

研究论文

拓扑量子方法估算液相链烷烃导热率

高硕; 曹晨忠

(中南大学化学化工学院, 长沙 410083; 湖南科技大学化学化工学院, 湖南 湘潭 411201)

摘要:

用烷烃分子C—C键和C—H键键邻接矩阵特征根衡量分子中价电子被束缚的强弱程度, 以该参数和烷烃的支化参数以及温度为变量, 对含有5~24个碳原子的液相烷烃在较大温度范围内的导热率建立一个4参数拟合方程:

$\lambda = 0.7568 - 0.2728(\sum X1CC)/NC - C + 1.5171(\sum X1CH)/NC - H + 7.4 \times 10^{-5} \sum Sij + 2.0966T - 0.4$ 该模型用于导热率估算, 其标准偏差仅为0.0033 W·m⁻¹·K⁻¹, 相对平均误差仅为2.11%. 用上述方程对拟合集以外的9个烷烃分子的导热率进行预测, 其预测的相对平均误差仅为1.64%, 该预测精度在实验误差范围内. 因此, 此方程可用于化工设计中估算还未经实验测定的液相烷烃的导热率.

关键词: 拓扑量子方法 键邻接矩阵 特征根 导热率 烷烃

收稿日期 2006-06-06 修回日期 2006-07-19 网络版发布日期 2006-12-06

通讯作者: 曹晨忠 Email: czcao@hnust.edu.cn

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

PDF(187KB)

服务与反馈

把本文推荐给朋友

加入我的书架

加入引用管理器

引用本文

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 拓扑量子方法

▶ 键邻接矩阵

▶ 特征根

▶ 导热率

▶ 烷烃

本文作者相关文章

▶ 高硕

▶ 曹晨忠