

引用信息: LIU Wan-qiang; WANG Xue-ye; LI Xin-fang; LONG Qing-ping; WEN Xiao-hong; LI Jianjun. Acta Phys. -Chim. Sin., 2005, 21(06): 596-601 [刘万强; 王学业; 李新芳; 龙清平; 文小红; 李建军. 物理化学学报, 2005, 21(06): 596-601]

[本期目录](#) | [下期目录](#) | [过刊浏览](#) | [高级检索](#)

[\[打印本页\]](#) [\[关闭\]](#)

## 聚丙烯酸酯类 $T_g$ 的量子化学-神经网络研究

刘万强; 王学业; 李新芳; 龙清平; 文小红; 李建军

湘潭大学化学学院, 湘潭 411105; 江苏出入境检验检疫局, 南京 210005

### 摘要:

用密度泛函方法在6-31G(d)基组上优化了38种聚丙烯酸酯类的结构单元, 得到了其单元的量子化学参数, 探讨了这些参数与聚丙烯酸酯类玻璃化温度( $T_g$ )的关系. 计算表明, 影响聚丙烯酸酯类  $T_g$  的主要因素有结构单元的侧链长度、侧链的分支数、最高占据轨道能级、极化率、偶极矩、等体积热容和热力学能等参数. 用模式识别方法(偏小二乘法)讨论了这些参数与  $T_g$  的定性关系, 两类  $T_g$  大小不同的聚合物基本分布在不同区域, 用逐步回归和人工神经网络方法建立了这些参数与  $T_g$  的定量关系, 2种方法的预测结果与实验值的相关系数分别为0.9753、0.9985, 标准偏差分别为18.42、4.25, 预报结果与实验值基本一致.

关键词: 聚丙烯酸酯 玻璃化温度 量子化学参数 定量结构-性质关系 人工神经网络

收稿日期 2004-10-15 修回日期 2004-12-10 网络版发布日期 2005-06-15

通讯作者: 王学业 Email: wxueye@xtu.edu.cn

[本刊中的类似文章](#)

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

[PDF\(254KB\)](#)

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

▶ [聚丙烯酸酯](#)

▶ [玻璃化温度](#)

▶ [量子化学参数](#)

▶ [定量结构-性质关系](#)

▶ [人工神经网络](#)

本文作者相关文章

▶ [刘万强](#)

▶ [王学业](#)

▶ [李新芳](#)

▶ [龙清平](#)

▶ [文小红](#)

▶ [李建军](#)