, K 。

1.3.6 分子晶胞参数计算

使用了 Gaussian 和 Multiwfn 程序进行计算, 运用密度泛函理论的 B3LYP 函数, 结合 6-31G 基组, 对染料进行能量构型方面的优化, 得到其在稳定构型下的晶胞参数, 进而求得体积^[13]。

1.3.7 移染性测试

移染性按照《分散染料 移染性的测定 高温染色法》(GB/T 10663—2014)进行测定。

2 结果与讨论

2.1 匀染性评价

染色涤纶的标准偏差 S_r 计算结果见表 1。从表 1 可以发现, 在色深差异不明显的情况下, 分散蓝 60 染色涤纶值的 S_r 比分散彩蓝 QS-B 和分散蓝

354 的小很多, 表明在小浴比时, 分散蓝 60 相较于分散蓝 354 和分散彩蓝 QS-B 有更好的匀染性, 且分散蓝 354 的匀染性最差。

表 1 3 种蓝色分散染料均匀度的比较

染料	(K/S)	S_r
分散蓝 60	5.994	0.0340
分散蓝 354	7.532	0.1408
分散彩蓝 QS-B	7.842	0.1314

2.2 高温分散稳定性分析

高温分散稳定性是分散染料性能的重要指标之一。测试 3 种蓝色分散染料经高温处理后染液的分散稳定性, 滤纸上染料聚集的情况见图 2。由图 2 可知: 分散蓝 60、分散蓝 354 的高温分散稳定性较差, 染液在进行高温上染时, 容易发生大量聚集; 分散彩蓝 QS-B 的染液有较好的分散稳定性, 高温染色过程较少发生聚集, 其原因是染料分子不同的结构特性导致了高温分散稳定性的差异^[14]。

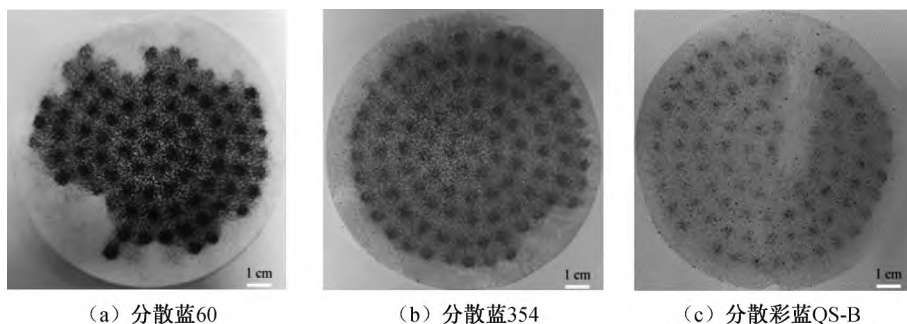


图 2 滤纸上染料聚集情况

2.3 透染性分析

染色后 PET 长丝切片的颜色分布如图 3 所示。从图 3 中可以发现: 3 张切片的中心区域均是无色的, 说明长丝的结晶度较高; 3 种蓝色分散染料的分子很少扩散进入长丝内部, 没有实现透染, 分散蓝 60 染色后长丝切片的蓝色, 由外向内逐渐变浅; 而两种蓝色杂环分散染料染色后, 长丝切片的颜色集中在边缘的浅浅一层, 即蓝色杂环分散染料对 PET

长丝的染色会出现极明显的环染现象。由此可以初步判断, 分散蓝 60 比分散蓝 354 和分散彩蓝 QS-B 对 PET 的扩散性更佳。这是因为较大的分子质量影响了扩散性能^[12], 使染料分子很难进入长丝内部, 因而大部分都停留在长丝的表面。关于这 3 种蓝色分散染料扩散性能的具体情况, 下文通过染色动力学的测算作进一步分析。

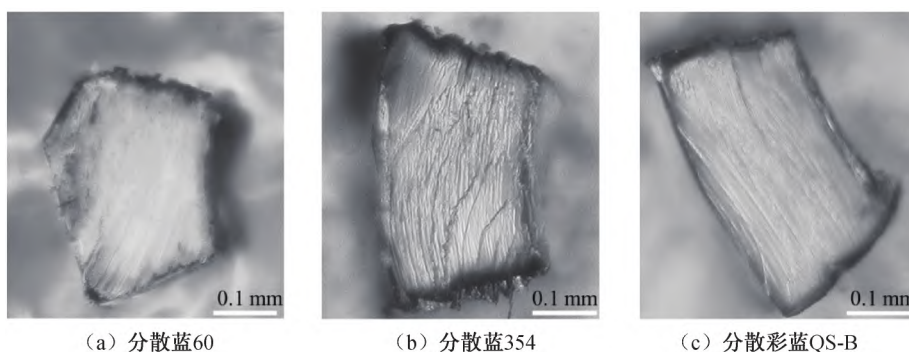


图 3 染色后的 PET 长丝切片照片

2.4 染色动力学分析

2.4.1 恒温上染速率曲线

绘制 3 种蓝色分散染料在丙酮中的标准工作曲线,得到吸光度与上染量间的对应关系,结果如表 2 所示。

表 2 3 种蓝色染料在丙酮中的标准工作曲线

染料	标准工作曲线	R^2
分散蓝 60	$y=51.01x-0.2077$	0.9934
分散蓝 354	$y=139.92x-0.1202$	0.9936
分散彩蓝 QS-B	$y=137.76x+0.0102$	0.9991

注: y 表示吸光度; x 表示染料的质量浓度, g/L [10]。

本文从染色动力学角度研究 3 种蓝色分散染料上染涤纶的过程,根据 1.3.4 中恒温上染速率曲线绘制的方法,并结合表 2 的数据,分别得到了染料在 110 °C 和 130 °C 的上染速率曲线,如图 4 所示。

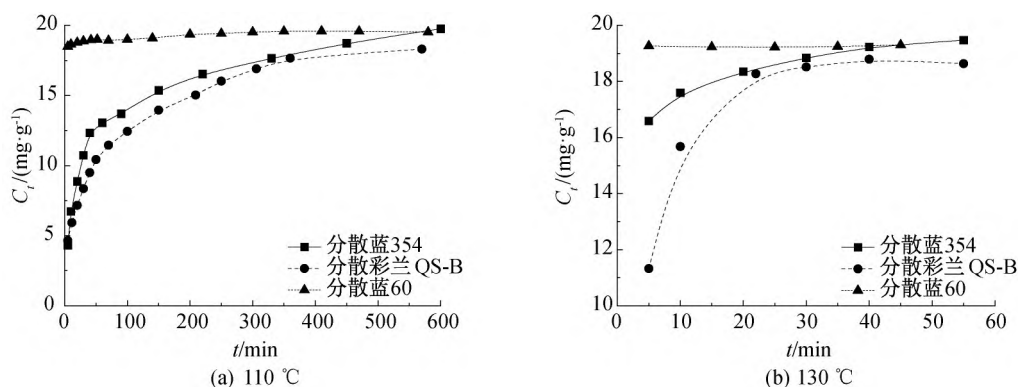


图 4 3 种蓝色分散染料的上染速率曲线

2.4.2 染色动力学参数

将上染速率曲线的数据进行变换,得到 t/C_t 关于 t 的线性拟合曲线,结果如图 5 所示。从图 5 可

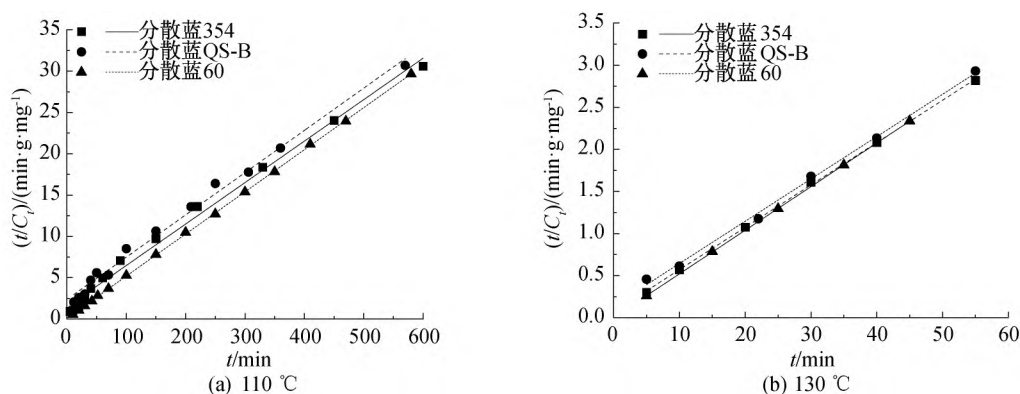


图 5 3 种蓝色分散染料的准二级动力学拟合曲线

将图 5 得到的斜率与截距信息分别代入式 (3)~(5),可以得出 3 种蓝色分散染料的动力学参数。已知纤维半径,将浓度数据代入式 (6),可求得不同时刻对应的扩散系数,然后计算出平均值,最终得到的动力学参数,结果见表 3。通过表 3 可以看

分散染料对涤纶的上染是一个包含吸附和解吸的动态过程。在上染的初始阶段,染料在染液中的浓度比在纤维上高得多,吸附速率大于解吸速率,所以染料上染纤维很快 [15]。对比图 4 中分散染料在 110 °C 和 130 °C 的上染速率曲线可以发现:同一染料在 110 °C 时需要经历一段上染率逐渐升高的阶段,而在 130 °C 的情况下上染率随时间延长而迅速提高。随着染料进一步上染,染液中染料浓度降低,解吸速率逐渐增大,直至最后解吸速率等于吸附速率,达到上染平衡。温度升高,同一染料达到上染平衡所需的时间变短,而上染率方面变化很小;在 110 °C 和 130 °C 染色时,分散蓝 60 均很快达到上染平衡,分散蓝 354 达到上染平衡的时间稍长,上染速率稍快,分散彩蓝 QS-B 的上染曲线最为平缓。

以看出,在 110 °C 和 130 °C 两种温度下,曲线均呈现良好的线性,表明涤纶对这 3 种蓝色分散染料的吸附较为符合准二级动力学模型。

出,温度对扩散过程影响较大,3 种蓝色分散染料在吸附温度由 110 °C 升至 130 °C 时,尽管染料的平衡吸附量 C_∞ 变化很小,但染色速率常数 k 和扩散系数 D 会增大约一个数量级,半染时间 $t_{1/2}$ 也相应缩短。这是因为染色温度升高,涤纶的分子链段运动

更加剧烈,纤维孔隙变大,并且染料分子的热运动更加强烈,更容易扩散到纤维内部的非结晶区^[15]。

不同染料的动力学参数有较大差别。以 110 ℃ 的吸附为例,分散蓝 60 的半染时间 $t_{1/2}$ 约为 2 min,而分散蓝 354 的半染时间 $t_{1/2}$ 接近 30 min,分散彩

蓝 QS-B 的半染时间 $t_{1/2}$ 则超过 40 min;分散蓝 60 扩散系数 D 最大,分散蓝 354 其次,分散彩蓝 QS-B 最小。综上可知,分散蓝 60 的扩散性能最佳,上染较快,分散蓝 354 的扩散性能一般,而分散彩蓝 QS-B 的扩散性能较差。

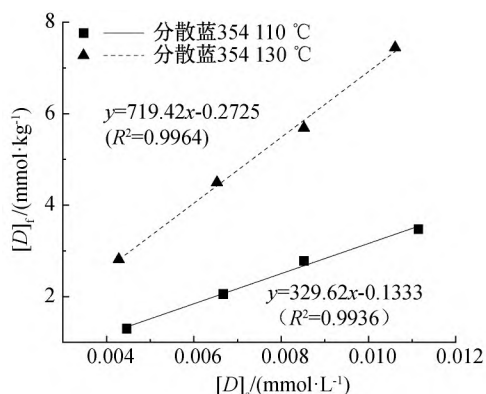
表 3 3 种蓝色分散染料的动力学参数

染料	温度/℃	t/C_t 关于 t 的 线性拟合方程	R^2	$C_\infty/(\text{mg}\cdot\text{g}^{-1})$	$k \times 10^3/$ $(\text{g}\cdot\text{mg}^{-1}\cdot\text{min}^{-1})$	$t_{1/2}/\text{min}$	$D \times 10^{14}/$ $(\text{m}^2\cdot\text{min}^{-1})$
分散蓝 60	110	$y=0.0510x+0.0953$	0.9999	19.6078	27.2929	1.8686	1.1665
	130	$y=0.0519x+0.0013$	0.9999	19.2678	2072.0126	0.0250	8.4401
分散蓝 354	110	$y=0.0502x+1.4427$	0.9889	19.9203	1.7468	28.7383	0.3079
	130	$y=0.0503x+0.0678$	0.9996	19.8807	37.3170	1.3479	2.5840
分散彩蓝 QS-B	110	$y=0.0511x+2.3687$	0.9912	19.5695	1.1024	46.3533	0.1397
	130	$y=0.0503x+0.1407$	0.9973	19.8807	17.9822	2.7972	1.6327

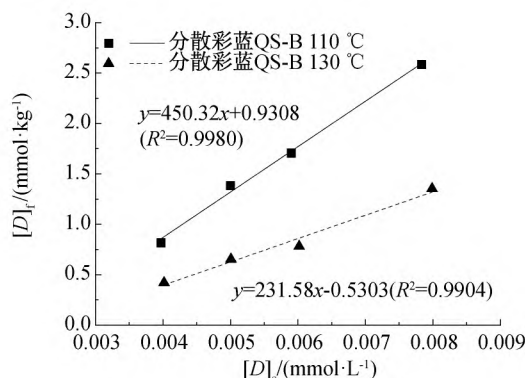
2.5 染色热力学分析

绘制 3 种蓝色分散染料在 110 ℃ 和 130 ℃ 的吸

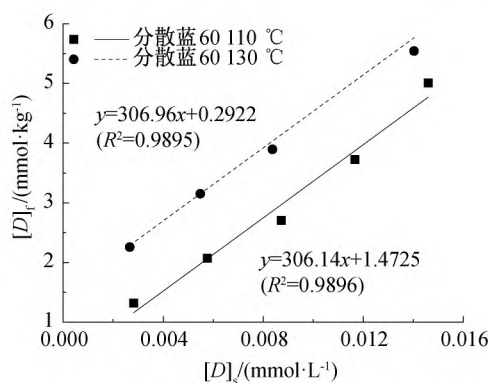
附等温线,结果如图 6 所示。图 6 中曲线的线性相关系数较大,染料对涤纶的吸附符合能斯特模型。



(a) 分散蓝 354



(b) 分散彩蓝 QS-B



(c) 分散蓝 60

图 6 3 种蓝色分散染料的吸附等温线

3 种蓝色分散染料的热力学参数见表 4。从表 4 可以发现,3 种蓝色分散染料在温度由 110 ℃ 变为 130 ℃ 时,分配系数和标准亲和力的变化规律并不一致。由式(7)可知分配系数 K 为 $[D]_f/[D]_s$,温度升高,有利于分散染料在水中的溶解,所以 $[D]_s$ 会增大。从动力学分析可知,分散蓝 354 的扩散性能适中,温度升高,单分子态分散蓝 354 更易扩散进

入纤维内部,故 $[D]_f$ 也增大,且增大程度大于 $[D]_s$,最终分散蓝 354 的分配系数增大;分散彩蓝 QS-B 的扩散性能不佳,温度升高对染料进入纤维内部的积极作用较小,最终 $[D]_f$ 的增加量小于 $[D]_s$,分配系数减小;因为分散蓝 60 极佳的扩散性能,温度对 $[D]_f$ 与 $[D]_s$ 的影响差别不大,故分配系数几乎未变。分散染料的常规染色温度为 130 ℃,故比

较表 4 中 130 ℃ 下 3 种蓝色分散染料对涤纶的标准亲和力可以发现:分散蓝 354 在涤纶上的标准亲和力最大,分散蓝 60 的标准亲和力次之,分散彩蓝 QS-B 的标准亲和力最小,表明在该温度下,分散蓝 354 分子有较强的从染液转移向纤维的趋势,染料分子与纤维之间有较强的相互作用。

表 4 3 种蓝色分散染料的热力学参数

染料	$K/(\text{L} \cdot \text{kg}^{-1})$		$-\Delta\mu_0/(\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1})$	
	110 ℃	130 ℃	110 ℃	130 ℃
分散蓝 60	306.96	18.24	306.14	19.19
分散蓝 354	329.62	18.47	719.42	22.05
分散彩蓝 QS-B	450.32	19.46	231.58	18.25

2.6 分子晶胞参数分析

对 3 种蓝色分散染料的分子晶胞参数进行计算,结果见表 5,其中 a 、 b 、 c 分别代表单个分子晶胞的长、高、宽;3 种蓝色分散染料分子的晶胞图如图 7 所示。染料本身的相对分子质量和晶胞体积大小会影响扩散的性能^[16]。分散蓝 60 分子晶胞的体积最

小,容易从纤维分子间的孔隙穿过到达内部,从而获得优良的扩散性能;而分散蓝 354 的相对分子质量与分子体积较大,扩散性不佳,分散彩蓝 QS-B 的相对分子质量最大,分子体积最大,扩散性能差。从表 5 和图 7 还可发现,分散蓝 354 分子晶胞的长和高数值较大,而宽值较小,分子呈现扁平状,具有较好的平面性,能够与涤纶大分子中的苯环产生 π - π 堆积作用,提高了染料与纤维之间的作用力^[16]。

表 5 3 种蓝色分散染料的相对分子质量和分子晶胞参数

染料	相对分子质量	a/nm	b/nm	c/nm	体积/ nm^3
分散蓝 60	379.12	1.9129	0.9083	0.6376	1.1088
分散蓝 354	515.26	2.2416	1.4478	0.7611	2.4701
分散彩蓝 QS-B	571.31	2.2257	1.2489	1.0328	2.8719

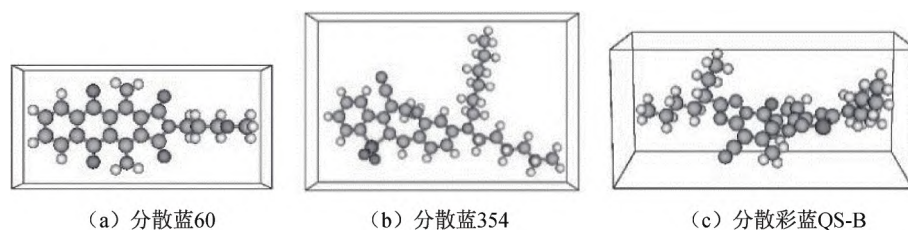


图 7 3 种蓝色分散染料分子的晶胞图

2.7 移染性分析

3 种蓝色分散染料的移染率数据见表 6,根据《分散染料 移染性的测定 高温染色法》(GB/T 10663—2014)可以判断:分散蓝 60 的移染率大于 75%,移染性能优良,分散蓝 354 和分散彩蓝 QS-B 的移染率均小于 54%,两者的移染性能均属于差的等级,且前者比后者低,说明分散蓝 354 比分散彩蓝 QS-B 的移染性能略差。

表 6 3 种蓝色分散染料的移染率

染料	移染率/%
分散蓝 60	95.83
分散蓝 354	5.80
分散彩蓝 QS-B	15.02

染料的移染包括染料从纤维内部移动进入水中,再从水中扩散进入纤维内部的过程;若染料具有高的移染率,一般匀染性也较好^[17]。分散蓝 60 分子体积小,与涤纶的亲和力适中,有一定的从纤维转移向染液的趋势,并且扩散性能优异,容易移染。分散蓝 354 分子平面性较好,与涤纶的标准亲和力较

大,很难从纤维上解吸进入染液中,故而移染性差。分散彩蓝 QS-B 分子平面性适中,与涤纶的标准亲和力较小,有向染液迁移的趋势;但它的分子体积较大,扩散能力差,染料一旦吸附到纤维的内部,通过纤维内部的孔洞进入染液中并再次上染的过程困难,所以移染性不佳。分散蓝 354 和分散彩蓝 QS-B 较差的移染性,使得它们的匀染性也不佳。

根据上述结论,可以得到分散蓝 354 和分散彩蓝 QS-B 匀染性不佳的解决思路:对于分散蓝 354 这类与纤维亲和力较大的染料,可添加适宜的匀染剂等来降低亲和力,改善染料的移染性,从而提高匀染性;对于分散彩蓝 QS-B 这类扩散能力差的染料,可适当添加增塑剂对纤维进行溶胀,使得染料更好地扩散上染,提高移染性和匀染性。

3 结 论

本文以分散蓝 60 为参照,研究了分散蓝 354、分散彩蓝 QS-B 在对涤纶进行上染过程的性能,并结合分子晶胞参数的模拟计算结果,分析了分子结

构特性、上染性能等对移染性、匀染性的影响,主要结论如下:

a)分散蓝 60 上染速率快,扩散性能也强,分散蓝 354 上染速率和扩散能力一般,分散彩蓝 QS-B 的扩散性差。

b)分散彩蓝 QS-B 的高温分散稳定性较好。在常规的 130 °C 染色下,分散彩蓝 QS-B 对涤纶的标准亲和力不大,分散蓝 60 对涤纶的标准亲和力适中;分散蓝 354 和涤纶间的分配系数、对涤纶标准亲和力较大。

c)分散蓝 60 分子较小,具有极好的移染性和匀染性,而分散蓝 354 分子较好的平面性、对涤纶较大的标准亲和力,与分散彩蓝 QS-B 分子较大的体积及相对分子质量、较差的扩散性能导致了两者移染性和匀染性不佳。据此可有针对性地添加助剂,以解决分散蓝 354 和分散彩蓝 QS-B 对涤纶染色匀染性不佳的问题。

参考文献:

- [1] 詹载欢,高至桥,傅淼荣,等. 涤纶织物印花中 C.I.分散蓝 60 的替代品应用探讨[J]. 现代纺织技术, 2018, 26(4): 69-75.
- [2] Hassan M M, Bhagvandas M. Sustainable ultrasound-assisted ultralow liquor ratio dyeing of wool textiles with an acid dye [J]. ACS Sustainable Chemistry & Engineering, 2017, 5(1): 973-981.
- [3] 陆辉. 涤纶染色中影响分散染料分散安定性要因分析[J]. 染整技术, 2010, 32(6): 1-11.
- [4] 梁静,钟毅,毛志平,等. 晶型对分散染料染色性能的影响[J]. 纺织学报, 2018, 39(7): 69-73.
- [5] 展义臻. C.I.分散蓝 354 染色性能研究[J]. 染整技术, 2018, 40(2): 16-20.
- [6] Jiang H Y, Hu X D, Khan A, et al. Dyeing mechanism and photodegradation kinetics of gardenia yellow natural colorant[J]. Textile Research Journal, 2021, 91(7/8): 839-850.
- [7] Mahar F K, Mehdi M, Qureshi U A, et al. Dyeability of recycled electrospun polyethylene terephthalate (PET) nanofibers: Kinetics and thermodynamic study [J]. Journal of Molecular Liquids, 2017, 248:911-919.
- [8] Kim T K, Son Y A, Lim Y J. Thermodynamic parameters of disperse dyeing on several polyester fibers having different molecular structures [J]. Dyes and Pigments, 2005, 67(3):229-234.
- [9] 李昊男,王树根. 新型腰果酚基高温匀染剂的染色性能研究[J]. 印染助剂, 2016, 33(9): 41-44.
- [10] 沈吉芳,裴刘军,朱磊,等. 硅基非水介质染色体系中无机盐对活性染料吸附动力学的影响[J]. 浙江理工大学学报(自然科学版), 2021, 45(2): 172-177.
- [11] 王成龙,李立新,吴绍明,等. 染色促进剂对聚丁二酸丁二醇酯纤维分散染料染色动力学和热力学的影响[J]. 纺织学报, 2022, 43(1): 147-152.
- [12] 崔志华. 磺酰胺染料的合成与应用性能研究[D].大连:大连理工大学, 2007: 86-103.
- [13] Lu T, Chen F W. Multiwfn: A multifunctional wavefunction analyzer [J]. Journal of Computational Chemistry, 2012, 33(5):580-592.
- [14] 叶润辉. 浅论提高分散染料的高温分散稳定性[J]. 染料工业, 1994, 31(4): 10-12.
- [15] 蔡金芳,陈维国,崔志华,等. 双亚苄基酞式噻吩染料对棉织物的染色性能[J]. 纺织学报, 2018, 39(10):81-85.
- [16] 谢玲芝,赵雪,展义臻. π - π 作用能在分散染料染色中的作用[J]. 印染, 2018, 44(10): 14-20.
- [17] 赵涛. 染整工艺与原理: 下册[M]. 北京:中国纺织出版社, 2009: 45.

(责任编辑:张会巍)