Quantitative structure property relationship (QSPR) study of phthalate plasticization for PVC

Sadiq M-H Ismael, Kawkab A. Hussain*Wisam A. Radhi, and Hasanain A S. A Majeed
Department of Chemistry, College of Education Pure Science, University of Basrah

*Department of Chemistry, Polymer Research Center, University of Basrah

دراسة لعلاقة التركيب – الخاصية الكمية لمركبات الفثالات كملدنات للبولي فينيل كلورايد

صادق محمد حسن إسماعيل , كوكب علي حسين,* وسام عبد الحسن راضي , حسنين عبد الصمد عبد المجيد
جامعة البصرة –كلية التربية للعلوم الصرفة- قسم الكيمياء.
*جامعة البصرة –مركز أبحاث البوليمر –قسم الكيمياء

المستخلص

تم حساب المتغيرات التركيبية لعشرة من الفثالات كملدنات لبولي فينيل كلورايد من التراكيب الجزيئية عند الطاقة الدنيا بطريقة (AM1) شبه التجريبية ومن ثم استخدمت تقنية العلاقة التركيبية الخصائصية الكمية QSPR للتنبأ بأوطا نقطة لدرجة حرارة الثني لها (T_f) . انجزت المعادلات التي تربط الصفات التركيبية للملدنات مع أوطئ نقطة لدرجة حرارة الثني(T_f)باستخدام التحليل الخطي المتعدد الارتداد. أظهرت النتائج بأن أفضل موديل QSPR للتنبؤ بنقطة (T_f) يحوي الموصوفات التالية [T.E+POL+LOG P+ SURFACE APPRO+ SURFACE GRID+ Ref+ D.M+N.E] وله قيم الوسائط الاحصائية التالية R^2= 0.9490, F= 4.6548, S= 2.1888 ومن هذا الموديل تبين الدراسة التأثير المميز لهذه الموصوفات على أوطأ نقطة لدرجة حرارة الثني لمركبات الفثالات.

Abstract

Ten plasticizers compounds of PVC can be modeled by using quantum chemical calculations. Structural parameters were derived from the structures of minimum energy obtained by molecular mechanics (MM+) and the semiempirical molecular orbital (AM1) calculations. Quantitative Structure – Property Relationship (QSPR) have been computed and established to correlate and predict low temperature flex point (T_f) of plactizater polyvinyl chloride. The influence physic-chemical descriptors on the low temperature flex point (T_f) of phthalate was accomplished by Linear multiple regression analysis (LMR) which were used to generate the equation that relates the structural features to the plasticization properties. Good correlations of the low temperature flex point(T_f) with different structural parameters were obtained. The results show the best model equation 4, with eight descriptors [T.E+POL+LOG