

则 G 具有 $k+1$ 个边互不相重的 Hamilton 圈。

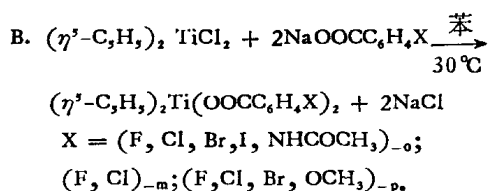
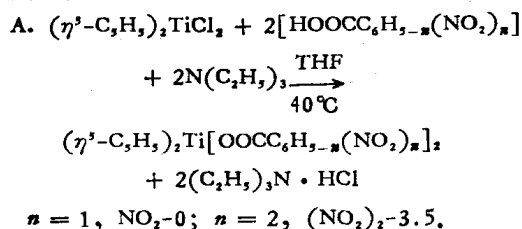
当 $k=0$ 时,猜想是正确的,就是 Ore 定理。当 $k=1$ 时,猜想也是正确的,就是本文的定理 2。

吴正声

(南京师范大学数学系)

双(取代苯酰氧基)二茂钛衍生物的研究

一些新的双(取代苯酰氧基)二茂钛衍生物已按下列途径合成:



反应均在绝对干燥条件下进行。在 B 中,二氯二茂钛与取代苯甲酸钠按 1:4 的摩尔比加入,产物经分离、纯化后,测定了 IR、 ^1H NMR 以及主要元素的含量,实验数据与计算值相符。产物在干燥条件下稳定。

结果表明:苯环上不同类型的取代基对反应有较明显的影响。 σ 值较大的取代基如硝基、氟、氯、

溴,反应愈易进行,产物收率高; σ 值愈小,反应愈难以进行,反应时间延长,产物收率降低,甚至按上述方法 B 只回收原料如氨基等。产物的颜色 IR、 ^1H NMR 亦与取代基有一定联系。例如,晶体的颜色以氟、氯、溴、碘、乙酰氨基和甲氧基的次序,由桔红色变到淡黄色;红外谱图的一些特征吸收、氢核磁共振的化学位移也有类似的规律性。证明双(取代苯酰氧基)二茂钛衍生物的部分性质与取代苯型有机化合物的有关性质比较近似。

根据红外光谱图,本文中的所有产物其酰氧基的反对称与对称伸缩分别为 1640cm^{-1} , 1300cm^{-1} 和 1340cm^{-1} , 差值约为 320cm^{-1} , 又结合氢核磁共振的质子化学位移值 δ (ppm),说明钛应与每一个酰氧基中的一个氧配位。

师树简

(北京化工学院)

党 轶

(陕西师范大学化学系,西安)

张玉鸿

(内蒙古大学化学系,呼和浩特)

过硫酸钾(KPS)-巯基乙酸(TGA)体系

——引发甲基丙烯酸甲酯(MMA)水相聚合反应模拟动力学

本文对实验数据在微机上进行处理,拟合该体系动力学方程,结果相对误差均低于 0.5%。

对一般线性模型 $y = x\beta$, 利用最佳平方逼近原则容易得出参数 β 的求解表达式

$$\beta = u^{-1}x'y,$$

其中 $u = x'x$ 。我们在三参数模型的基础上进一步拟合该体系数学模型

$$D = 1 - \left(\sum_{i=1}^n k_i t^{i-1} \right)^{1/\theta},$$

式中 k_i 、 θ 为待定参数。将此模型线性化即可得一

般线性模型,结合实验离散点 (D_i, t_i) 的数据,在微机上不难得出最佳参数 k_i 、 θ 值,其中 D 为单体的转化率, t 聚合反应时间。对上述模型微分,给合 $D = 1 - c/c_0$ 整理得

$$-\frac{dc}{dt} = \left(-\frac{1}{\theta} \right) \frac{\sum_{i=1}^n k_i (i-1) t^{i-2}}{\sum_{i=1}^n k_i t^{i-1}} \cdot c,$$

通常情况下, i 值对 k_i 大小的影响极为明显,当 i 较大时可认为 $k_i \approx 0$, 对本文所研究的体系即可化

简为

$$-\frac{dc}{dt} = \left(-\frac{k_2 c_0^\theta}{\theta}\right) \cdot c^{(1-\theta)},$$

$$\text{若令 } K = -\frac{k_2 c_0^\theta}{\theta}, n = 1 - \theta,$$

则 $-\frac{dc}{dt} = Kc^n$, 式中 c_0 为单体初始浓度, c 为 t 时刻未反应单体浓度, K 为表观速率常数, n 为拟反应级数。

1. KPS-TGA 的用量对聚合速率影响: 采用不同浓度的 KPS 引发 MMA 水相聚合, 在 30℃ 时即可得到一系列实验离散点, 从离散点变化规律可以看出, 转化率 D 随 KPS 浓度增加而不断增大, 如当 KPS 浓度为 4.0 mmol/L 时, 反应 $t = 20 \text{ min}$, 转化率 $D = 43\%$, 而当 KPS 浓度增加到 20.0 mmol/L 时, 在相同时间内 D 达到 63.33%。若固定 KPS、MMA 的浓度不变, 同样在 30℃ 条件下, 改变 TGA 浓度, 可得到类似的结果。根据不同 KPS-TGA 用量时

$D-t$ 的动力学实验数据散点规律分析, 利用上述公式, 可得出相应实验条件下的模拟反应速率方程。如初终条件 TGA 浓度 10.0 mmol/L, MMA 浓度 94.74 mmol/L, KPS 浓度 7.5 mmol/L, 在 30℃ 时可得 $-d[\text{MMA}]/dt = 0.02355[\text{MMA}]^{1.01}$

2. 温度的影响及体系的活化能 E_a : 固定 KPS、TGA 及 MMA 浓度, 在 20~40℃ 条件下实验, 按 Arrhenius 公式求得 $E_a = 37 \text{ kJ/mol}$ 。并且不难得出不同温度下的模拟速率表达式。

3. 单体用量的影响: 只改变 MMA 浓度, 固定其它试剂用量。模拟结果发现: 当单体初始浓度一定时, 反应速率总是与 MMA 的浓度一次方成正比。

综合上述可得该体系的模拟速率表达式为

$$R = K[\text{MMA}]^{1.33}[\text{TGA}]^{0.243}[\text{KPS}]^{0.213}.$$

常 棉 张希庆
(大连轻工业学院化工系)

三阶时滞泛函微分方程解的渐近性

对于三阶时滞泛函微分方程

$$\begin{aligned} & (r_1(t)(r_1(t)x'(t)))' + S(t)x''(t) \\ & + \sum_{i=1}^n P_i(t)g'_i(x(h_i(t))) \\ & + \sum_{i=1}^n q_i(t)g_i(x(h_i(t))) = f(t), \end{aligned} \quad (1)$$

其中诸函数连续, $r_1(t)$ 、 $P_i(t)$ 、 $S(t)$ 可微; $g_i(x)$ 关于 x 不减, 且当 $P_i(t)$ 不恒为零时, $g_i(x)$ 可微; $r_1(t) > 0$, $r_2(t) > 0$, $0 \leq h_i(t) \leq t$ 。

我们讨论了方程(1)的解的渐近性质, 得到

定理 1 若当 $t \geq T_0$ 时, 有 i) $\int_{T_0}^{\infty} \frac{1}{r_1(s)} ds < \infty$, $i = 1, 2$; ii) $(S(t)r_1(t))' \geq 0$; iii) $r_1(t)f(t)$ 及诸 $P_i(t)$ 和 $r_1(t)(q_i(t) - P'_i(t))$ 有界; iv) 当 $|x|$ 充分大时, $|g_i(x)| < m|x|$, $m > 0$ 为一常数; 则方程(1)的所有解的极限存在(有限或者趋于无穷)。特别,

方程(1)的所有振动解趋于零。

又若方程(1)的振动解 $x(t)$, 其任意相邻的两个零点 t_n 及 t_{n+1} , 有 $|t_n - t_{n+1}| < M$, M 为一固定常数, 此时称 $x(t)$ 为方程(1)的零点距离有界的振动解。对此类解, 我们有

定理 2 若将定理 1 中 i) 改为

$$i)' \int_{T_0}^{\infty} \frac{1}{r_i(s)} ds < \infty, \text{ 且对任意常数 } c, \text{ 有}$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_t^{t+c} \frac{1}{r_j(s)} ds < \infty,$$

其中 $i, j = 1$ 或 2 , $i \neq j$ 。

其余条件不变, 则方程(1)的所有零点距离有界的振动解皆趋于零。

李克难
(湖南大学基础科学系, 长沙)