

앰포테릭섬유/산성염료계의 계면동전압 측정치에 대한 PCA Principle Component Analysis on Electrokinetic Measurements for Amphoteric Fibers/Acid Dye System

박 병 기*

ABSTRACT

In the light of the properties of colloids, in the surface of disperse phase and dispersion, there exist specific characters such as adsorption or electric double layer, which seems to play important roles in determining the physiochemical properties in the dyeing system.

Nylon, wool and silk, the typical amphoteric fibers were dyed with Acid dye and various combinations were prepared by combining pH, temperature and dye concentration, in order to generate flowing electric potential which were measured by microvolt meter and specific conductivity meter.

The results were transformed to Zeta potential by Helmholtz-Smoluchowski formular and to surface electric charge density by Suzawa formular, surface dye amount, and effective surface area of fibers, and these data were statistically analysed by principle component analysis.

1. 서 론

앰포테릭섬유인 견, 양모, 나일론 섬유에 대해 산성염료 C.I. Acid Orange 20, C.I. Acid Orange 10 용액 속에서 pH, 온도, 농도 등을 변화시키면서 유동전위법에 의해 계면전기적 변화량을 측정하고 이 결과를 PCA(principle component analysis) 방법으로 해석했다.

2. 실험 및 결과 분석

1) 실험

실험에 사용한 재료는 국산 21중 생사, 31번 호 오스트렐리아산 양모, 동양레이온제 나일론 110 d/30 f 2종, 200 d/30 f 1종을 정제해서 사용했다.

염료는 C.I. Acid Orange 20, C.I. Acid

* 全北大學校 工科大学 纖維工學科

Orange 10 을 Ogasawara 법 ⁽¹⁾ 으로 정제해서 사용했다.

계면전위 측정법으로는 유동전위법을 이용하고 Helmholtz - Smoluchowski 식 ⁽²⁾ 에 의해서 구했다. 표면전하밀도는 Suzawa 식 ⁽³⁾ 을 이용해서 구했다.

모든 실험에는 순수물, 사용기기로는 유동전위 발생장치, 유동전위 측정장치, 비전도도 측정장치, pH미터, 비색계를 사용했다.

2) 결과분석 ⁽⁴⁻⁸⁾

PCA는 ⁽⁹⁾ 처리별 동질성과 중요도를 판정할 수 있는 방법으로 분산, 공분산 혹은 공상관을 이용해서 eigen 값을 계산하고 분석하다.

본 연구에서는 공상관을 이용해서 S 매트릭스를, $|S - \lambda I| = 0$ 식을 이용해서 새로운 축의 길이 eigen value λ 를, 다음 $Sb = \lambda b$ 식에 대입 eigen vector b 를 구했다. $Y = Ab'$ 식에서 b' 는 eigen vector b 값을 transforce 한 값으로 $b' \times$ 원데이터 매트릭스 A 해서 새로운 좌표상의 점들 Y 를 구했다. 이 Y 값들을 몇 개의 차원으로 플로트한 것이 PCA 그림이다.

3. 결과 및 고찰

1) 앰포테릭섬유의 등전점에 대한 PCA

Fig. 1은 섬유별 동질성을 보기 위한 PCA 결과로서 모든 제타퍼텐셜 (ZP) 값은 eigen value I, II로 82%의 자료를 cover 할 수 있었고 9 (견); 3, 5 (나일론); 7 (양모); 5 (나일론); 8 (반케아 양모); 10 (생사); 2, 1, 4 (나일론) 군으로 분류할 수 있었으며 섬유별로 차이가 있음을 증명해 주었다. Fig. 2는 pH별 동질성을 보기 위한 것으로 eigen value I, II로 98%의 자료를 cover 할 수 있었으며 pH 변화에 따라 큰 간격을 두고 변화해서 동질성을 찾을 수 없었고 pH가 제타퍼텐셜에 큰 영향을 주고 있음을 알 수 있었다.

2) pH, 염료, 농도변화에 따른 섬유별 염료 흡착량에 대한 PCA 분석.

Fig.3의 PCA 결과는 I, II축으로 데이터의 97%를 cover 할 수 있으며 2, 1, 3 (나일론의

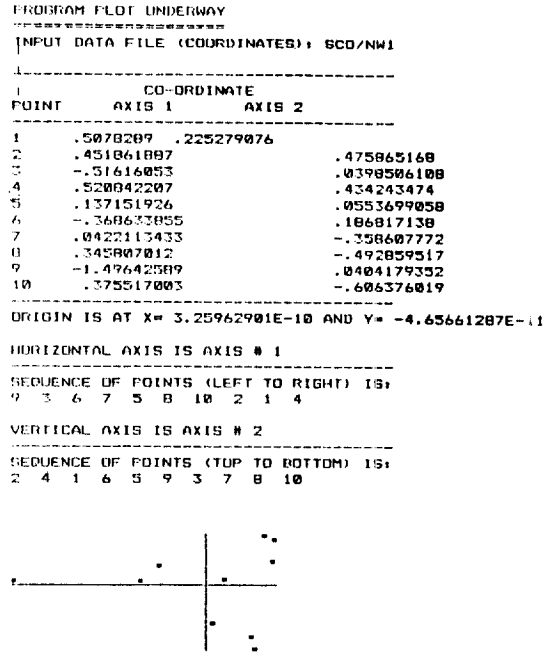


Fig. 1. PCA for isoelectric point of amphoteric fibers

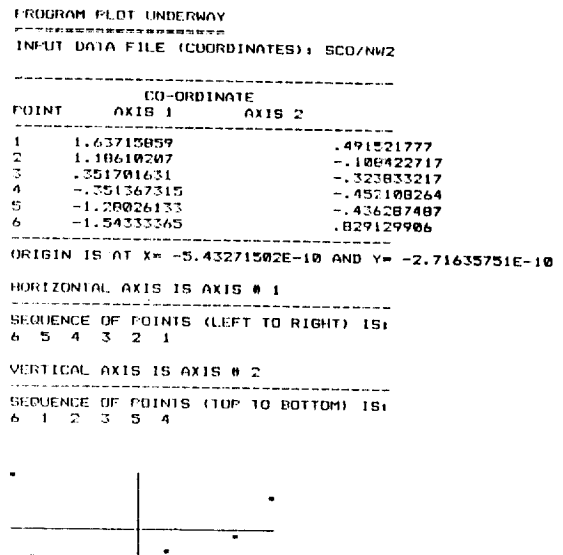


Fig. 2. PCA of pH effect for IEP

```

PROGRAM PLOT UNDERWAY
*****
INPUT DATA FILE (COORDINATES): SGO/PHE1
-----
CO-ORDINATE
POINT  AXIS 1      AXIS 2
-----
1      -1.691912584    -0.052854453
2      -1.50450926    1.181506447
3      -1.599372542    1.043158882
4      1.50058357     -0.0315251332
5      1.20279055    -0.0513287321
6      1.14351505    -0.0276998648
7      1.551574096     0.031948517
8      1.311772497    -1.15357491
9      1.052154394     1.442592007
10     -1.217722457    0.0244949102
11     -1.55954263    0.04622896E-03
12     -1.109420374    1.0144065682
13     1.50265731    -0.0561326878
14     1.07242574    -0.0454272424
15     1.50832556    -0.0587195507
16     1.29878156    -0.0476824852
17     1.16386077    -0.0397660392
18     1.12634604    -0.040414817
19     1.14222072    -0.0624591731
20     1.174276179    -0.0868478913
-----
ORIGIN IS AT X= -1.77573366E-10 AND Y= 3.20142135E-11
HORIZONTAL AXIS IS AXIS # 1
-----
SEQUENCE OF POINTS (LEFT TO RIGHT) IS:
2  1  3  10  11  12  19  17  14  16  18  5  6  13  15
4  20  8  7  9
-----
VERTICAL AXIS IS AXIS # 2
-----
SEQUENCE OF POINTS (TOP TO BOTTOM) IS:
9  2  3  7  10  12  11  6  4  17  14  16  18  5  1
13  15  19  20  8

```



Fig. 3. PCA of pH & dyes effect on each fiber

```

PROGRAM PLOT UNDERWAY
*****
INPUT DATA FILE (COORDINATES): SGO/PHE2
-----
CO-ORDINATE
POINT  AXIS 1      AXIS 2
-----
1      2.47092774     -1.97817403
2      1.451029932    1.32379351
3      -1.496043502    1.932826998
4      -1.550251105    1.49880951
5      -1.03562279    -1.97725399
-----
ORIGIN IS AT X= -7.4505006E-10 AND Y= -1.86264515E-10
HORIZONTAL AXIS IS AXIS # 1
-----
SEQUENCE OF POINTS (LEFT TO RIGHT) IS:
5  4  3  2  1
-----
VERTICAL AXIS IS AXIS # 2
-----
SEQUENCE OF POINTS (TOP TO BOTTOM) IS:
4  3  2  1  5

```

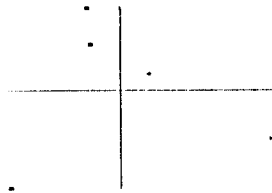


Fig. 4. PCA of dye conc. effect on each fiber

제타퍼텐셜); 10, 11, 12(양모의 제타퍼텐셜); 19, 20(견의 제타퍼텐셜); 8, 7, 9(나일론의 표면염착량); 19, 17, 14, 16, 18, 5, 6, 13, 15, 4, 20(나일론의 총염착량, 양모의 표면염착량, 양모의 총염착량)이 한 무리를 이루고 있어서 섬유별, 변량별 군구분이 명확하게 구획되었다.

Fig.4는 농도변화의 영향을 분석한 PCA 값이며 eigen value I, II로 93.8%의 자료를 cover 해주고 있다. Fig.4의 농도별 PCA 값이 일정한 군을 형성하고 있지 않은 점과 농도증가에 따라 큰 변화를 나타내는 점으로 미루어 농도가 염색현상에 큰 영향을 준다고 판단되었다.

Fig.5는 섬유별 pH, 염료의 영향을 확인하기 위해 표면염착량(SDA)과 총염착량(TDA) 2변량만을 분석한 것으로서 I, II축으로 76.7%의 자료를 cover 했으며 나일론의 총염착량 2, 1, 3; 양모의 총염착량 4, 5, 6; 견의 총염착량 7; 나일론의 표면염착량 9, 8, 10; 양모의 표면염착량 11, 12, 13; 견의 표면염착량 14가 군을 형성하고 있고 특히 견은 표면염착량과 총염착량이 한 그룹을 이루고 있었다. 따라서 섬유별, 변량별 유사성 혹은 동질성을 분명하게 나타내 주었다.

```

PROGRAM PLOT UNDERWAY
*****
INPUT DATA FILE (COORDINATES): STBD/1
-----
CO-ORDINATE
POINT  AXIS 1      AXIS 2
-----
1      -0.984533073     -0.0732100359
2      -1.214567625    -0.251746584
3      -1.05548697     -0.0715246207
4      -1.278011078    -0.345454304
5      -1.2472513012    -0.214610195
6      -1.304696805     -0.0310612
7      -1.394257553     1.94706309
8      1.736974128     5.06400015E-03
9      1.295764295     1.021082411
10     1.50577934     1.36910508
11     -1.291591546     -0.281427513
12     -1.24537712     -1.171677508
13     -1.258603616     -0.262542697
14     -1.50233519     1.839972464
-----
ORIGIN IS AT X= 2.74407544E-10 AND Y= -4.98922808E-11
HORIZONTAL AXIS IS AXIS # 1
-----
SEQUENCE OF POINTS (LEFT TO RIGHT) IS:
7  14  8  11  4  13  5  12  2  3  1  9  8  10
-----
VERTICAL AXIS IS AXIS # 2
-----
SEQUENCE OF POINTS (TOP TO BOTTOM) IS:
7  14  10  8  9  3  1  2  12  5  13  11  4  6

```

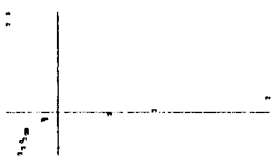


Fig. 5. PCA of SDA & TDA for each fiber

염료농도별 TDA와 SDA에 대한 PCA 결과를 Fig.6에 플롯했다. Fig.6에서 I, II 축은 자료의 76.3%를 해석했으며 특별한 그룹형성없이 큰 분포를 이루는 것으로 미루어 염료농도가 TDA와 SDA에 큰 영향을 미치고 있음을 증명해 주었다.

3) 온도변화에 따른 섬유별 염료흡착량에 대한 PCA 분석

염료 orange I 으로 온도를 상승시키면서 염색했을 때 섬유별 제타퍼텐셜 (ZP), 표면전하밀도 (SCD), 총염착량 (TDA)이 형성하는 그룹을 분류한 것이 Fig. 7이다. Fig.7에서 eigen value I, II는 99.9%의 자료를 cover 했으며 나일론, 양모, 견의 제타퍼텐셜 1, 4, 7이 앞쪽에, 표면전하밀도 2, 5, 8이 다음, 총염착량 3, 6, 9가 뒤쪽에 위치했으며 나일론 1, 2, 3은 큰 범위로, 양모의 4, 5, 6은 중간범위로 견의 7, 8, 9는 작은 범위로 그룹을 형성하고 있었다.

온도별 PCA 결과는 Fig.8에 플롯했고 eigen value I, II로 자료의 98.9%를 cover 할 수 있었다. Fig.8에서 점들이 그룹을 형성하지 않고 크게 분포되어 있는 점으로 미루어 온도의 영향이 크다는 것을 증명해 주었다.

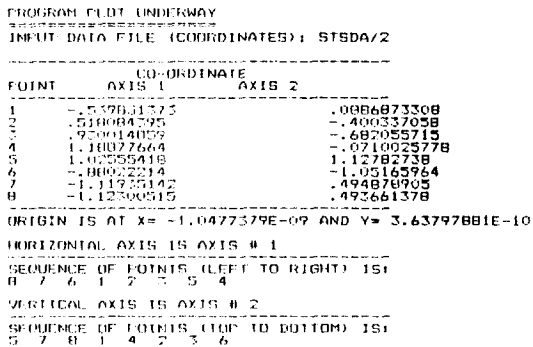


Fig. 6. PCA for dye conc. effect on SDA & TDA

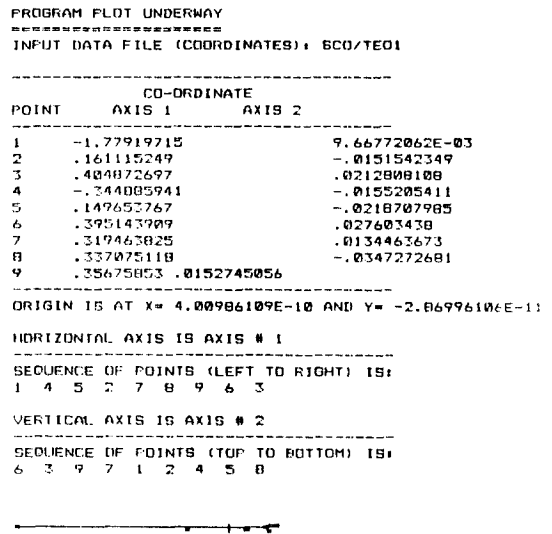


Fig. 7. PCA for ZP, SCD & TDA on each fiber

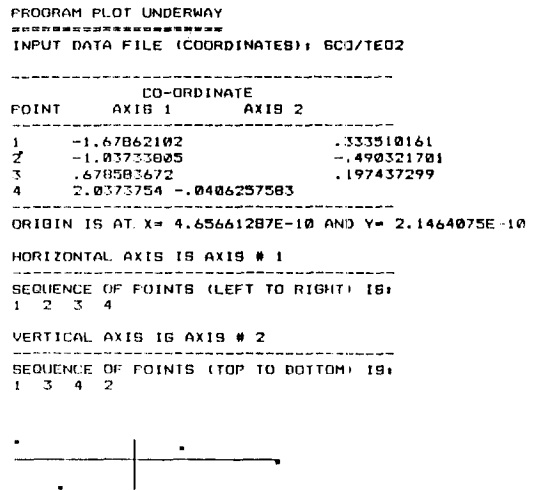


Fig. 8. PCA for temperature effect

4. 결론

상기 앰포테리크섬유와 산성염료계의 반응결과 얻은 자료를 PCA 분석해서 다음 결론을 얻었다.

1) 모든 측정치는 섬유별로, 동일변량별로 그룹을 형성하여 동질성을 나타냈다.

2) 처리조건중 pH, 염료농도, 온도는 분산타점되어, 제면전기적 성질에 큰 영향을 주었다.

후기 : 상기 데이터처리는 퍼스컴을 이용했고 처리과정은 본 논문에서 생략했다.

REFERENCES

1. S. Ogasawara et al, Sen-I Gakkaishi, 26, 221 (1970)
2. Y. Iwadare, ibid, 38, T-427 (1982)
3. T. Suzawa, Kogyo Kagaku Zasshi, 63, 2205 (1960)
4. M.G. Kendall and A. Stuart, The Theory of Advanced Statistics. V.S, Design and Analysis and Time series, 3rd ed., Hafner, p.585, 1976
5. M. Keuls, Euphytica, 1, 112 (1952)
6. E. L. Lehman, Testing Statistical Hypotheses, Wiley, p.369, 1959
7. G. W. Snedecor, Calculation and Interpretation of Analysis of Variance and Covariance, Collegiate Press, p.96, 1934
8. A. H-S. Ang and W. H. Tang, Probability Concepts in Engineering Planning and Design, V.1, Wiley, p.140, 1975
9. J. F. Hair, Jr. et al, Multivariate Data Analysis, Petroleum Pub. Co., p.224, 1979