

# 检索萨特勒 (Sadtler) 红外光谱库鉴定聚合物样品

Dana Garcia, Arkema Group  
King Of Prussia, PA, USA



Spectroscopy

280059

## Abstract

聚合物样品的鉴定是一个特殊的挑战。通常情况下，很少会遇到单一成分的聚合物。大多情况聚合物的配方复杂，主要成分是聚合物，次要成分可能是有机物（包括改性剂、加工助剂和增塑剂）和无机物（填充物、阻燃物）。用样品红外光谱检索萨特勒 (Sadtler) 红外谱库是一个有效的鉴定手段。本文将介绍一个实际分析案例。

## 实验

通过切片机获得未知物的薄片样品，经过CHCl<sub>3</sub>萃取后通过Analect傅里叶红外显微镜获取红外谱图，谱图分辨率为4cm<sup>-1</sup>，扫描次数为64次。

可溶性残留物也在相同的实验条件下进行了红外显微测定。在经过四氢呋喃溶解后，不溶部分被分离出来进行溴化钾压片测定，谱图分辨率为4cm<sup>-1</sup>，扫描次数为100次。

所有的傅里叶红外光谱图都经过基线校正并转换为萨特勒数据格式。所有数据采用萨特勒软件进行了归一化校正，在检索时采用欧氏距离算法。对于缩减MCT测试范围的样品，检索范围的低端设置为800cm<sup>-1</sup>。

## 分析：萨特勒 (Sadtler) 数据库检索

在单体和聚合物光谱数据库中检索原样品光谱，所得结果如图1所示。从匹配表可知样品的主要组分为PVC，而匹配系数（HQI）则显示未知样品配方与光谱数据库中的配方存在差异。

基于初步鉴定的结果，我们将样品溶于四氢呋喃，以除去PVC组分。不溶部分的光谱如图2所示，表明样品中有无机物。在无机物与聚合物添加剂光谱库中检索后发现，该物质的光谱与CaCO<sub>3</sub>的光谱匹配。随后，我们将CHCl<sub>3</sub>萃取物光谱与匹配表中的谱库光谱进行比较。

通过比较分析，我们得出以下结论：样品中仍存在极少量PVC。然后，我们在单体、聚合物和塑化剂光谱数据库中检索萃取物光谱，所得结果如图3所示。经过进一步鉴定，我们确

定该物质为Elvaloy，它是一种醋酸乙烯酯/一氧化碳/乙烯的共聚物\*，用作PVC改性剂。匹配系数之所以为997，除了基线的差异、PVC残留的因素之外，还要归因于我们的物质的单体比例与光谱库中的化合物存在差异。

## 结论

根据结果可以推断此未知物是一个包含CaCO<sub>3</sub>和Elvaloy改性剂的PVC。使用萨特勒数据库可以快捷的确定聚合物中的主要成分，选择适当的萃取溶剂可进行添加剂的识别。如果没有数据库，需要浪费大量的人力去进行谱图比对，而且还不一定能够保证获得成功。

## 编辑注释

\*此处Elvaloy™由《Index of Polymer Trade Names》，VCH Publishers, New York, NY中来。Bio-Rad萨特勒数据库用户会发现Bio-Rad进一步收集了很多重要的物化及商品属性。

图 1.

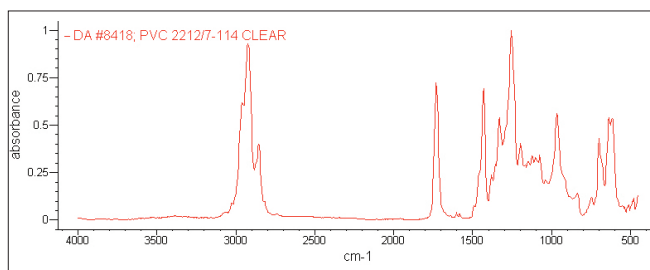
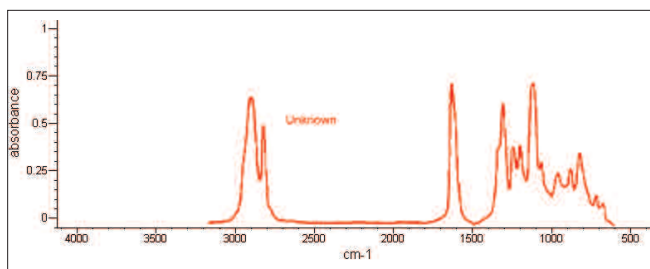


图 3.

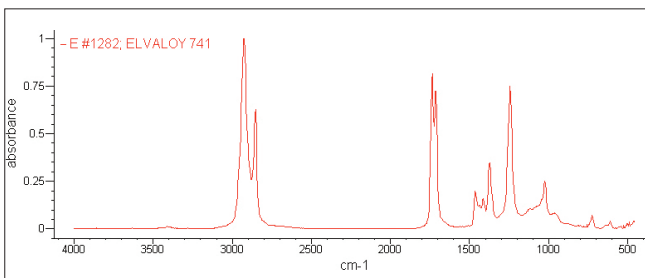
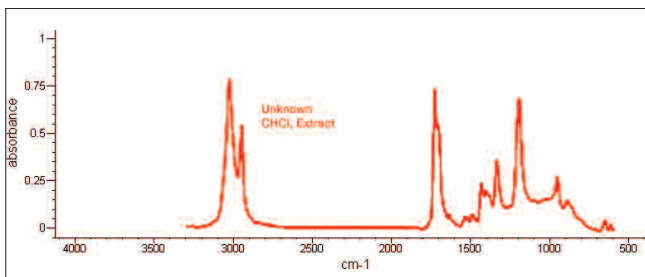
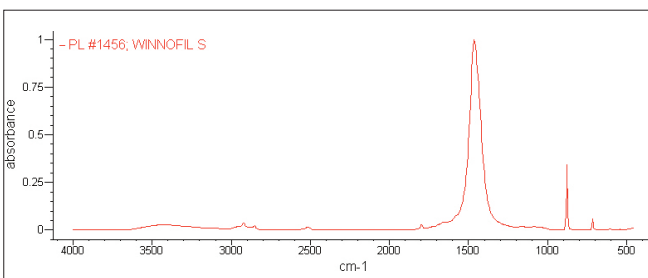
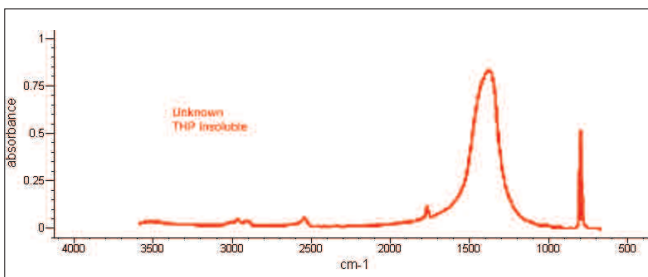


图 2.



Bio-Rad  
Laboratories, Inc.