

ภาคผนวก ง

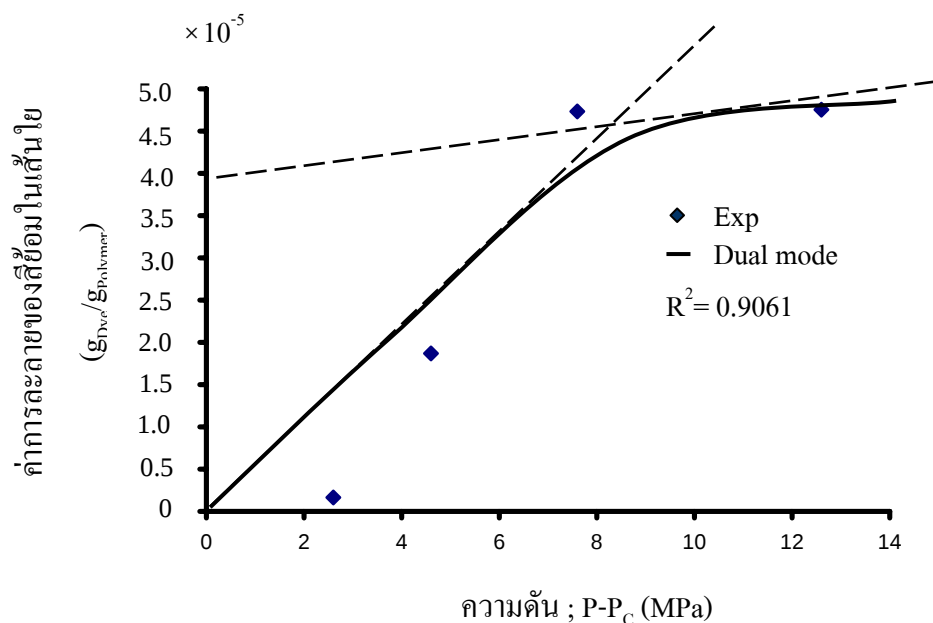
การคำนวณค่าคงที่และการประมาณค่าการละลายของสีย้อมใน
เส้นใยพอลิเมอร์ด้วยกลไกการดูดซึมแบบสองทาง

การคำนวณค่าคงที่ k_D , C'_H และ b สามารถทำได้โดยการประมาณค่าเชิงเส้นตรง จากกราฟที่พล็อตระหว่าง ค่าการละลายของสีย้อมในเส้นใยพอลิเมอร์ กับ ความดัน โดยอาศัยสมการของแบบจำลองการดูดซึมแบบสองทาง แต่เนื่องจากในงานวิจัยนี้ได้ทำการทดลองที่สภาวะความดันสูงกว่าความดันเหนือจุดวิกฤติของคาร์บอนไดออกไซด์ ดังนั้นการประมาณค่าเชิงเส้นตรงของเส้นกราฟผ่านจุดกำเนิด เพื่อหาค่าคงที่ต่างๆที่เกี่ยวข้องกับสมการจึงต้องทำในช่วงความดันเข้าใกล้จุดกำเนิดของเส้นกราฟ ดังนั้นจึงทำการปรับปรุงสมการกลไกการดูดซึมแบบสองทาง โดยการนำเอาความดันที่จุดวิกฤติของคาร์บอนไดออกไซด์มาลบความดันจริงที่ใช้ในการทดลอง ได้ดังสมการที่ (ง.1)

$$C = C_D + C_H = k_D (P - P_C) + \frac{C'_H b (P - P_C)}{1 + b (P - P_C)} \quad (\text{ง.1})$$

- เมื่อ C คือ ค่าการละลายของสีย้อมในพอลิเมอร์ ($g_{\text{Dye}} / g_{\text{Polymer}}$)
 k_D คือ ค่าคงที่การละลายตามกฎของเฮนรี ($g_{\text{Dye}} / g_{\text{Polymer}})(\text{MPa}^{-1})$
 b คือ ค่าคงที่ของรูช่องว่างร่วม (Hole affinity constant) (MPa^{-1})
 P คือ ความดันในการทดลอง (MPa)
 P_C คือ ความดันวิกฤติของคาร์บอนไดออกไซด์ มีค่า 7.4 เมกะพาสกาล
 C'_H คือ ค่าคงที่ของรูช่องว่างอิ่มตัว (Hole saturated constant) ($g_{\text{Dye}} / g_{\text{Polymer}}$)
 C_D คือ ค่าการละลายแบบปกติของสารที่สามารถแพร่กระจายได้ ($g_{\text{Dye}} / g_{\text{Polymer}}$)
 C_H คือ ค่าการดูดซึมภายในรูช่องว่างขนาดระดับไมครอน ($g_{\text{Dye}} / g_{\text{Polymer}}$)

ซึ่งกราฟที่ได้จากการประมาณค่าการละลายของสีย้อมในเส้นใยพอลิเมอร์ โดยรูปแบบกลไกการดูดซึมแบบสองทางที่อุณหภูมิคงที่ 50 องศาเซลเซียส เป็นเวลา 180 นาที แสดงดังในรูปที่ ง.1



รูปที่ 3.1 ค่าการละลายของสีย้อมในเส้นใยที่ได้จากการประมาณค่าด้วยกลไกการดูดซึมแบบสองทาง ที่อุณหภูมิและเวลาคงที่ 50 °C และ 180 นาที ตามลำดับ

จากรูปที่ 3.1 สามารถแบ่งพิจารณากราฟได้เป็น 2 ช่วง คือ ที่ช่วงความดันต่ำ และที่ช่วงความดันสูง ซึ่งค่าคงที่ k_D สามารถหาได้จากความชันของเส้นกราฟที่ช่วงความดันสูง ส่วนค่าคงที่ C'_H คือค่าที่จุดตัดแกน y ของกราฟที่ช่วงความดันสูงเช่นกัน และค่าคงที่ b คือความชันของเส้นกราฟที่ช่วงความดันต่ำ ตัวอย่างการคำนวณสามารถทำได้ดังนี้คือ

จากเส้นกราฟที่ช่วงความดันสูง พบว่าจุดตัดแกน y มีค่าเท่ากับ 4.0×10^{-5}

$$\text{ดังนั้นจะได้} \quad C'_H = 4.0 \times 10^{-5} \left(\frac{\text{g}_{\text{Dye}}}{\text{g}_{\text{Polymer}}} \right)$$

จากเส้นกราฟที่ช่วงความดันสูง สามารถหาความชันของเส้นกราฟได้ดังนี้

$$\text{slope} = \frac{(4.2-4) \times 10^{-5}}{(4-0)} = 0.05 \times 10^{-5}$$

$$\text{ดังนั้นจะได้} \quad k_D = 0.05 \times 10^{-5} \left(\frac{\text{g}_{\text{Dye}}/\text{g}_{\text{Polymer}}}{\text{MPa}} \right)$$

ค่าคงที่ b หาได้จากความชันของเส้นกราฟที่ช่วงความดันต่ำซึ่งเท่ากับ $(k_D + C'_H b)$ เมื่อแทนค่าตัวแปร k_D และ C'_H ที่หาได้ข้างต้นก็จะสามารถคำนวณหาค่า b ได้ดังนี้

$$\text{slope} = \frac{(2.1-0) \times 10^{-5}}{(4-0)} = 0.53 \times 10^{-5}$$

ดังนั้นจะได้ $(k_D + C'_H b) = 0.53 \times 10^{-5}$

แทนค่าคงที่ C'_H และ k_D จะได้

$$(0.05 \times 10^{-5}) + (4 \times 10^{-5} \times b) = 0.53 \times 10^{-5}$$

$$b = 0.12 \text{ (MPa}^{-1}\text{)}$$

กล่าวโดยสรุปสามารถคำนวณหาค่าคงที่ C'_H , k_D และ b ที่ความดันในช่วง 10 ถึง 20 เมกะพาสคาลและอุณหภูมิ 50 องศาเซลเซียส มีค่า $4.0 \times 10^{-5} \left(\frac{\text{g}_{\text{Dye}}}{\text{g}_{\text{Polymer}}} \right)$, $0.05 \times 10^{-5} \left(\frac{\text{g}_{\text{Dye}}/\text{g}_{\text{Polymer}}}{\text{MPa}} \right)$ และ $0.12 \text{ (MPa}^{-1}\text{)}$ ตามลำดับ สำหรับที่สภาวะอื่นๆ ก็สามารถคำนวณได้ในทำนองเดียวกัน เมื่อนำค่าคงที่ที่คำนวณได้มาแทนค่าในสมการที่ (ง.1) ก็จะสามารถประมาณค่าการละลายของสีข้อมในเส้นใยได้ดังเช่น ตัวอย่างการคำนวณค่าการละลายของสีข้อมในเส้นใย ที่อุณหภูมิคงที่ 50 องศาเซลเซียส ความดัน 8 เมกะพาสคาล เวลา 180 นาที

$$C = \left[\left(0.05 \times 10^{-5} \frac{\text{g}_{\text{Dye}}/\text{g}_{\text{Polymer}}}{\text{MPa}} \right) \times (8 - 7.4 \text{ MPa}) \right] + \left[\frac{(4 \times 10^{-5} \text{ g}_{\text{Dye}}/\text{g}_{\text{Polymer}}) \times \left(0.12 \frac{1}{\text{MPa}} \right) \times (8 - 7.4 \text{ MPa})}{1 + \left(0.12 \frac{1}{\text{MPa}} \times (8 - 7.4 \text{ MPa}) \right)} \right]$$

$$C = 0.29 \times 10^{-5} \frac{\text{g}_{\text{Dye}}}{\text{g}_{\text{Polymer}}}$$

กล่าวโดยสรุปที่อุณหภูมิคงที่ 50 องศาเซลเซียส ความดัน 8 เมกะพาสคาล เวลา 180 นาที สามารถคำนวณค่าการละลายของสีข้อมในเส้นใยได้เท่ากับ $0.29 \times 10^{-5} \frac{\text{g}_{\text{Dye}}}{\text{g}_{\text{Polymer}}}$ ส่วนที่สภาวะการทดลองอื่นๆ ก็สามารถคำนวณได้ในทำนองเดียวกัน และค่าการละลายของสีข้อมในเส้นใยที่คำนวณได้แสดงในตารางที่ ง.1

ตารางที่ ง.1 ค่าการละลายของสีย้อมในเส้นใยที่ได้จากการประมาณด้วย
กลไกการดูดซึมแบบสองทาง

P-P _C (เมกะพาสคาล)	ค่าการละลายของสีย้อมในเส้นใยพอลิเมอร์ $\times 10^{-5}$ (g _{Dye} /g _{Polymer})		
	50 °C	60 °C	70 °C
0.6	0.29	0.4	0.53
1.6	0.72	0.94	1.27
2.6	1.08	1.39	1.89
3.6	1.39	1.76	2.40
4.6	1.65	2.07	2.86
5.6	1.89	2.34	3.25
6.6	2.10	2.59	3.61
7.6	2.29	2.81	3.94
8.6	2.46	3.01	4.24
9.6	2.62	3.19	4.52
10.6	2.77	3.36	4.78
11.6	2.91	3.52	5.02
12.6	3.04	3.67	5.26
13.6	3.16	3.82	5.48
14.6	3.28	3.96	5.70
15.6	3.39	4.09	5.90
16.6	3.49	4.21	6.10
17.6	3.59	4.34	6.30
18.6	3.69	4.45	6.48
19.6	3.79	4.57	6.67
20.6	3.88	4.68	6.85
21.6	3.97	4.79	7.02
22.6	4.05	4.90	7.19
23.6	4.14	5.00	7.36
24.6	4.22	5.11	7.53