

QSPR study of Glass Transition Temperatures ($T_g^{\circ}\text{C}$) of Silicon Containing Maleimide Polymers Using Calculation Methods

Kawkah Ali Hussain

*Department of Chemistry – College of Education Pure Science – University of Basrah.
Basra – Iraq*

(NJC)

(Received on 9/1/2013)

(Accepted for publication 25/3/2013)

Abstract

Quantitative Structure–Property Relationship (QSPR) models based on molecular descriptors derived from molecular structures have been used for the prediction for computed the glass transition temperatures ($T_g^{\circ}\text{C}$) of polymer compounds. QSPR model includes some molecular descriptors, regression quality indicates that these descriptors provide valuable information and have significant role in the assessment of the the glass transition temperatures ($T_g^{\circ}\text{C}$) of polymers. Six QSPR equations for the prediction of glass transition have been drawn up by using the multiple regression technique (Eqs 1-6) with the values of R^2 range from 0.905-0.999, the values of Q^2 range are from 0.895-0.999, and the values of S range are from 2.585-0.127, while the values of F range from 57.570-4372.359. The results show excellent model by Eq. 6, with high of R^2 , Q^2 , F and minimum S by using six parameters [T, F, Si15^{CHARGE}, D, M, O14^{CHARGE}, H, F and W, R, O] was found and indicate that these parameters have important role in determining the properties of glass transition temperatures ($T_g^{\circ}\text{C}$). This result encourages the application of QSPR to a wider selection of polymer properties and to other classes of polymers, including industrial, biopolymers.

Keywords: *Silicon containing maleimide polymers, glass transition temperatures ($T_g^{\circ}\text{C}$) (QSPR) model*

الخلاصة

الدراسة قدمت موديلات العلاقة التركيبية لـ QSPR اعتماداً على حساب الموصفات الجزيئية المنشطة من التركيب الجزيئي للتبيّن وحساب درجة الانقلال الحراري الراجحي للمركبات الوليميرية المدروسة. تضمنت تقييمات QSPR البعض الموصفات الجزيئية والتي، أثبتت باز هذه الموصفات تحظى بمعنومات وقيم مهمة ولها تأثير كبير في تحديد درجة الانقلال الحراري، الراجحي (الوليمير)، بأستخدام ستة متغيرات [T, F, Si15^{CHARGE}, D, M, O14^{CHARGE}, H, F and W, R, O] وذلت، الترتيل الاعدادي استناداً من

المعادلات ضمن النتائج

$$R^2 = 0.905-0.999, Q^2 = 0.895-0.999, S = 2.585-0.127, F = 57.570-4372.359.$$

لظهور النتائج بأن أفضل موديل ممتاز كان باستخدام معادلة 6. اعتماداً على الترتيل العادي لـ F, Q^2 , F، ولكل التغيرات المنشطة على المتصيرات، الجزيئية الراجحة