9.- CONCLUSIONES

El trabajo de investigación desarrollado en esta Tesis Doctoral, ha consistido, fundamentalmente en un estudio exhaustivo y sistemático del comportamiento cinético-experimental de la fibra Tencel con C. I. Direct Blue 1, evaluando la influencia de los dos parámetros fundamentales que inciden en la cinética : electrolito y temperatura.

Dicho estudio se ha realizado en comparación con Viscosa convencional, utilizando para tal estudio viscosa normalizada según ISO 105 F-02, en las mismas condiciones con objeto de comparar el comportamiento de ambas fibras celulósicas artificiales.

Se ha comprobado y demostrado que aún siendo, Tencel y Viscosa de naturaleza química idéntica, su comportamiento cinético es totalmente diferente, lo que permite concluir que la estructura física de la fibra Tencel difiere de forma importante de las otras fibras celulósicas regeneradas, siendo éste el primer ejemplo experimental de que el fenómeno de la difusión puede ser muy distinto sólo por la estructura fina de la fibra en polímeros naturales.

A consecuencia de lo anterior, se ha demostrado la necesidad de analizar dicho comportamiento experimental a partir de dos posibles enfoques cuantitativos: Ecuaciones Cinéticas y Modelos Matemáticos de Difusión

Se han considerado tres ecuaciones cinéticas de las habitualmente utilizadas y válidas para procesos textiles y una ecuación de tipo heterogéneo basada en sistemas de reacciones elementales consecutivas. En las tres primeras se ha demostrado que presentan, tanto en Tencel como en Viscosa, unos niveles de ajuste similares. Dichos niveles resultarían aceptables de cara a un planteamiento de programación industrial de tinturas pero, en ningún caso permiten explicar las diferencias experimentales en relación a la microestructura de la fibra. Es en la

ecuación de tipo heterogéneo en la que se puede establecer diferencias a partir del factor estructural promedio.

Las ecuaciones estudiadas corresponden a tres grupos, según el número de parámetros a estimar en cada uno de ellos: mono, di y triparamétricas.

La ecuación de tipo monoparamétrico no permite un ajuste total al proceso.
Las ecuaciones de tipo biparamétrico permiten un mejor ajuste al comportamiento cinético, tanto parcial como global (hasta niveles máximos de agotamiento), sin que la dependencia entre ambos parámetros distorsione el sentido fenomenológico a explicar.

Por otra parte, la ecuación triparamétrica, siendo de ajuste similar a la biparamétrica, presenta el inconveniente de una excesiva interdependencia entre los tres parámetros que intervienen , lo que limita una interpretación fenomenológica y estructural del comportamiento cinético.

A pesar de lo indicado para las ecuaciones biparamétricas, la interpretación de las variaciones simultáneas de electrolito y temperatura, se hace difícil y compleja, por lo que se considera la posibilidad de realizar la comparación entre Tencel y Viscosa a través de modelos matemáticos de difusión.

Partiendo de la Segunda Ley de Fick, se han valorado las aproximaciones de Kilby, Rais-Militky y la de Crank . Ésta última se ha modificado mediante una reagrupación de términos, con lo que se ha obtenido una ecuación final que permite la estimación de D/r^2, a partir de tres parámetros de base experimental.

Con las tres ecuaciones se ha obtenido el valor de D/r^2 para ambas fibras, habiéndose podido calcular el Coeficiente de difusión aparente para el caso de Tencel, al tratarse la Viscosa de una fibra no circular .

La comparación de D/r^2 entre ambas fibras indica que:

- Exceptuando el modelo de Chrastil, los valores de D/r^2 obtenidos, tanto en las ecuaciones cinéticas como las matemáticas, disminuyen con el aumento de la concentración de electrolito en el baño.
- Los valores obtenidos a partir de la aproximación de Crank y de la de Rais-Militky presentan gran similitud. En el caso de Tencel, son prácticamente iguales.
- Hay un estrecho paralelismo entre los valores obtenidos a partir de la ecuación de Cegarra-Puente-Valldeperas y los de las aproximaciones matemáticas de Crank y Rais-Militky. Este es un hecho curioso atendiendo al origen tan distinto de ambos grupos de ecuaciones.
- Los modelos con tendencia descendente conducen, a la concentración máxima de electrolito, a valores muy similares de D/r^2 en Viscosa y coincidentes en el caso de Tencel. Ello indicaría que, para niveles de concentración mayores de electrolito, las diferencias entre ambas fibras, de existir, serían difícilmente detectables.
- El modelo de Kilby presenta, para ambas fibras, los valores de factor estructural menores

El orden de magnitud de los D_{ap} para Tencel presentan variaciones notables según las simplificaciones que los distintos autores han realizado sobre la ecuación original, oscilando entre 10^{-11} y 10^{-14} para la ecuación de Cegarra-Puente-Valldeperas, 10^{-12} y 10^{-14} para la ecuación de Chrastil, 10^{-11} y 10^{-16} para la ecuación de Urbanik , 10^{-11} y 10^{-14} para la ecuación de Crank, 10^{-11} y 10^{-14} para la aproximación de Rais-Militky y 10^{-16} y 10^{-13} para la ecuación de Kilby.

A pesar de las diferencias según la ecuación considerada, se observa en Tencel una variación del D_{ap} notable en función de los tres niveles de agotamiento en los que se ha estructurado el estudio cinético.

Ello permite demostrar a través de la cinética de tintura la existencia de varias capas de distinto nivel de ordenación microestructural que implicará, desde un punto de vista técnico, la necesidad de reconsiderar los procesos de tintura a fin de obtener unos niveles de penetración del colorante en la fibra similares a los de otras fibras celulósicas, al existir en Tencel velocidades de difusión diferenciadas en sus distintas capas.

En resumen, el movimiento difusorio del colorante hacia el centro de la fibra, no presenta el nivel de uniformidad al que nos tienen habituadas las otras fibras textiles usuales.

Finalmente y como había sido ya propuesto por otros autores (Hoffman, comunicación privada), existe una buena correlación entre los coeficientes de difusión y las constantes de velocidad de las ecuaciones cinéticas, si bien dicha correlación resultará menos cierta en Tencel que en otras fibras, en las que la difusión sea menos variable en función del recorrido.