

文章编号: 1006-9941(2011)06-0616-05

电性拓扑状态指数预测硝基类含能材料静电感度

周璐璐, 蒋军成, 潘勇, 王睿

(南京工业大学安全工程研究所 江苏省城市与工业安全重点实验室, 江苏 南京 210009)

摘要: 应用电性拓扑状态 (Electrotopological State, E-state) 指数模拟分析了 16 种硝胺类化合物和 34 种硝基芳烃化合物的静电感度。用多元线性回归的方法对两组物质建立定量结构-性质相关 (QSPR) 模型, 硝胺类化合物模型的相关系数和标准偏差分别为 0.782 和 0.217, 硝基芳烃化合物模型的相关系数和标准偏差分别为 0.717 和 0.195。模型分析表明: 原子类型电性拓扑状态指数与硝基类含能材料静电感度有较好的相关性, 可有效对硝基类含能材料静电感度进行预测; 同时, 电性效应是影响静电感度的重要因素。

关键词: 有机化学; 硝基类含能材料; 静电感度; 电性拓扑状态指数; 定量结构-性质相关性 (QSPR)

中图分类号: TJ55; TQ246.1; O189; O62 **文献标识码:** A

DOI: 10.3969/j.issn.1006-9941.2011.06.005

1 引言

静电感度是评价含能材料安全性能的一项重要指标。它是指在一定条件下, 在一定静电放电能量的作用下, 被测试样对静电放电的敏感程度。目前多采用 50% 发火概率下的静电能量 E_{50} 来表示试样的静电 (火花) 感度^[1]。由于硝基类含能材料大多是高绝缘性物质, 所以在生产生活中极易产生并积累高能静电, 当产生静电放电时, 引燃甚至引爆这些材料的危险性极大。所以含能材料的静电感度研究在其安全性研究中也占据着重要的地位。王桂香等^[2]在研究硝基类含能材料爆速、爆压及其与静电感度之间的关系时发现爆速、爆压和静电感度之间存在着定量或定性关系。Mohammad 等^[3]在王桂香等人的研究基础上发现了更为简单方法, 利用爆炸压力与静电感度的关系来预测硝胺的静电感度。在之后的研究中, 他又从分子结构角度研究了硝基类含能材料的静电感度^[4]。Zeman^[5]在爆速与静电感度关系的研究中得出了 $D^2 = A \cdot E_{ES} + B$ 的公式。20 世纪 90 年代初 Kier 和 Hall 提出了一种新的分子描述符——电性拓扑状态

指数 (E-state Indices), 并在此基础上发展了基于原子类型的电性拓扑状态指数 (Electrotopological State Indices for atom type, ETSI), 在定量构效关系研究领域得到了广泛的应用^[6-12], 国内相关研究主要集中在对环境机理研究及理化性质的预测领域, 但是对静电感度的研究较少。本文应用电性拓扑状态指数对 50 种硝基类含能化合物的静电感度与分子结构之间的构效关系 (QSPR) 进行研究, 以建立能较便捷可靠地预测静电感度的理论模型。

2 样本与方法

2.1 实验样本

选取 50 种硝基类含能化合物作为实验样本, 其静电感度实验值来自于原始文献^[2]。50 种硝基化合物主要分为两大类, 包括硝胺类化合物 16 种和硝基芳烃化合物 34 种。物质及其静电感度值见表 1 和表 2。实验值和预测值对比图见图 1 和图 2。

2.2 参数计算

电性状态拓扑指数是根据分子中非氢原子所处的拓扑状态和成键电子状态所提出的原子级分子描述子, 克服了连接性指数只能反映分子大小及分支情况的局限性。原子类型电性拓扑状态指数 (ETSI) 是 1995 年由 Hall 和 Kier 提出的基于原子类型的电性拓扑指数^[6]。ETSI 可反映分子特征结构的电子状态和拓扑信息, 它是分子结构中具有相同结构特征的电性拓扑指数的加和, 在 QSPR 分析中可反映特定类型的原子结构对物质性质的影响大小。

收稿日期: 2010-11-09; 修回日期: 2011-01-17

基金项目: 国家自然科学基金 (20976081 和 21006045); 江苏省自然科学基金 (BK2009360 和 BK2010554); 高等学校博士学科点专项科研基金 (200802910007) 资助

作者简介: 周璐璐 (1987-), 女, 硕士研究生, 主要从事介质危险及控制技术研究。e-mail: zhoululu927@163.com

通讯联系人: 蒋军成 (1967-), 男, 教授, 博导, 主要从事化工安全、危险化学品安全研究。e-mail: ypnjut@126.com

表 1 16 种硝胺类化合物的静电感度 $\lg E_{50}$ Table 1 Experimental & predicted $\lg E_{50}$ values of sixteen nitramine compounds

compound	$\lg E_{50}$		deviation
	experimental	predicted	
2,4-Dinitro-2,4-diazapentane	1.129	1.453	-0.324
2,4,6,8-Tetranitro-2,4,6,8-tetraazanone	0.740	0.789	-0.049
1,9-Diacetoxy-2,4,6,8-tetranitro-2,4,6,8-tetraazanone	1.144	1.040	0.104
1,3-Dinitro-1,3-diazacyclobutane	0.796	0.871	-0.075
1,3,5-Trinitro-1,3,5-triazacyclohexane	0.396	0.251	0.145
1,3,5,7-Tetranitro-1,3,5,7-tetraazacyclooctane	0.461	0.567	-0.106
1,3,5,7,9-Pentanitro-1,3,5,7,9-pentaazacyclodecane	0.471	0.476	-0.005
1,4-Dinitro-1,4-diazacyclohexane	1.203	0.988	0.215
1,4,5,8-Tetranitro-1,4,5,8-tetraazadecaline	0.735	0.710	0.025
2,5-Dinitro-2,5-diazahexane-3,4-dione	0.740	0.906	-0.166
2,5-Dinitro-2,5-diazahexane	0.916	0.953	-0.037
1,4-Dinitrotetrahydroimidazo[4,5-d]-imidazol-(1H,3H)-dione	1.182	1.069	0.113
N,N-bis(2-Nitroxyethyl)-nitramine	0.767	0.911	-0.144
2,4,6-Trinitro-2,4,6-triazaheptane	0.907	0.536	0.371
3,5-Dinitro-3,5-diazaheptane	1.097	0.945	0.152
1,5-Endomethylene-3,7-dinitro-1,3,5,7-tetraazacyclooctane	1.241	1.408	-0.167

表 2 34 种硝基芳烃化合物的静电感度 $\lg E_{50}$ Table 2 Experimental & predicted $\lg E_{50}$ values of thirty-four nitro aromatic compounds

compound	$\lg E_{50}$		deviation
	experimental	predicted	
1,3-Dinitrobenzene	0.498	0.737	-0.239
1,3,5-Trinitrobenzene	0.800	0.748	0.052
1-Methyl-2,4,6-trinitrobenzene	0.836	0.912	-0.076
1,3-Dimethyl-2,4,6-trinitrobenzene	1.045	1.012	0.033
1,3,5-Trimethyl-2,4,6-trinitrobenzene	0.953	1.153	-0.200
1-Hydroxy-2,4,6-trinitrobenzene	0.953	0.899	0.054
1-Methoxy-2,4,6-trinitrobenzene	1.456	1.261	0.195
1-Methyl-3-hydroxy-2,4,6-trinitrobenzene	0.717	1.011	-0.294
1-Amino-2,4,6-trinitrobenzene	0.836	0.922	-0.076
1,3-Diamino-2,4,6-trinitrobenzene	1.040	1.059	-0.019
2,6-Diamino-3,5-dinitropyridine	1.093	1.144	-0.051
2,6-Dimethoxy-3,5-dinitropyridine	1.313	1.404	-0.091
2,6-Bis(2,4,6-trinitrophenylamino)-3,5-dinitropyridine	0.949	1.024	-0.075
1-Chloro-2,4,6-trinitrobenzene	0.827	0.709	0.118
1,3-Dichloro-2,4,6-trinitrobenzene	0.407	0.547	-0.140
1,5-Dinitronaphthalene	1.049	1.139	-0.090
1,4,5-Trinitronaphthalene	1.040	0.935	0.105
1,4,5,8-Tetranitronaphthalene	0.917	0.819	0.098
2,2',4,4',6,6'-Hexanitrobiphenyl	0.702	0.865	-0.163
2,2',4,4',6,6'-Hexanitrodiphenylmethane	0.613	0.777	-0.164
2,2',4,4',6,6'-Hexanitrodiphenylethane	0.590	0.649	-0.059
2,2',4,4',6,6'-Hexanitrostilbene	0.736	0.829	-0.093
2,2',4,4',6,6'-Hexanitroazobenzene	0.914	1.099	-0.185
3,3'-Dimethyl-2,2',4,4',6,6'-hexanitroazobenzene	1.126	1.158	-0.032
2,2',4,4',6,6'-Hexanitrooxanilide	1.164	1.290	-0.126
2,2',4,4',6,6'-Hexanitrodiphenylsulfide	0.408	0.805	-0.397
3-Methyl-2,2',4,4',6,6'-hexanitrodiphenylsulfide	0.757	0.792	-0.035
3,3'-Dimethyl-2,2',4,4',6,6'-hexanitrodiphenylsulfide	0.933	0.834	0.099
2,2',4,4',6,6'-Hexanitrodiphenylsulfone	1.023	1.151	-0.128
1,8-Dinitronaphthalene	1.143	1.130	0.013
2,2',2'',4,4',4'',6,6',6''-Nonanitrom-terphenyl	1.216	1.274	-0.058
1,3-Dihydroxy-2,4,6-trinitrobenzene	1.090	1.024	0.066
1,3,5-Triamino-2,4,6-trinitrobenzene	1.249	1.309	-0.060
2,2',4,4',6,6'-Hexanitrodiphenylamine	0.701	0.979	-0.278

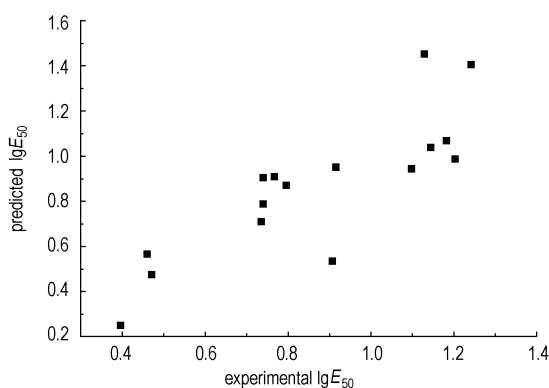


图1 硝胺类物质实验值和预测值对比图

Fig. 1 Comparison chart of experimental and predicted $\lg E_{50}$ values for nitramine compounds

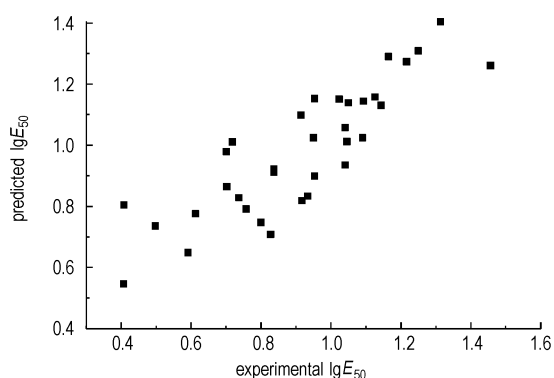


图2 硝基芳烃化合物实验值和预测值对比图

Fig. 2 Comparison chart of experimental and predicted $\lg E_{50}$ values for nitro aromatic compounds

根据原始文献[6],将 ETSI 计算方法总结如下步骤:

第一步,计算各个原子类型的固有状态(I):

$$I = [(2/N)^2 \delta^V + 1] / \delta \quad (\delta = \sigma - h, \delta^V = \sigma + \pi + n - h)$$

式中, N 反映原子的大小; $1/\delta$ 反映分子中原子的连接程度,可以表示原子的拓扑结构; δ^V/δ 反映原子价电子密度,可表示原子的电子结构特征。 σ 为 σ 轨道的价电子, π 为 π 轨道价电子数, n 为孤对电子数, h 表示与该原子成键的氢原子数。

第二步,由于某种原子类型的固有状态是在忽略分子中其余部分对其影响的情况下,对于该原子在分子中与其它原子的成键电子信息和邻接关系的描述,而分子中其它原子的扰动作用(ΔI)会对该原子类型的固有状态产生影响,这种影响可以用下式表示:

$$\Delta I = \sum (I_i - I_j) / r_{ij}^2$$

式中, I_i, I_j 为原子 i 和 j 的本征值; r_{ij} 为包括原子 i 和 j 在内的两原子之间最短路径上的原子数。

第三步,将原子类型的固有状态 I 和其它原子的扰

动作用 ΔI 相加,得到该原子的E-状态指数,然后将属于相同原子类型的各非氢原子的E-状态指数相加,即得到分子中各原子类型的ETSI值。

本文在此基础上计算了50种含能分子所共有的特征官能团硝基($-\text{NO}_2$)的基团电性拓扑指数。基团电性拓扑指数是将官能团所有骨架原子的电性拓扑态指数相加,可反映特征基团的电子及结构信息。表3中列举了原子类型、ETSI符号及其本征值(固有状态)。

表3 18种原子类型相应的编号、ETSI符号、描述子与本征值

Table 3 18 atomic types and their descriptors and intrinsic values

atom-type	descriptor	intrinsic value	atom-type	descriptor	intrinsic value
$\text{CH}_2=$	X_1	3.000	$\begin{array}{l} \diagup \\ \text{CH}- \\ \diagdown \end{array}$	X_{10}	1.333
$-\text{N}=\text{N}$	X_2	3.000	$-\text{CH}=\text{N}$	X_{11}	2.000
$-\text{N}=\text{N}$	X_3	2.000	$-\text{NH}-$	X_{12}	2.500
$\text{O}=\text{O}$	X_4	7.000	$-\text{Cl}$	X_{13}	4.111
$-\text{CH}_2-$	X_5	1.500	$\alpha\text{C}\alpha$	X_{14}	2.000
$-\text{N}=\text{N}$	X_6	2.000	$-\text{S}-$	X_{15}	3.500
$-\text{CH}_3$	X_7	2.000	$-\text{S}=\text{S}$	X_{16}	0.917
$\begin{array}{l} \diagup \\ \text{C}=\text{C} \\ \diagdown \end{array}$	X_8	1.667	$\beta\alpha\text{C}\alpha$	X_{17}	1.667
$-\text{O}-$	X_9	3.500	$\alpha\text{N}\alpha$	X_{18}	2.000

Note: α is aromatic bond; β is single bond.

2.3 QSPR 分析与数据处理

本研究使用 SPSS 统计分析软件 (Version 13.0), 在 95% 置信区间内用所计算的原子类型的电性拓扑状态指数与静电感度 ($\lg E_{50}$) 进行多元线性回归 (MLR) 分析, 所得结果的质量标准采用调整的相关系数平方值 (R_{adj}^2) 和标准偏差。对于所得的模型采用留一法 (LOO) 进行内部验证, 结果用相关系数 (Q_{LOO})、均方根误差和平均绝对误差表示。外部验证结果用相关系数 (Q_{ext}) 来表示。

其中, $Q_{\text{LOO}}^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}$, y_i 为训练集的实验值, \hat{y}_i 为训练集的预测值, \bar{y} 为训练集实验值的平均值。

$Q_{\text{ext}}^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_{\text{tr}})^2}$, y_i 为预测集的实验值, \hat{y}_i 为预测集的预测值, \bar{y}_{tr} 为训练集实验值的平均值。

3 结果与讨论

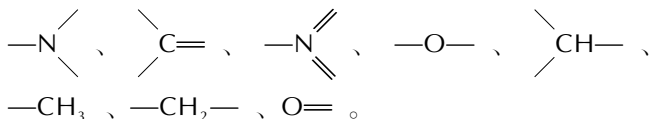
本研究以 18 种原子类型的电性拓扑指数作为描述符,应用 SPSS 软件中的回归模块中的多元线性回归 (MLR) 部分,选择逐步回归法对所有描述符进行筛选,以得到较好的 QSPR 回归模型。

3.1 硝胺类化合物

对硝胺类物质建立的 QSPR 模型如下:

$$\lg E_{50} = 0.196X_3 + 0.01X_4 - 0.005X_5 + 0.118X_6 + 0.018X_7 - 0.056X_8 + 0.069X_9 + 0.043X_{10} + 0.562$$

模型的复相关系数 R_{adj}^2 为 0.782,标准偏差 SD 为 0.217,相关性系数表明模型具有较高的可靠性。通过留一法 (LOO) 对模型进行交互验证,其中相关系数 $Q_{LOO} = 0.780$,均方根误差为 0.015,平均绝对误差为 0.104,外部验证相关系数 $Q_{ext} = 0.911$,说明模型具有较好的预测可靠性。可以看出对于硝胺类化合物来说,对于硝胺类化合物的静电感度有影响的分子结构为



其中, $\diagup \text{N} \diagdown$ 是在硝胺类物质中起着连接官能团 —NO_2 的作用,它的本征值是 2.000,对于大多数原子对该类 N 原子的场效应影响为负效应,回归方程中系数为正数表明 $\lg E_{50}$ 随 X_6 的增大而增大,由于连接的官能团中的两个 =O 对它有着极强的负效应,所以 X_6 的存在越大,静电感度越低; $\diagup \text{C} =$ 主要是连接 =O 构成羰基,编号为 X_8 ,本征值为 1.667,在该类化合物所有原子类型中本征指较低,其他绝大多数原子对该类 C 原子的场效应影响为负效应,导致其电性拓扑态指数小于其本征值,系数为负说明 $\lg E_{50}$ 随 X_8 的增大而减小,同时连接的 =O 对其有较强的负效应影响; $\diagup \text{N} \diagdown$ 是特征官能团硝基的骨架原子氮的电性拓扑状态指数本征值为 2.000,同样的连接的两个连接的 =O 对其有较强的负效应影响,使其电性拓扑态值小于其本征值,变量的正系数表明 X_3 越大, $\lg E_{50}$ 越大,物质的静电感度越低,对于具有相似骨架结构的物质而言,所含硝基越多则 X_3 越小,静电感度越高,与实验得到的静电感度数据是一致的; —O— 本征值为 3.500,处于这些原子类型中间部分,经计算可知,其电性拓扑值大于其本征值,其系数为正说明

随着 X_9 的增大, $\lg E_{50}$ 增大,静电感度越高; $\diagup \text{CH—}$ 、

$\text{—CH}_2\text{—}$ 连接性基团,用来构成有机物的基本骨架,前者系数为正、后者系数为负说明在同分异构体中,支链的存在对与静电感度是有影响的,进而体现出同分异构体具有不同静电感度; —CH_3 本征值为 2.000,多数其它原子对该类原子产生负场效应影响,一般处于化合物的链端,较靠近链中心的原子其电性拓扑态指数小,所以链越长,负效应越小,则 X_7 越大,静电感度越低; O= 的本征值为 7.000,大多数原子对它产生正场效应,系数为正说明 $\lg E_{50}$ 随 X_4 的增大而增大,则 X_4 越大,静电感度越低。

3.2 硝基芳烃化合物

对硝基芳烃类物质建立的 QSPR 模型如下:

$$\lg E_{50} = -0.002X_2 - 0.329X_3 + 0.411X_5 + 0.238X_6 + 0.195X_7 - 0.106X_8 + 0.071X_9 - 2.25X_{11} - 0.080X_{12} + 0.016X_{13} + 0.092X_{14} - 0.053X_{15} - 0.481X_{16} + 0.416X_{17} + 0.002X_{18} - 0.053$$

模型的复相关系数 R_{adj}^2 为 0.717,标准偏差为 0.195。通过留一法 (LOO) 对模型进行交互验证,其中相关系数 $Q_{LOO} = 0.597$,均方根误差为 0.023,平均绝对误差为 0.126,外部验证相关系数 $Q_{ext} = 0.968$ 。

对于硝基芳烃化合物采取了一样的处理方法,由于硝基芳烃化合物中所涉及到的分子结构比较多,同时苯环的芳香性对于结构的特殊影响,模型的精度没有硝胺类物质高,但是总体在可以接受的水平范围内。

在模型中, $\diagup \text{CH=}$ (X_{11}) 本征值为 2.000,大多数原子对其产生负场效应,系数为负表明 $\lg E_{50}$ 随 X_{11} 增大而减小,负场效应使 X_{11} 存在数值越大,静电感度越高,从实验数据中也能看出此规律; —S— (X_{16}) 的本征值为 0.917,在所有用到的原子类型中属于很小的,绝大多数其他原子对其产生负场效应,特别是所连接的两个 =O (本征值为 7.000), X_{16} 系数为正表明 $\lg E_{50}$ 随 X_{16} 的增大而增大,负场效应的存在使 X_{16} 的存在越大,静电感度越低。硝基芳烃化合物组中苯环是普遍存在的影响因素, $\beta\alpha C\alpha$ (X_{17}) 本征值为 1.667,是硝基芳烃化合物苯环结构上连接取代基的碳原子,绝大多数原子对其有负场效应的影响,系数为正表明 $\lg E_{50}$ 随 X_{17} 的增大而增大,负场效应导致静电感度随 X_{17} 数值的增大而降低; $\alpha C\alpha$ (X_{14}) 本征值为 2.000,是硝基芳烃化合物苯环结构上没有连接取代基的碳原子,大多数原子对其有负场效应的影响,系数为正表明 $\lg E_{50}$ 随 X_{14} 的增大而增大,负场效应导致静电感度随 X_{14} 数值的增大而降

低; 对于 N 取代苯环上的 C 的物质, $\alpha N\alpha(X_{18})$ 也具有一定的芳香性, 所以将其与 $-N=$ (X_2) 分开讨论, 从结果上也能看出它们对于静电感度的不同影响, 它们本征值都为 2.000, 多数原子对其产生负场效应的影响, 但是在模型中, X_{18} 系数为正, X_2 系数为负, X_{18} 的增大, X_2 的减小, 会导致 $\lg E_{50}$ 的增大, 静电感度的降低。

4 结 论

本研究应用电性拓扑状态指数表征硝胺类含能化合物和硝基芳烃类含能化合物的拓扑结构和电性状态等分子结构特征, 应用多元线性回归建立了根据分子结构预测静电感度的 QSPR 模型。两组模型都具有较高的相关系数(硝胺类 R^2 为 0.782, 硝基芳烃类 R^2 为 0.717) 和较低的标准偏差(硝胺类为 0.217, 硝基芳烃类为 0.195), 表明模型都具有较高的可靠性和预测能力。本文研究结果表明, 原子类型电性拓扑状态指数能够较好的表征硝基类含能材料的分子结构特征, 并且与静电感度间存在较好的相关性。

参考文献:

- [1] 刘尚和, 李宏建, 刘直承, 等. 静电理论与防护[M]. 北京: 兵器工业出版社, 1999.
LIU Shang-he, LI Hong-jian, LIU Zhi-cheng, et al. Electrostatic theory and protection[M]. Beijing: Weapon Industry Press, 1999.
- [2] 王桂香, 肖鹤鸣, 居学海, 等. 含能材料的密度、爆速、爆压和静电感度的理论研究[J]. 化学学报, 2007, 65(6): 517-524.
WANG Gui-xiang, XIAO He-ming, JU Xue-hai, et al. Theoretical studies on densities, detonation velocities and pressures and electric spark sensitivities of energetic materials[J]. *Acta Chemica Sinica*, 2007, 65(6): 517-524.
- [3] Mohammad H K. Theoretical prediction of electric spark sensitivity of nitroaromatic energetic compounds based on molecular structure[J]. *Journal of Energetic Materials*, 2008, 153: 201-206.
- [4] Mohammad H K, Hamid R P, Abolfazl S. Simple way to predict electrostatic sensitivity of nitroaromatic compounds[J]. *Chemistry*, 2008, 17(6): 470-484.
- [5] Zeman V, Jiří KOČI, Zeman S. Electric spark sensitivity of polynitro compounds: Part II. A correlation with detonation velocities of some polynitro arenes[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials*, 1999, 7(3): 127-133.
- [6] Hall L H, Kier L B. Electrotopological state indices for atom types: A novel combination of electronic, topological, and valence state information[J]. *Journal of Chemical Information and Computer Science*, 1995, 35(6): 1039-1045.
- [7] Hall L H, Story C T. Boiling point and critical temperature of a heterogeneous data set: QSAR with atom type electrotopological state indices using artificial neural networks[J]. *Journal of Chemical Information and Computer Science*, 1996, 36(5): 1004-1014.
- [8] Huuskonen J. QSAR modeling with the electrotopological state indices: Predicting the toxicity of organic chemicals[J]. *Chemosphere*, 2003, 50(7): 949-953.
- [9] PAN Yong, JIANG Jun-cheng, WANG Rui, et al. Prediction of auto-ignition temperatures of hydrocarbons by neural network based on atom-type electrotopological state indices[J]. *Journal of Hazardous Materials*, 2008, 157: 510-517.
- [10] 潘勇, 蒋军成. 电性拓扑状态指数预测烃类物质闪点[J]. 石油学报(石油加工), 2007, 23(6): 70-74.
PAN Yong, JIANG Jun-cheng. Prediction of Flash Point of Hydrocarbon by Electrotopological State Indices[J]. *Acta Petrolei Sinica (Petroleum Processing Section)*, 2007, 23(6): 70-74.
- [11] 王睿, 蒋军成, 潘勇, 等. 均三硝基苯类化合物撞击感度与电性拓扑指数的 QSPR 研究[J]. 含能材料, 2008, 16(1): 90-93.
WANG Rui, JIANG Jun-cheng, PAN Yong, et al. QSPR study of correlation between impact sensitivity of *m*-nitroaromatics and electrotopological state indices[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials*, 2008, 16(1): 90-93.
- [12] 王睿, 蒋军成, 潘勇, 等. 电性拓扑状态指数预测硝基类含能材料撞击感度[J]. 固体火箭技术, 2008, 31(6): 657-662.
WANG Rui, JIANG Jun-cheng, PAN Yong, et al. Prediction on impact sensitivity of nitro energetic materials by means of electrotopological state indices[J]. *Journal of Solid Rocket Technology*, 2008, 31(6): 657-662.

Prediction of the Electrostatic Sensitivity of Nitro Compounds with Electrotopological State Indices

ZHOU Lu-lu, JIANG Jun-cheng, PAN Yong, WANG Rui

(Institute of Safety Engineering, Nanjing University of Technology, Jiangsu Key Laboratory of Urban and Industrial Safety, Nanjing 210009)

Abstract: The relationship between the electrostatic sensitivity and the molecular structure for 16 kinds of nitramine compounds and 34 kinds of nitro aromatic compounds were established based on the theory of the electrotopological state (E-state). Quantitative structure-property relationship (QSPR) model by Multiple linear regression method were established. The correlation coefficient and standard deviation of the nitramine compounds were 0.782 and 0.217, respectively, and those of the nitro aromatic compounds were 0.717 and 0.195. Analysis of the model show that there is a better correlation between the electrotopological state indices for atom type and the electrostatic sensitivity of the nitro class energetic materials, and it can be used to predict the electrostatic sensitivity of nitro compounds effectively. The electrical condition of atoms affects the electrostatic sensitivity importantly.

Key words: organic chemistry; nitro class energetic materials; electrostatic sensitivity; E-state indices; quantitative structure-property relationship(QSPR)

CLC number: TJ55; TQ246.1; O189; O62 **Document code:** A

DOI: 10.3969/j.issn.1006-9941.2011.06.005