

КОЛИЧЕСТВЕННЫЙ АНАЛИЗ СОПОЛИМЕРОВ СТИРОЛА С БУТАДИЕНОМ МЕТОДОМ ЯМР-СПЕКТРОСКОПИИ

Кузнецов И.О., Кузнецов Д.Н.

Российский государственный университет
117997, г. Москва, ул. Садовническая, д. 33, стр. 1

Полистирол, а также его сополимеры с бутадиеном являются одними из наиболее распространенных видов сырья для производства товаров бытового назначения, в строительстве, в медицинской и пищевой промышленности.

В последнее время участились случаи ввоза на территорию РФ импортных сополимеров стирола с бутадиеном, которые имеют различную таможенную пошлину, в соответствии с товарной номенклатурой внешней экономической деятельности евразийского экономического союза (ТН ВЭД ЕАЭС), под видом чистого полистирола, который не облагается таможенными пошлинами.

В соответствии с вышесказанным задача разработки аналитической методики количественного определения массовой доли звеньев стирола и бутадиена в сополимере является актуальной и своевременной. Для решения изложенной задачи в настоящее время применяют ИК-спектроскопию, которая не обладает высокой точностью и длительна в исполнении.

Целью настоящей работы является разработка аналитической методики количественного определения массовой доли звеньев стирола и бутадиена в сополимере методом ЯМР-спектроскопии. Исследования проводились на спектрометре BrukerAvance III 600 MHz с датчиком ВВО и программным обеспечением TopSpin версии 3.5. В качестве стандартов использовали образцы полистирола и полибутадиена полученные на разных катализаторах, а также стандарт бутадиен-стирольного каучука, с содержанием стирола 45 масс.%. Анализ проводился в растворе $CDCl_3$.

Анализ состава сополимеров/каучуков проводился методом ЯМР-спектроскопии на ядрах 1H и ^{13}C , а также используя двумерные спектры, снятые в условиях эксперимента: COSY, HSQC и HMBSC. В расчетах учитывалось влияние разного типа полимеризации бутадиена (1,4-цис, 1,4-транс, 1,2-) на ЯМР-спектры.

На основе полученных данных была создана расчетная модель для определения количественного соотношения мономерных звеньев стирола и бутадиена.

В результате проведенных исследований, было установлено, что метод ЯМР-спектроскопии позволяет с большой точностью определять количество мономерных звеньев стирола и бутадиена, что позволяет правильно классифицировать товар по ТН ВЭД ЕАЭС.