

用分子拓扑参数预估多硝基芳香族化合物的撞击感度

导航/NAVIGATE

[本期目录/Table of Contents](#)

[下一篇/Next Article](#)

[上一篇/Previous Article](#)

工具/TOOLS

[引用本文的文章/References](#)

[下载 PDF/Download PDF\(824KB\)](#)

[立即打印本文/Print Now](#)

[导出](#)

统计/STATISTICS

摘要浏览/Viewed

全文下载/Downloads 509

评论/Comments 199



《火炸药学报》[ISSN:1007-7812/CN:61-1310/TJ] 卷: 期数: 2010年第6期 页码: 5-10 栏目: 出版日期: 2010-12-30

Title: Predication on Impact Sensitivity of Polynitroaromatic Compounds using Principal Component Regression

作者: [杜军良](#); [舒远杰](#); [周阳](#); [罗娅君](#); [胡晓黎](#); [边清泉](#)

1.绵阳师范学院化学与化学工程系, 四川 绵阳 621000; 2.中国工程物理研究院化工材料研究所, 四川 绵阳 621900

Author(s): -

关键词: [材料科学](#); [主成分回归](#); [撞击感度](#); [多硝基芳香族化合物](#); [量子化学](#)

Keywords: -

分类号: -

DOI: -

文献标志码: A

摘要: 引入主成分回归研究了36种多硝基芳香族化合物(PNAC)分子的撞击感度。在DFT-B3LYP/6-311+G(d,p)水平上对这些炸药分子进行了分子优化和频率振动分析。结合炸药分子的拓扑结构参数和所得的量化结构参数, 最终确定硝基个数、氨基个数、芳香性NICS(1)、最长C-NO₂键键长、HOMO以及 α -C—H(0、1)6个参数与撞击感度($\lg H_{50}$)具有较好的相关性。以这6个参数作为主成分回归的输入参数构建模型, 得到测试集的决定系数 R^2 和交叉验证系数 R^2_{adj} 分别为0.97和0.89, 优于由氧平衡指数确定的传统模型的0.91和0.33。得出主成分回归是一种研究撞击感度的有效方法。

Abstract: -

参考文献/References:

相似文献/References:

- [1]王 昕.美国不敏感混合炸药的发展现状[J].火炸药学报,2007,(2):78.
- [2]田广丰,康建成,胥会祥,等.小型推进剂管状装药药形尺寸数字化检测技术[J].火炸药学报,2006,(4):61.
- [3]王海鹰,李斌栋,吕春绪,等.硼酸酯表面活性剂的研究及应用[J].火炸药学报,2006,(3):36.
- [4]赵省向,戴致鑫,张成伟,等.DNTF及其低共熔物对PBX可压性的影响[J].火炸药学报,2006,(3):39.
- [5]王保国,张景林,陈亚芳,等.含超细高氯酸铵核-壳型复合材料的制备[J].火炸药学报,2006,(3):54.
- [6]杨光成,聂福德,曾贵玉.超细TATB-BTF核-壳型复合粒子的制备[J].火炸药学报,2005,(2):72.
- [7]谭武军,李 明,黄 辉.RDX和HMX晶体压制方程的对比研究[J].火炸药学报,2007,(5):8.
- [8]王 昕,彭翠枝.国外六硝基六氮杂异伍兹烷的发展现状[J].火炸药学报,2007,(5):45.
- [9]陈 胜,刘云飞,姚维尚.组分对高能HTPB推进剂燃烧性能和力学性能的影响[J].火炸药学报,2007,(5):62.
- [10]唐 维,李 明,庞海燕,等.修正时间硬化理论的PBX蠕变模型及其应用[J].火炸药学报,2007,(6):1.

备注/Memo: -

更新日期/Last Update: