

Исследование свойств бромированной фталатсодержащей системы и определение областей ее применения

Раиса Н. Плотникова¹ yy@vsuet.ru  0000-0001-9559-4443¹ Воронежский государственный университет инженерных технологий, пр-т Революции, 19, г. Воронеж, 394036, Россия

Аннотация. Изучена структура многокомпонентной системы, включающей сложные эфиры фталевой кислоты, с помощью методов инфракрасной спектроскопии и протонного магнитного резонанса. Проведен анализ полученных спектрограмм, свидетельствующий о наличии пиков, соответствующих определенным радикалам, присутствующим в предполагаемой структуре основных органических соединений многокомпонентной системы. Установлено наличие атомов брома в радикалах молекул, входящих в состав фталатсодержащей системы. Показана структура молекул базовой составляющей бромированной системы. Спектральными исследованиями подтверждена классическая модель присоединения брома по месту двойных углерод-углеродных связей в радикале фталата. Установлено, что бромированная многокомпонентная физико-химическая система представлена в большей степени сложными эфирами о-фталевой кислоты. Расчетным методом установлен параметр растворимости исследуемой системы. Экспериментально подтвержден для бромированной фталатсодержащей системы параметр растворимости. Показано, что формула Смолла, используемая для расчета показателей индивидуальных веществ, может быть применена для оценки параметров сложных многокомпонентных систем. Определены полимерные материалы с минимальными значениями отклонений по параметру растворимости с исследуемой системой, для которых он составляет $\sim \pm 1.5$. Установлено, что исследуемая система может быть использована в качестве эффективного пластификатора полибутилакрилата, полиизопрена, поливинилхлорида, поливинилацетата.

Ключевые слова: свойства фталатов, ИК-спектроскопия, ПМР-спектроскопия, совместимость полимеров, пластификатор

Investigation of the properties of the brominated phthalate-containing system and determination of its application areas

Raisa N. Plotnikova¹ yy@vsuet.ru  0000-0001-9559-4443¹ Voronezh State University of Engineering Technologies, Revolution Av., 19 Voronezh, 394036, Russia

Abstract. The structure of a multicomponent system including phthalic acid esters has been studied using the methods of infrared spectroscopy and proton magnetic resonance. The obtained spectrograms are analyzed, indicating the presence of peaks corresponding to certain radicals present in the assumed structure of the main organic compounds of the multicomponent system. The presence of bromine atoms in the radicals of the molecules that make up the phthalate-containing system is established. The structure of the molecules of the basic component of the brominated system is shown. Spectral studies have confirmed the classical model of bromine addition at the site of double carbon-carbon bonds in the phthalate radical. It is established that the brominated multicomponent physico-chemical system is represented to a greater extent by esters of o-phthalic acid. The solubility parameter of the system under study is determined by the calculation method. The solubility parameter 35.3 (kJ/m³)^{0.5} was experimentally confirmed for a brominated phthalate-containing system. It is shown that the Small formula used to calculate the parameters of individual substances can be used to estimate the parameters of complex multicomponent systems. Polymer materials with the minimum values of deviations in the solubility parameter with the system under study, for which $\sim \pm 1.5$, are determined. It is established that the system under study can be used as an effective plasticizer of polybutyl acrylate, polyisoprene, polyvinyl chloride, and polyvinyl acetate.

Keywords: properties of phthalates, infrared spectroscopy, PMR spectroscopy, the compatibility of the polymers, plasticizer

Введение

Фталатсодержащие системы, содержащие диэтилгексилфталаты и диэтилгексенфталаты (система ДЭГФ), получили широкое распространение в различных областях промышленного производства [1]. Известно использование фталатсодержащих систем с неопределенностью в радикале в качестве сырья для получения их бромированных аналогов (система БДЭГФ). Любая вновь получаемая модификация известных фталатсодержащих систем не должна исключать привычные области применения, напротив, расширять их и повышать эффективность использования. Поэтому при бромировании неопределенных фталатсодержащих систем свободным бромом нельзя допускать резкого изменения состава исходного сырья и молекулярной структуры его компонентов.

Основные изменения по логике исследования должны состоять в образовании изомерных эфиров о-фталевой кислоты вследствие присоединения брома по двойным углерод-углеродным связям [2].

Методы

Установление структуры органических соединений, в том числе идентификация отдельных компонентов многокомпонентной смеси является длительной и трудоемкой работой [3–6], требующей специального приборного обеспечения. Для определения состава многокомпонентной смеси и подтверждения предполагаемой структуры, входящих в нее органических соединений, образцы исходных и бромированных фталатсодержащих систем подвергали ИК- и ПМР-спектроскопическим исследованиям по установленным методикам.

Для цитирования

Плотникова Р.Н. Исследование свойств бромированной фталатсодержащей системы и определение областей ее применения // Вестник ВГУИТ. 2021. Т. 83. № 1. С. 290–296. doi:10.20914/2310-1202-2021-1-290-296

For citation

Plotnikova R.N. Investigation of the properties of the brominated phthalate-containing system and determination of its application areas. *Vestnik VGUIT* [Proceedings of VSUET]. 2021. vol. 83. no. 1. pp. 290–296. (in Russian). doi:10.20914/2310-1202-2021-1-290-296

This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution 4.0 International License

Исследования были проведены на спектрометре ИКС-29 в области 3900–400 см⁻¹.

Анализ бромированной фталатсодержащей системы БДЭГФ по определению массовой доли брома проводили по разработанной методике, основанной на «методе Степанова» для определения галогенов в органических соединениях [7]. Образец БДЭГФ массой 0,2–0,4 г растворяли в 25 см³ н-бутанола, добавляли 0,2–0,4 г металлического натрия и кипятили в течение 0,5–1,0 ч в колбе с обратным холодильником. После остывания к содержимому колбы добавляли 10–25 см³ раствора нитрата серебра с содержанием основного компонента 0,1 моль/дм³ (объем раствора нитрата серебра зависит от предполагаемой массовой доли брома), 2–4 см³ раствора азотной кислоты с концентрацией 6 моль/дм³, встряхивали в течение 1 мин, добавляли 1–1,5 см³ индикатора железо-аммонийных квасцов и титровали роданидом аммония с концентрацией 0,1 моль/дм³ до появления слабого оранжевого окрашивания.

Массовую долю брома (%) рассчитывали по формуле:

$$C_{Br} = \frac{(V_{AgNO_3} - V_{NH_4SCN}) \cdot 0,8}{g},$$

где V_{AgNO_3} – объем нитрата серебра (0,1 моль/дм³), см³, взятого для анализа; V_{NH_4SCN} – объем роданида аммония (0,1 моль/дм³), см³, поглощенного при титровании; g – навеска бромированного образца, г; $0,008 \cdot 100\%$ – эквивалент брома, соответствующий 1 см³ нитрата серебра.

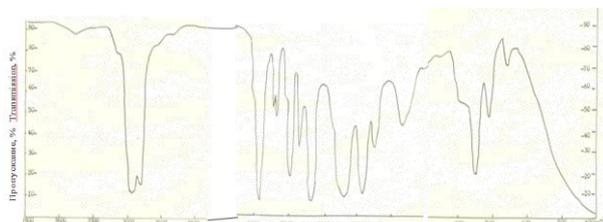


Рисунок 1. ИК-спектр непредельной системы

Figure 1. IR spectrum of an unsaturated system

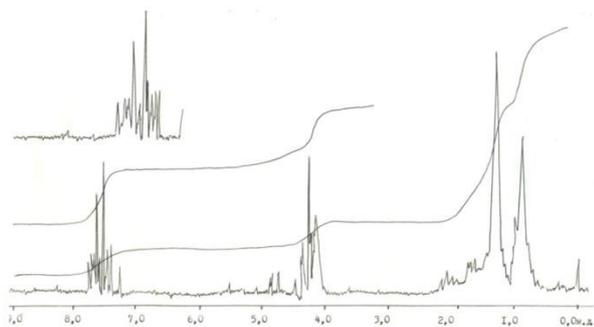


Рисунок 3. ПМР-спектр непредельной системы

Figure 3. PMR spectrum of an unsaturated system

Для определения возможных областей применения бромированная фталатсодержащая система БДЭГФ была оценена в соответствии с ГОСТ 8728–77 «Пластификаторы» [8].

Результаты и обсуждение

В ИК-спектрах образцов ДЭГФ и БДЭГФ, снятых на спектрометре ИКС-29 в области 3900–400 см⁻¹, проявляются полосы поглощения, характерные для сложных эфиров (1250–1740 см⁻¹) фталевой кислоты (дуплет 1580–1600 см⁻¹). Спектры исходного ДЭГФ и бромированного БДЭГФ представлены на рисунки 1–2. В исходном ДЭГФ неопредельность выходит при частоте 965 см⁻¹, характеризующей транс-положение. При бромировании БДЭГФ полоса 965 см⁻¹ исчезает, одновременно появляется полоса 570 см⁻¹, характеризующая связь С-Br в аксиальном положении [9], что дает право считать, что присоединение брома происходит по месту двойной углерод-углеродной связи в радикале.

Более детально о структуре органического соединения можно судить по результатам исследований с применением ПМР-спектроскопии [9–11]. Для выявления эффекта бромирования проведены более глубокие аналитические исследования, выполненные с применением метода ПМР-спектроскопии. ПМР-спектры, соответствующие фталатсодержащим системам ДЭГФ и БДЭГФ приведены на рисунках 3–4.

Отнесения сигналов представлены в таблице 1.

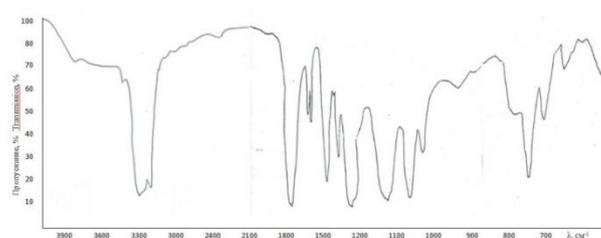


Рисунок 2. ИК-спектр бромированной системы

Figure 2. IR spectrum of the brominated system

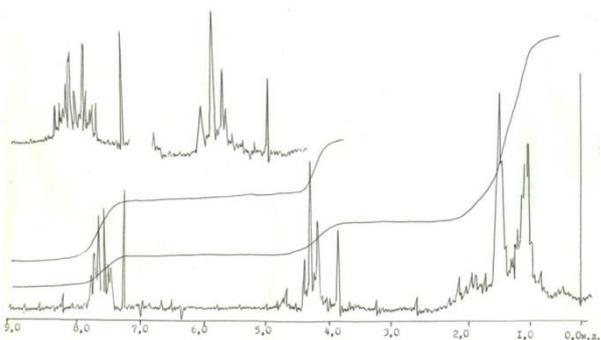


Рисунок 4. ПМР-спектр бромированной системы

Figure 4. PMR spectrum of the brominated system

Отнесение сигналов в ПМР-спектрах ДЭГФ и БДЭГФ

Table 1.

The assignment of signals in the PMR spectra of DEHP and BDEHP

Химические сдвиги сигналов образцов The chemical shifts of the signals of samples		Обозначения сигналов Designation of signals	Спектральная группа Spectral group
ДЭГФ DEHP	БДЭГФ BDEHP		
0,90 – 1,05	0,90 – 1,05	H ₁	CH ₃
1,30	1,30	H ₂	CH ₂
1,60; 1,65	1,60; 1,65	H ₃	CH
4,20; 4,30; 4,40	4,20; 4,30; 4,40	H ₄	-O-CH ₂ -
4,70; 4,85	-	H ₅	CH = CH
-	4,75	H ₆	CHBr-CHBr
7,60; 7,70	7,60; 7,70	H ₇	Протоны ароматические The aromatic protons

Обе фталатсодержащие системы имеют в основном общие сигналы протонного магнитного резонанса, за исключением области химических сдвигов 4–5 м. д. При этом отнесение сигналов к различным спектральным группам должно соответствовать следующему распределению, м. д.: 0–3,0 – протоны групп CH, CH₂, CH₃; 3,0–4,5 – протоны групп CH, CH₂, CH₃ рядом с атомом кислорода; 4,5–6,5 – протоны при ненасыщенных С-атомах (алкены); 6,5–8,5 – протоны при ненасыщенных С-атомах (бензол, другие ароматические соединения); 8,5–10,5 – протоны при ненасыщенных С-атомах, связанных с кислородом (альдегиды) [5].

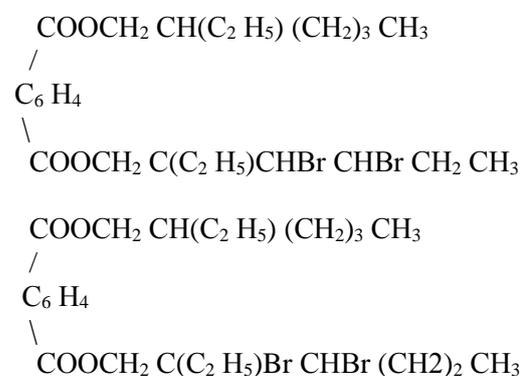
Общие сигналы в спектрах образцов соответствуют протонам метиленовых, метильных и метиновых групп (H₁ – H₃), а также метильных групп, непосредственно связанных с кислородом – H₄ в сложноэфирной группировке и ароматическим – H₇ – в дизамещенно бензольном кольце.

ПМР-спектр системы ДЭГФ содержит, кроме того, сигналы H₆, соответствующие протонам при двойной углерод-углеродной связи, пропадающие в ПМР-спектре образца системы БДЭГФ. Это можно объяснить присоединением брома по месту двойной углерод-углеродной связи. Присутствие протонов, соседних с бром-атомом, подтверждается наличием в ПМР-спектре системы БДЭГФ нового сигнала 4,75 м. д., отсутствующего в спектре образца системы ДЭГФ.

На этом основании можно сделать вывод о протекании реакции бромирования непредельного диэтилгексилфталата по месту двойной углерод-углеродной связи.

Метод ПМР-спектроскопии позволил идентифицировать только 2-этилгексил-3,4-дибром-2-этилгексилфталат. Его изомер 2-этилгексил-2,3-дибром-2-этилгексилфталат можно идентифицировать только методом ЯМР-спектроскопии на C₁₃ – изотопах углерода [13],

что не представилось возможным в рамках эксперимента. Однако о наличии последнего изомера в системе БДЭГФ можно судить по полному исчезновению в ней непредельных соединений, учитывая при этом, что в состав исходной системы ДЭГФ входит 2-этилгексил-2-этил-Зен-фталат и 2-этилгексил-2-этил-2ен-фталат. Спектроскопическими исследованиями никаких дополнительных изменений состава исходной системы ДЭГФ не обнаружено. Следовательно, в результате бромирования исходной системы ДЭГФ получен продукт, в состав которого входят эфиры, соответствующие структурным формулам:



Приведенные структурные формулы отвечают всем структурным группам, указанным в таблице 1 отнесения сигналов в ПМР-спектрах фталатсодержащих систем и данными ИКС-спектроскопии указанных образцов.

Полученный результат имеет значение для обоснования классической модели бромирования.

Состав бромированной фталатсодержащей системы рассчитан на основе химического анализа, по определению содержания массовой доли брома, таблица 2.

Характеристики физико-химических показателей БДЭГФ приведены в таблице 3.

Таблица 2.

Состав бромированной фталатсодержащей системы

Table 2.

Composition of the brominated phthalate-containing system

Компонент Component	Массовая доля,% Mass fraction,%
Ди-2-этилгексилфталат Di-2-ethylhexyl phthalate	19,3 – 74,6
2-этигексил-2-этил-дибром-гексилфталат 2-ethylhexyl-2-ethyl-dibromo-hexyl phthalate	20,3 – 75,7
Дибутилфталат Dibutyl phthalate	1,4 – 2,5
Примеси Impurities	1,4 – 2,5

Таблица 3.

Физико-химические показатели системы БДЭГФ

Table 3.

Physical and chemical parameters of the BDEGP system

Наименование показателя Indicators name	Единица измерения Unit of measurement	Величина показателя Indicators value
Плотность при 293 К Density at 293 K	кг/м ³ kg / m ³	1,06 – 1,28
Цветность по иодометрической шкале Chromaticity according to iodometric scale	-	50 – 100
Показатель преломления при 298 К Refractive index at 298 K	-	1,494 – 1,497
Динамическая вязкость при 298 К Dynamic viscosity at 298 K	-	75 – 95
Температура кипения Boiling point	К	503 – 527 (при 0,66 кПа) (at 0,66 kPa)
Температура застывания Solidification temperature	К	243 – 245
Температура воспламенения Ignition temperature	К	≥493
Температура вспышки Flash point	К	≥443
Массовая доля летучих веществ при 373 К за 6 часов Mass fraction of volatiles at 373 K in 6 hours	%	0,2 – 0,5
Кислотное число Acid number	мг КОН/г mg KOH/g	≤0,3
Число омыления Saponification number	мг КОН/г mg KOH/g	280 – 290
Иодное число Iodine number	г I ₂ /100 г. g I ₂ /100 g	≤5
Массовая доля брома Mass fraction of bromine	%	10 – 30
Удельное объемное сопротивление Specific volumetric resistance	ом • см ohm • cm	2 • 10 ⁹

Как видно из таблицы 3, массовая доля бромированного компонента в БДЭГФ изменяется в широких пределах при колебании массовой доли брома в пределах 10–30%. Следовательно, свойства бромированной системы могут заметно изменяться, что важно знать при использовании этой системы в производстве в качестве пластификатора.

Важным показателем, позволяющим определить область применения бромированной фталатсодержащей системы в качестве пластификатора полимерных материалов, является параметр растворимости, лежащий в основе теории совместимости органических систем [14].

Значения параметров растворимости соединений, входящих в БДЭГФ, рассчитанные по уравнению Смолла:

$$\delta = \frac{\sum Q}{\rho} = \frac{d \sum Q}{M},$$

где $\sum Q$ – сумма констант притяжения отдельных групп; d – плотность вещества; M – молекулярная

масса элементарного звена; ρ – мольный объем, и параметров растворимости некоторых полимеров [15–20] приведены в таблице 4. Экспериментально определенный для бромированной фталатсодержащей системы параметр растворимости $\delta = 35,3$ (кДж/м³)^{0,5}. Этому результату соответствует значение δ и для компонентов БДЭГФ. Следовательно, можно утверждать, что формула Смолла, в основном применяемая для индивидуального вещества, дает удовлетворительные результаты для сложных многокомпонентных систем.

Практически этим определяется область и условия применения бромированной многокомпонентной системы и условия применения БДЭГФ как пластификатора полимерных материалов.

Следует отметить, что обеспечить условие совместимости компонентов в виде $\delta_1 \approx \delta_2$ достаточно сложно. Поэтому следует выявить допустимые расхождения между δ_1 и δ_2 , при которых созданная при смешении система будет гомогенна и устойчива.

Таблица 4.
 Параметры растворимости бромированной системы и некоторых полимерных соединений

Table 4.

Solubility parameters of the brominated system and some polymer compounds

Соединение Compound	Параметр растворимости, $(\text{кДж/м}^3)^{0,5}$ Solubility parameter, $(\text{kJ/m}^3)^{0,5}$
Ди-2-этилгексилфталат Di-2-ethylhexyl phthalate	35,03*
2-этилгексил-2-этил-3,4-дибромгексилфталат 2-ethylhexyl-2-ethyl-3,4-dibromohexyl phthalate	36,16*
2-этилгексил-2-этил-2,3-дибромгексилфталат 2-ethylhexyl-2-ethyl-2,3-dibromohexyl phthalate	35,41*
Полибутилакрилат Polybutylacrylate	36,54
Полиизопрен Polyisoprene	34,44
Полистирол Polystyrene	35,70
Поливинилхлорид Polyvinyl Chloride	39,48
Поливинилацетат Polyvinyl Acetate	39,48
Диацетат целлюлозы Cellulose Diacetate	43,68
Нитроцеллюлоза Nitrocellulose	44,10
Этилцеллюлоза Ethyl cellulose	41,16
Ацетилцеллюлоза The acetate	46,62

*Значение параметра растворимости рассчитаны по уравнению Смолла. Они позволяют сделать достаточно определенные выводы о возможности создания термодинамически устойчивой физико-химической системы, включающей полимер и бромированную систему БДЭГФ

Предельное значение $\Delta\delta = (\delta_1 - \delta_2) \approx \mp 1,5$. Исходя из этого планируемая к использованию в качестве пластификатора бромированная система по данным таблицы 4 будет совмещаться с полибутилакрилатом, полиизопреном, поливинилацетатом. С эфирами целлюлозы такой эффект при 298 К невозможен. Однако его можно достичь при изменении условий, определяющих совместимость.

Так потенциал Z смешения можно изменить за счет члена $T\Delta S$ увеличением температуры. При этом можно при необходимости в системе увеличить массовую долю пластификатора, что соответственно приведет к увеличению ΔS . Нами проанализирован и другой путь обеспечения совместимости, в рамках которого полимеры, обладающие повышенным параметром совместимости, предварительно растворить в подходящем промышленном низкомолекулярном растворителе, способном растворять и компоненты БДЭГФ. В этом случае получаем новую термодинамическую систему с

более низкой энергией когезии, в которую затем можно ввести систему БДЭГФ без предварительного нагрева.

После сушки полученной композиции низкомолекулярный растворитель удаляется, а система приобретает низкую величину свободной энергии.

Заключение

Бромированная многокомпонентная физико-химическая система, представленная в большей степени сложными эфирами о-фталевой кислоты, может быть использована в качестве эффективного пластификатора полибутилакрилата, полиизопрена, поливинилхлорида, поливинилацетата, образуя со всеми гомогенную термодинамическую систему. Для пластификации эфиров целлюлозы с помощью исследуемой многокомпонентной системы необходимо повышать температуру смешения. Кроме того, полученный пластификатор предпочтительно вводить в раствор полимера в обычном низкомолекулярном растворителе.

Литература

- 1 Плотникова Р.Н. Исследование процесса нейтрализации бромсодержащих систем фталатного типа // Вестник ВГУИТ. 2020. Т. 82. № 4. С. 236–241. doi: 10.20914/2310-1202-2020-4-236-241
- 2 Искендерова С.А., Садиева Н.Ф., Эфендиева Л.М., Асадова Ш.Н. и др. Новые пластификаторы для эфиров целлюлозы // Пластические массы. 2020. № 1–2. С. 15–16.
- 3 Shelke M.E. Synthesis and evaluation of newly 1-substituted-(2H) – 2-thio-4-(3-substitutedthiocarbamido-1-yl) – 6-(2-imino-4-thio-5 – substitutedbiureto-1-yl) 1, 2-dihydro-S-triazines as potent antimicrobial agents // GSC Biological and Pharmaceutical Sciences. 2020. V. 13(3). P. 109–112. doi: 10.30574/gscbps.2020.13.3.0245
- 4 Хрипач Н., Барановский А. Применение спектроскопии в органической химии // Наука и инновации. 2013. № 3 (121). С. 6–9.

- 5 Elena A., Gozescu I., Dabici A., Sfirloaga P. et al. Organic Compounds FT-IR Spectroscopy // In Macro To Nano Spectroscopy. InTech. 2012. doi: 10.5772/50183
- 6 Ouhaddouch H., Cheikh A., Idrissi M.O.B., Draoui M. et al. FT-IR spectroscopy applied for identification of a mineral drug substance in drug products: Application to bentonite // Journal of Spectroscopy. 2019. doi: 10.1155/2019/2960845
- 7 Ермаков С.Н., Кравченко Т.П. Совместимость полимеров. Термодинамические и химические аспекты // Пластические массы. 2012. №. 4. С. 32-39.
- 8 ГОСТ 8728–88. Пластификаторы. Технические условия.
- 9 Казицина Л.А., Куплетская Н.Б. Применение УФ-, ИК-, ЯМР-спектроскопии в органической химии. М.: Книга по Требованию, 2012. 262 с.
- 10 Máquina A.D.V., Siteo B.V., Santana F.B. de, Santos D.Q. et al. Determination of Adulteration of the B10 Blend of Diesel and Crambe Biodiesel Using Proton Nuclear Magnetic Resonance (1H NMR) Spectroscopy with a Data Driven Soft Independent Modeling of Class Analogy (DD-SIMCA) Model // Analytical Letters. 2020. doi: 10.1080/00032719.2020.1782928
- 11 Hardinger S. Proton Nuclear Magnetic Resonance (1H-NMR) Spectroscopy // University of California, Los Angeles. 2015. P. 1–10.
- 12 Maul S., Giegling I., Rujescu D. Proton Magnetic Resonance Spectroscopy in Common Dementias—Current Status and Perspectives // Frontiers in Psychiatry. 2020. V. 11. P. 769. doi: 10.3389/fpsy.2020.00769
- 13 Boughendjioua H., Boughendjioua Z. Fourier transformed infrared spectroscopy analysis of constituents of Rosmarinus officinalis L. essential oil from Algeria // Inorganic materials. 2017. V. 14. P. 15. doi: 10.11648/j.ajop.20170503.12
- 14 Lee B., Yoo J., Kang K. Predicting the chemical reactivity of organic materials using a machine-learning approach // Chemical Science. 2020. V. 11. №. 30. P. 7813-7822. doi: 10.1039/d0sc01328e
- 15 Воронина Ю.К., Домбров В.А., Кондакова Н.Н., Лотменцев Ю.М. Термодинамическая совместимость каучуков различной полярности с 1,1' – бис(диметилсилил)ферроценом // Успехи в химии и химической технологии. 2014. V. 28. №. 2 (151).
- 16 Habib S., Fayyed E., Shakoor R.A., Kahraman R. et al. Improved self-healing performance of polymeric nanocomposites reinforced with talc nanoparticles (TNPs) and urea-formaldehyde microcapsules (UFMCs) // Arabian Journal of Chemistry. 2021. V. 14. №. 2. P. 102926. doi: 10.1016/j.arabjc.2020.102926
- 17 Bhat S.A., Zafar F., Mirza A.U., Mondal A.H. et al. NiO nanoparticle doped-PVA-MF polymer nanocomposites: Preparation, Congo red dye adsorption and antibacterial activity // Arabian Journal of Chemistry. 2020. V. 13. №. 6. P. 5724-5739. doi: 10.1016/j.arabjc.2020.04.011
- 18 Vanyorek L., Sikora E., Balogh T., Román K. et al. Nanotubes as polymer composite reinforcing additive materials—A comparative study // Arabian Journal of Chemistry. 2020. V. 13. №. 2. P. 3775-3782. doi: 10.1016/j.arabjc.2019.01.001
- 19 Kamoun E.A., Chen X., Eldin M.S.M., Kenawy E.R.S. et al. Crosslinked poly (vinyl alcohol) hydrogels for wound dressing applications: A review of remarkably blended polymers // Arabian Journal of chemistry. 2015. V. 8. №. 1. P. 1-14. doi: 10.1016/j.arabjc.2014.07.005
- 20 Said F.F., Ali B.F., Richeson D.S., Korobkov I. et al. Supramolecular structure of bis (N, N', N''-triisopropylguanidinium) phthalate // Arabian Journal of Chemistry. 2017. V. 10. P. S95-S99. doi: 10.1016/j.arabjc.2012.06.012

References

- 1 Plotnikova R.N. Investigation of the process of neutralization of bromine-containing phthalate-type systems. Proceedings of VSUET. 2020. vol. 82. no. 4. pp. 236–241. doi: 10.20914 / 2310–1202–2020–4–236–241 (in Russian).
- 2 Iskenderova S.A., Sadieva N.F., Efendieva L.M., Asadova Sh.N. et al. New plasticizers for cellulose ethers. Plastics. 2020. no. 1–2. pp. 15-16. (in Russian).
- 3 Shelke M.E. Synthesis and evaluation of newly 1 substituted-(2H) – 2 thio 4-(3 substitutedthiocarbamido 1 yl) – 6-(2 imino 4 thio 5 – substitutedbiureto 1 yl) 1, 2 dihydro-S-triazines as potent antimicrobial agents. GSC Biological and Pharmaceutical Sciences. 2020. vol. 13(3). pp. 109–112. doi: 10.30574/gscbps.2020.13.3.0245
- 4 Khripach N., Baranovskiy A. Application of spectroscopy in organic chemistry. Science and innovations. 2013. no. 3 (121). pp. 6-9. (in Russian).
- 5 Elena A., Gozescu I., Dabici A., Sfirloaga P. et al. Organic Compounds FT-IR Spectroscopy. In Macro To Nano Spectroscopy. InTech. 2012. doi: 10.5772/50183
- 6 Ouhaddouch H., Cheikh A., Idrissi M.O.B., Draoui M. et al. FT-IR spectroscopy applied for identification of a mineral drug substance in drug products: Application to bentonite. Journal of Spectroscopy. 2019. doi: 10.1155/2019/2960845
- 7 Ermakov S.N., Kravchenko T.P. Polymer compatibility. Thermodynamic and chemical aspects. Plastics. 2012. no. 4. pp. 32-39. (in Russian).
- 8 GOST 8728–88. Plasticizers. Technical conditions. (in Russian).
- 9 Kazitsina L.A., Kupletskaya N.B. Application of UV, IR, NMR spectroscopy in organic chemistry. Moscow, Book on Demand, 2012. 262 p. (in Russian).
- 10 Máquina A.D.V., Siteo B.V., Santana F.B. de, Santos D.Q. et al. Determination of Adulteration of the B10 Blend of Diesel and Crambe Biodiesel Using Proton Nuclear Magnetic Resonance (1H NMR) Spectroscopy with a Data Driven Soft Independent Modeling of Class Analogy (DD-SIMCA) Model. Analytical Letters. 2020. doi: 10.1080/00032719.2020.1782928
- 11 Hardinger S. Proton Nuclear Magnetic Resonance (1H-NMR) Spectroscopy. University of California, Los Angeles. 2015. pp. 1–10.
- 12 Maul S., Giegling I., Rujescu D. Proton Magnetic Resonance Spectroscopy in Common Dementias—Current Status and Perspectives. Frontiers in Psychiatry. 2020. vol. 11. pp. 769. doi: 10.3389/fpsy.2020.00769
- 13 Boughendjioua H., Boughendjioua Z. Fourier transformed infrared spectroscopy analysis of constituents of Rosmarinus officinalis L. essential oil from Algeria. Inorganic materials. 2017. vol. 14. pp. 15. doi: 10.11648/j.ajop.20170503.12

14 Lee B., Yoo J., Kang K. Predicting the chemical reactivity of organic materials using a machine-learning approach. *Chemical Science*. 2020. vol. 11. no. 30. pp. 7813-7822. doi: 10.1039/d0sc01328e

15 Voronina Yu.K., Dombrov V.A., Kondakova N.N., Lotmentsev. Yu.M. Thermodynamic compatibility of rubbers of different polarity with 1,1'-bis (dimethylsilyl) ferrocene. *Advances in chemistry and chemical technology*. 2014. vol. 28. no. 2 (151). (in Russian).

16 Habib S., Fayyed E., Shakoor R.A., Kahraman R. et al. Improved self-healing performance of polymeric nanocomposites reinforced with talc nanoparticles (TNPs) and urea-formaldehyde microcapsules (UFMCs). *Arabian Journal of Chemistry*. 2021. vol. 14. no. 2. pp. 102926. doi: 10.1016/j.arabjc.2020.102926

17 Bhat S.A., Zafar F., Mirza A.U., Mondal A.H. et al. NiO nanoparticle doped-PVA-MF polymer nanocomposites: Preparation, Congo red dye adsorption and antibacterial activity. *Arabian Journal of Chemistry*. 2020. vol. 13. no. 6. pp. 5724-5739. doi: 10.1016/j.arabjc.2020.04.011

18 Vanyorek L., Sikora E., Balogh T., Román K. et al. Nanotubes as polymer composite reinforcing additive materials—A comparative study. *Arabian Journal of Chemistry*. 2020. vol. 13. no. 2. pp. 3775-3782. doi: 10.1016/j.arabjc.2019.01.001

19 Kamoun E.A., Chen X., Eldin M.S.M., Kenawy E.R.S. et al. Crosslinked poly (vinyl alcohol) hydrogels for wound dressing applications: A review of remarkably blended polymers. *Arabian Journal of chemistry*. 2015. vol. 8. no. 1. pp. 1-14. doi: 10.1016/j.arabjc.2014.07.005

20 Said F.F., Ali B.F., Richeson D.S., Korobkov I. et al. Supramolecular structure of bis (N, N', N''-triisopropylguanidinium) phthalate. *Arabian Journal of Chemistry*. 2017. vol. 10. pp. S95-S99. doi: 10.1016/j.arabjc.2012.06.012

Сведения об авторах

Раиса Н. Плотникова к.х.н., доцент, кафедра промышленной экологии, оборудования химических и нефтехимических производств, Воронежский государственный университет инженерных технологий, пр-т Революции, 19, г. Воронеж, 394036, Россия, yy@vsuet.ru

 <https://orcid.org/0000-0001-9559-4443>

Information about authors

Raisa N. Plotnikova Cand. Sci. (Chem.), associate professor, industrial ecology, equipment for chemical and petrochemical plants department, Voronezh State University of Engineering Technologies, Revolution Av., 19 Voronezh, 394036, Russia, yy@vsuet.ru

 <https://orcid.org/0000-0001-9559-4443>

Вклад авторов

Раиса Н. Плотникова написала рукопись, корректировала её до подачи в редакцию и несет ответственность за плагиат

Contribution

Raisa N. Plotnikova wrote the manuscript, correct it before filing in editing and is responsible for plagiarism

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Conflict of interest

The authors declare no conflict of interest.

Поступила 20/01/2021	После редакции 20/02/2021	Принята в печать 02/03/2021
Received 20/01/2021	Accepted in revised 20/02/2021	Accepted 02/03/2021