

研究论文

单烯烃分子结构有限元方法及定量结构-沸点相关性研究

仇明华* 刘凤萍 谢文林

(湖南科技大学化学化工学院 湘潭 411201)

收稿日期 2008-4-14 修回日期 2008-5-28 网络版发布日期 2008-11-5 接受日期 2008-6-23

摘要

按照有限元方法, 将烯烃分子中的“C—C”单键和“C=C”双键当作两种不同的线性杆元处理, 构建单烯烃分子的刚度矩阵, 连同质量矩阵求解相应的特征方程, 得到单烯烃分子的结构特征参量——固有频率, 将其用于定量结构-沸点预测模型, 对150个单烯烃分子的沸点实验测定值进行多元回归分析, 结果表明, 单烯烃分子结构与沸点性质间存在高相关性, 说明该方法是合理可行的.

关键词

[有限元方法](#) [线性杆元](#) [单烯烃分子](#) [结构固有频率](#) [定量结构-性质相关](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

仇明华 mhqi@hnust.edu.cn

作者个人主页:

仇明华* 刘凤萍 谢文林

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF](#)(431KB)

▶ [\[HTML全文\]](#)(0KB)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [参考文献](#)

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](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“](#)

[有限元方法” 的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)