

# 从分子结构式估算凝聚炸药最高装药密度

周富信 唐沧雅 陈致英

(中国科学院力学研究所)

**摘要** 本文应用对应态原理建立了一种从凝聚炸药的分子结构式估算其最高装药密度的经验方法。应用此法对101种环状化合物的密度进行了估算, 计算值与实验值的平均偏差为1.08%。与类似工作相比, 本文方法精度较高, 使用方便。

**关键词** 炸药; 密度; 分子结构; 对应态。

## 1. 引言

从凝聚炸药的分子结构出发预估它的爆轰性质不仅对炸药设计和合成工作有重要经济价值, 而且对于发展一种基于微观理论的凝聚炸药爆轰性质研究具有深远的理论意义。这种理论研究正是物理力学的目的之一。为了从理论上对一种设想的新炸药预估它的爆轰性质, 必须解决三个方面的问题, 第一个是建立一个基于分子间相互作用的爆轰性质的流体力学理论, 作者在文献[1]中讨论了这个问题; 另外两个问题就是从炸药的分子结构式出发预估它的密度和生成焓。本文的目的是建立一种预估炸药密度的方法。为了使这种估算具有普适的性质, 我们引入一个使密度无量纲化的量 $d_0$ —克分子量/克分子折射度, 应用对应态原理对大量环状化合物的实验密度数据进行分析和整理, 找到分子的微观结构和密度之间的关系。由此, 提出一个关于化合物密度(对固体炸药而言, 是指最高装药密度)的近似计算公式和计算方法。用此法计算了101种环状化合物的密度, 并将其中54种的计算结果与Tarver采用集团加合性方法估算的密度作了比较<sup>[2]</sup>。

## 2. 化合物密度的对应态关系

为了建立从分子结构式计算化合物密度 $d$ 的对应态关系式。首先, 我们采用一个具有体积量纲的分子参数, 波长为 $5.890 \times 10^{-4}$  mm下的克分子折射度 $R_D$ , 将 $d$ 无量纲化。克分子折射度表示分子全部电子的极化度, 它还具有以下重要特点。第一, 它可以从分子的全部化学键的键折射度进行加合而求得, 因此, 它能反映分子的全部结构特性, 第二, 它与物质的聚集态无关<sup>[3]</sup>, 也就是说, 它仅与分子本身的特性有关, 而与分子在聚集态物质中的排列无关。由以上特点, 可以认为它是一个与分子固有体积有关的参数。因此, 在我们的对应态关系中, 把它看作分子的固有体积来处理。

考虑到克分子折射度与化合物密度的关系式<sup>[3]</sup>

$$R_D = \frac{(n^2 - 1)M}{(n^2 + 2)d} \quad (1)$$

其中 $M$ 是克分子量,  $n$ 是折射率(在同一波长下), 我们可以写出以下关系

国家自然科学基金资助项目。

1987年12月6日收到原稿, 1988年4月30日收到修改稿。

$$d = a d_0 \quad (2)$$

其中  $d_0 = M/R_D$  称为化合物分子的固有密度,  $a$  是无量纲密度, 它与分子在聚集态物质中排列的空隙度有关。事实上,  $a$  的数值在 0 与 1 之间,  $a$  愈大表明分子排列的空隙愈少。

对于每种物质, 由实验的  $d$  值与通过  $R_D$  计算的分子固有密度  $d_0$  值可以确定出经验的  $a$  值。由于  $a$  值反映了分子排列的空隙度, 分子形状相似的物质, 其  $a$  值相近。根据这个思想, 我们对五环、六环、八环等化合物的  $a$  值进行了分析与整理, 得到以下结论: 1. 各种不同环结构的物质具有各自的环对  $a$  值的贡献, 这一部分叫做环值  $a_0$ , 2. 环上各种不同结构因素对  $a$  值的贡献叫做修正值  $R(x)$ , 将各种修正值加到  $a_0$  上去就是某一类化合物的  $a$  值, 以公式表示

$$a = a_0 + \sum R(x) \quad (3)$$

### 3. 计算方法

#### (1) 关于 $d_0$ 的计算

因为化合物的克分子折射度  $R_D$  等于该化合物分子的所有化学键的键折射度  $R_{DB}$  之和, 而  $R_{DB}$  是已知的微观数据 (表 1) 所以对已知分子结构的化合物, 很容易求得它的折射度, 从而算出固有密度  $d_0$  来。

#### (2) 关于 $a$ 的计算

从大量实验数据, 经过分析和整理, 可以总结出五环、六环和八环化合物的  $a_0$  值和相应于各种不同附加集团 (或其它性质, 如双键, 固态等) 的修正值  $R(x)$ ,  $a_0$  和  $R(x)$  值都列于表 2。根据分子结构式在表 2 中查出  $a_0$  和  $R(x)$  值, 再由公式 (3) 求出这种环状化合物的  $a$  值。

最后, 综合上述两步的结果, 由 (2) 式就可得到某一环状化合物的密度计算值  $d$ 。

表 1 键的折射度

键	$R_{DB} (\text{cm}^3)$	键	$R_{DB} (\text{cm}^3)$
C—H	1.676	C=N	4.82
C—C	1.296	O—H 在醇中	1.66
C=C	4.17	O—H 在酸中	1.80
C—O 在酯中	1.54	N—H	1.76
C—O 在缩醛中	1.46	N—O	2.43
C—O	3.32	N→O 在硝基烷属烃 $\text{R}-\text{N} \begin{smallmatrix} \nearrow \text{O} \\ \searrow \text{O} \end{smallmatrix}$	1.78
C—O 在甲酮中	3.49	N=O	4.00
C—N	1.57	N—N	1.99
C=N	3.76	N=N	4.12

说明: 抄自文献 [3] 第 251 页

表2 环状化合物的  $a_0$  和各种修正值  $R(x)$ 

		五环化合物	六环化合物	八环化合物
$a_0$	(C, O) 环	0.250	0.260	
	(C) 环	0.260或 0.243 <sup>a</sup>	0.265	0.275
	(C, N) 环	0.260或 0.270 <sup>a</sup>	0.265	0.275
$R(x)$	R(II)	0.015	0.01或 0.01133 <sup>b</sup>	0.01
	R(N-N, N-NO <sub>2</sub> , N-H)	0.01	0.012	0.012
	R( $C \begin{smallmatrix} H \\ \diagdown \\ NO_2 \end{smallmatrix}$ )	0.01	0.01	
	R(C-OH)		0.01 <sup>d</sup>	
	R(C-NH <sub>2</sub> ), C-N $\begin{smallmatrix} H \\ \diagdown \\ CH_3 \end{smallmatrix}$		0.014	
	R( $\begin{array}{c} NO_2 \\ \text{C}_6\text{H}_4 \\ NO_2 \end{array}$ )		0.015	
	R( $\begin{array}{c} CH_3 \\ \text{C}_6\text{H}_4 \end{array}$ )		0.004	
	R(固)	0.04	0.045	0.04

说明: ①第二列括号中: C, O, N 表示组成环的元素; II 表示环上元素本身出现一个双键; N-N 表示环上的元素本身出现一个 N-N 键; N-NO<sub>2</sub>, N-H,  $C \begin{smallmatrix} H \\ \diagdown \\ NO_2 \end{smallmatrix}$ , C-OH, C-NH<sub>2</sub>,  $C-N \begin{smallmatrix} H \\ \diagdown \\ CH_3 \end{smallmatrix}$  表示环上的 N 或 C 与上述的元素或基联接; 第10行括号中表示环上的元素与 NO 联接的个数仅有两个而且是对位; 第11行括号中表示苯环上的元素与一个 CH<sub>3</sub> 联接; (固) 表示该化合物为固体, 如果是液体不加 R(固)。

②a 表示环上元素都仅与 H 联接时所取的值; b 表示环为苯环时, 环上每一个双键所取的值; d 表示环上的元素与 OH 联接的个数大于 4 时, 就要从总数中减去一个来计算相应的  $R(x)$  值, 但为苯环时, 如环上的元素与 NO<sub>2</sub> 联接的个数大于 2 时, 环上元素与 OH 联接时, 就不计算相应的  $R(x)$  值。

#### 4. 计算结果和讨论

本文对五环, 六环和八环化合物的  $a$  值和密度的计算结果列在表3。为了与文献 [2] 的结果进行比较, 在表3中也列出了文献 [2] 中 54 种环状化合物估算密度的偏差值。表4 给出了本文对 101 种环状化合物密度估算结果精度的总结。同时, 在表5 中列出了

本文与文献[2]中54种化合物计算结果精度的总结。对于本文其余48种化合物,我们也用文献[2]的方法进行了估算,但因为文献[2]所给出的集团数据不够,仅能估算其中8种化合物的密度,并将估算密度精度与本文的进行了比较,列在表6中。

以上各表表明,本文对环状化合物密度的计算给出的精度较高,而且方法简单,普适性较好。对于预测新化合物密度,只要该化合物能用本文所给出的规律求出 $a$ ,它的密度计算值就可能接近它的实验值。

表 3 五环、六环、八环化合物

序号	化合物 分子式	分子量	$d_0$	$a$	计算密度 (g/cm <sup>3</sup> )	实验密度 (g/cm <sup>3</sup> )	偏 差 (%)	文献[2] 计算偏差 (%)
1	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub>	70.14	3.0181	0.245	0.73943	0.74570	0.8	2.4
2	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> O	72.12	3.5395	0.250	0.88486	0.8892	0.5	1.1
3	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> N	71.12	3.2042	0.270	0.86513	0.852	1.5	2.5
4	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> N	67.09	3.1587	0.300	0.9476	0.9691	2.2	0.9
5	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> N	69.11	3.1822	0.285	0.9069	0.9097	0.3	0.4
6	C <sub>5</sub> H <sub>8</sub>	68.13	2.9931	0.260	0.7782	0.772	0.8	3.4
7	C <sub>5</sub> H <sub>6</sub>	66.10	2.9663	0.275	0.8157	0.8021	1.7	4.5
8	C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> O	84.19	3.6276	0.260	0.9432	0.9487	0.6	2.1
9	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> NO <sub>2</sub>	115.13	3.9818	0.270	1.0751	1.0776	0.2	1.65
10	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	100.12	4.22	0.250	1.055	1.047 <sup>a</sup>	0.8	
11	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	98.10	4.00	0.265	1.06	1.076 <sup>a</sup>	1.5	
12	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> O <sub>3</sub>	154.17	3.8714	0.280	1.084	1.088 <sup>a</sup>	0.4	
13	C <sub>8</sub> H <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	98.06	4.9836	0.305	1.52	1.50 <sup>b</sup>	1.3	
14	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub>	112.22	3.0088	0.260	0.7823	0.7761 <sup>a</sup>	0.8	
15	C <sub>16</sub> H <sub>28</sub> O <sub>2</sub>	252.40	3.3273	0.275	0.915	0.915 <sup>a</sup>	0	
16	C <sub>8</sub> H <sub>13</sub> N <sub>5</sub> O <sub>15</sub>	431.23	5.25	0.300	1.575	1.57 <sup>c</sup>	0.3	
17	C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> N	113.20	3.1081	0.260	0.8081	0.8171	1.1	
18	C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> N	97.16	3.1229	0.275	0.8588	0.8554 <sup>a</sup>	0.4	
19	C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> N	95.15	3.0931	0.290	0.897	0.8881 <sup>a</sup>	1.0	
20	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub>	82.11	3.2863	0.300	0.9859	0.9929 <sup>a</sup>	0.7	
21	C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>1</sub>	156.10	4.8545	0.340	1.6505	1.626 <sup>a</sup>	1.5	
22	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub>	70.09	3.4948	0.295	1.031	1.017 <sup>a</sup>	1.4	
23	C <sub>8</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	168.11	4.4471	0.350	1.556	1.565	0.5	0.5
24	C <sub>8</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	168.11	4.4471	0.350	1.556	1.575	1.2	0.2
25	C <sub>8</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O <sub>1</sub>	168.11	4.4471	0.365	1.623	1.625	0.1	3.3

续表3

序号	化合物 分子式	分子量	$d_0$	$a$	计算密度 (g/cm <sup>3</sup> )	实验密度 (g/cm <sup>3</sup> )	偏差 (%)	文献[2] 计算偏差 (%)
26	C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	213.11	4.9018	0.350	1.716	1.688	1.6	1.2
27	C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>6</sub>	213.11	4.9018	0.350	1.716	1.73	0.8	1.2
28	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> O <sub>12</sub>	348.10	5.7539	0.350	2.014	1.988	1.3	1.7
29	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	184.11	4.6816	0.360	1.685	1.702	1.0	2.6
30	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	184.11	4.6816	0.360	1.685	1.681	0.2	1.4
31	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	184.11	4.6816	0.360	1.685	1.683	0.1	1.5
32	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	184.11	4.6816	0.360	1.685	1.672	0.8	0.8
33	C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>7</sub>	229.10	5.0911	0.350	1.782	1.763	1.1	0.9
34	C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>8</sub>	245.10	5.2682	0.350	1.844	1.829	0.8	0.8
35	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O <sub>1</sub>	182.14	4.2907	0.346	1.485	1.521	2.4	1.1
36	C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>6</sub>	227.13	4.7197	0.346	1.633	1.654	1.3	1.1
37	C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>6</sub>	227.13	4.7197	0.346	1.633	1.620	0.8	1.0
38	C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>6</sub>	227.13	4.7197	0.346	1.633	1.620	0.8	1.0
39	C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>6</sub>	241.16	4.5698	0.342	1.563	1.604	2.6	1.7
40	C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>6</sub>	241.16	4.5698	0.342	1.563	1.590	1.7	0.8
41	C <sub>9</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O <sub>6</sub>	255.19	4.4443	0.338	1.50	1.48	1.5	3.2
42	C <sub>6</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>1</sub>	183.12	4.4429	0.364	1.617	1.615	0.1	2.4
43	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub> O <sub>6</sub>	228.12	4.8650	0.364	1.771	1.762	0.5	0.7
44	C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> N <sub>7</sub> O <sub>8</sub>	273.12	5.1960	0.364	1.891	1.867	1.3	0
45	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> N <sub>5</sub> O <sub>6</sub>	243.14	4.8334	0.378	1.827	1.867	0.5	0.1
46	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>6</sub> O <sub>6</sub>	258.15	4.8057	0.392	1.884	1.935	2.8	2.1
47	C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>7</sub>	243.13	4.8971	0.346	1.694	1.69	0.3	1.0
48	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>3</sub>	132.12	4.4055	0.317	1.397	1.363	2.5	0.2
49	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub> O <sub>4</sub>	176.13	4.6571	0.349	1.625	1.638	0.8	0.3
50	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> N <sub>6</sub> O <sub>6</sub>	222.12	5.1914	0.346	1.796	1.806	0.5	1.4
51	C <sub>7</sub> H <sub>9</sub> N	107.16	3.0877	0.319	0.9850	0.9891	0.4	2.2
52	C <sub>9</sub> H <sub>13</sub> N	135.21	3.0728	0.305	0.9372	0.9443	0.8	0.7
53	C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> N	121.18	3.0792	0.305	0.9392	0.9625	2.4	0.5
54	C <sub>10</sub> H <sub>15</sub> N	149.24	3.0557	0.305	0.9320	0.9351	0.3	1.2
55	C <sub>12</sub> H <sub>19</sub> N	177.29	3.0496	0.305	0.9301	0.9104	2.2	1.0
56	C <sub>10</sub> H <sub>15</sub> N	149.24	3.0676	0.305	0.9356	0.9323	0.4	1.4

续表 3

序号	化合物 分子式	分子量	$d_0$	$a$	计算密度 (g/cm <sup>3</sup> )	实验密度 (g/cm <sup>3</sup> )	偏 差 (%)	文献 [2] 计算偏差 (%)
57	C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> N <sub>5</sub> O <sub>8</sub>	287.14	4.9732	0.350	1.7406	1.73	0.6	0.5
58	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub>	84.16	3.0178	0.265	0.7997	0.7786	2.7	2
59	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> O	86.14	3.4423	0.260	0.8950	0.881	1.6	0.9
60	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> N	85.15	3.1720	0.277	0.8786	0.8606	1.8	0.9
61	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> NO	87.12	3.6330	0.272	0.9882	1.0005	1.2	1.3
62	C <sub>6</sub> H <sub>10</sub>	82.15	2.9971	0.275	0.8242	0.8102	1.8	2.3
63	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub>	80.14	2.9756	0.285	0.8481	0.8405	0.9	1.9
64	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub>	80.14	2.9756	0.285	0.8481	0.8471	0.1	2.7
65	C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> O	98.14	3.5231	0.265	0.9336	0.9478	1.5	1.7
66	C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>2</sub>	129.15	3.8484	0.275	1.0583	1.061	0.3	1.4
67	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	98.11	3.9769	0.260	1.034	1.034 <sup>a</sup>	0	
68	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	86.09	3.9667	0.270	1.071	1.083 <sup>a</sup>	1.1	
69	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	116.16	3.7300	0.270	1.007	1.007 <sup>a</sup>	0	
70	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O <sub>5</sub>	180.16	4.8343	0.345	1.668	1.654 <sup>a</sup>	0.9	
71	C <sub>10</sub> H <sub>20</sub>	140.27	3.0130	0.265	0.7984	0.8135 <sup>a</sup>	1.9	
72	C <sub>13</sub> H <sub>22</sub> O	194.32	3.1604	0.275	0.8691	0.8814 <sup>a</sup>	1.4	
73	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>	134.22	2.9693	0.285	0.8463	0.8672 <sup>a</sup>	2.4	
74	C <sub>10</sub> H <sub>12</sub> O	148.21	3.293	0.305	1.0013	0.9849 <sup>a</sup>	1.7	
75	C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>4</sub>	167.12	4.3657	0.350	1.528	1.550 <sup>c</sup>	1.4	
76	C <sub>9</sub> H <sub>19</sub> N	141.26	3.0959	0.265	0.8204	0.8376 <sup>a</sup>	1.5	
77	C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> N	97.16	3.275	0.287	0.9399	0.9133 <sup>a</sup>	2.9	
78	C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> N	79.10	3.2177	0.295	0.949	0.978 <sup>a</sup>	2.9	
79	C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub>	94.12	3.430	0.295	1.012	1.029 <sup>a</sup>	1.7	
80	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub>	119.13	3.6296	0.305	1.107	1.078 <sup>c</sup>	2.7	
81	C <sub>3</sub> N <sub>12</sub>	204.11	4.5286	0.340	1.54	1.54 <sup>f</sup>	0	
82	C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> O	128.22	3.3025	0.275	0.9082	0.9250 <sup>c</sup>	1.8	
83	C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>	172.27	3.4687	0.285	0.9886	0.9950 <sup>a</sup>	0.6	
84	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O <sub>5</sub>	164.16	4.6338	0.350	1.622	1.585 <sup>c</sup>	2.3	
85	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O <sub>6</sub>	180.16	4.8702	0.360	1.753	1.752 <sup>b</sup>	0.1	
86	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>3</sub>	139.11	4.1344	0.360	1.488	1.485 <sup>d</sup>	0.2	
87	C <sub>9</sub> H <sub>19</sub> N	141.26	3.1132	0.279	0.8686	0.8752 <sup>a</sup>	0.7	

续表 3

序号	化合物 分子式	分子量	$d_0$	$a$	计算密度 (g/cm <sup>3</sup> )	实验密度 (g/cm <sup>3</sup> )	偏差 (%)	文献[2] 计算偏差 (%)
88	C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>2</sub>	165.19	3.6129	0.319	1.153	1.117 <sup>a</sup>	3.2	
89	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	182.14	4.3611	0.364	1.587	1.558 <sup>a</sup>	1.9	
90	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	183.12	4.450	0.364	1.620	1.615 <sup>a</sup>	0.3	
91	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	138.13	3.8861	0.364	1.42	1.43 <sup>c</sup>	1.1	
92	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> N <sub>6</sub>	126.12	4.0974	0.382	1.565	1.573 <sup>c</sup>	0.5	
93	C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub>	94.12	3.4032	0.307	1.045	1.049 <sup>a</sup>	0.4	
94	C <sub>8</sub> H <sub>16</sub>	112.22	3.0149	0.275	0.8291	0.8349 <sup>a</sup>	0.7	
95	C <sub>8</sub> H <sub>14</sub>	110.20	2.9944	0.285	0.8534	0.850 <sup>a</sup>	0.4	
96	C <sub>8</sub> H <sub>12</sub>	108.18	2.9790	0.295	0.8788	0.8818 <sup>a</sup>	0.3	
97	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub>	106.17	2.9620	0.305	0.9034	0.8971 <sup>a</sup>	0.7	
98	C <sub>8</sub> H <sub>8</sub>	104.15	2.9517	0.315	0.9298	0.9206 <sup>a</sup>	1.0	
99	C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> N	127.23	3.1236	0.275	0.859	0.853 <sup>c</sup>	0.7	
100	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> N <sub>6</sub> O <sub>8</sub>	296.16	5.1914	0.363	1.884	1.90	0.8	2.63
101	C <sub>8</sub> H <sub>14</sub>	110.20	3.1629	0.275	0.8698	0.8638 <sup>a</sup>	0.7	

说明: ① 序号: 1—22为五环化合物, 23—93为六环化合物, 94—101为八环化合物; ② 表中实验数据未注明引文者取自文献[2]。a, b, c, d, e, f, 分别取自文献[1], [5], [6], [7], [8], [9]。

表 4 本文估算密度的精度的总结

偏差范围 (%)	该范围内的 化合物数目	该范围内的化合 物所占的百分数
0—1	57	56.9
1—2	30	29.1
2—3	13	12.7
3—4	1	1.0
总 数	101	100.0

本文101种化合物估算密度平均差为1.08%。

本文相应于文献[2] 54种化合物估算密度的平均偏差为1.11%。文献[2]估算密度的平均偏差为1.45%。

文献[2] 八种化合物的平均偏差为10.8%。本文八种化合物的平均偏差为0.7%。

表 5 本文估算密度的精度与文献[2]的比较

偏差范围 (%)	该范围内的 化合物数目		该范围内的化合 物所占的百分数	
	本文	文献[2]	本文	文献[2]
0—1	31	22	57.4	40.7
1—2	15	18	27.8	33.3
2—3	8	10	14.8	18.5
3—4		3		5.6
4—5		1		1.9
总 数	54	54	100.0	100.0

表 6 用文献[2]方法估算的八种化合物的密度与本文的精度比较

	化合物序号	67	68	85	86	87	91	92	95
偏差	文献[2]	2.0	6.3	30.7	40.8	0.5	2.4	4	0
(%)	本 文	0	1.1	2.3	0.1	0.2	0.3	1.1	0.7

## 参 考 文 献

- [1] 陈致英, 周富信, 唐沧雅, 爆炸与冲击, (2) (1981), 96.
- [2] Tarver, C.M., *Journal of Chemical and Engineering Data*, 24 (2) (1979), 136.
- [3] Волькенштейн, М. В., (张乾二等译), 分子结构及物理性质, 北京科学出版社, (1960), 24.
- [4] Heilbron, I., 中国科学院自然科学名词编订室译, 汉译海氏有机化合物辞典, 第一册至第四册, 科学出版社, (1964).
- [5] Perry, J.H., *Chemical Engineers Handbook*, McGraw-Hill Publishing Company Ltd., New York, London, Toronto, (1953).
- [6] Urbanski, Tadeusz, *Chemistry and Technology of Explosives*, Vol. II, PWN-Polish Scientific Publishers, Warszawa, (1965).
- [7] Орлова, Е.Ю., (叶庆棠等译), 烈性炸药的化学及工艺学, 国防工业出版社, (1965).
- [8] Hodgman, C.D., *Handbook of Chemistry and Physics* 37th. & 48th. ed. Chemical Rubber Publishing Co., Cleveland, Ohio., 1955-1956, 1964-1965.
- [9] 装药工作者原材料编辑小组编, 装药工作者原材料手册, 国防工业出版社, (1960).

## DENSITY ESTIMATIONS FOR EXPLOSIVES FROM THEIR MOLECULAR STRUCTURAL FORMULA

Zhou Fuxin Tang Cangya Chen Zhiying

(*Institute of Mechanics, Academia Sinica*)

**ABSTRACT** An empirical approach to the density estimations for explosives from their molecular structural formula using corresponding states principle is described. The average accuracy of the estimated densities for 101 cyclic compounds is 1.08%. The method in this paper is more accurate and more convenient than that in the similar work.

**KEY WORDS** explosives, density, molecular structure, corresponding states.