

含氮杂环衍生物的磨损定量构效关系研究

王婷婷¹, 戴康², 王展¹, 高新蕾^{1*}

(1. 武汉轻工大学 化学与环境工程学院, 湖北 武汉 430023;

2. 中南民族大学 药学院, 湖北 武汉 430074)

摘要: 以从头计算 Hartree – Fock 分子轨道法计算了苯并恶唑, 苯并咪唑, 苯并噻唑, 二氢噻唑以及哌嗪五种母核的 36 种含氮杂环衍生物的量子化学结构参数. 依据摩擦学定量构效关系理论, 采用多元线性回归法对这些化合物进行了磨损定量构效关系研究, 建立了合理的预测模型. 结果表明: 含氮杂环衍生物作为润滑油添加剂的抗磨能力与化合物的偶极矩和总能量相关性较好, 并对母核性质具有较强的依赖性. 所得模型具有较好的预测能力, 可用于指导新型润滑油添加剂分子的设计及合成.

关键词: 含氮杂环衍生物; 润滑油添加剂; 多元线性回归; 摩擦学定量构效关系; 磨损

中图分类号: TH117.3

文献标志码: A

文章编号: 1004 – 0595(2014)02 – 0187 – 06

Quantitative Structure – Tribo – ability Relationship about the Antiwear Properties of N – containing Heterocyclic Derivatives

WANG Ting – ting¹, DAI Kang², WANG Zhan¹, GAO Xin – lei^{1*}

(1. Department of Chemical and Environmental Engineering, Wuhan Polytechnic University, Wuhan 430023, China

2. College of Pharmacy, South – Central University for Nationalities, Wuhan 430074, China)

Abstract: The structural parameters of 36 lubricating additives of N – containing heterocyclic derivatives with the matrices of benzoxazole, benzimidazole, benzothiazole, thiazoline and piperazine were calculated by Hartree – Fock ab initio quantum chemistry method. Quantitative Structure – Tribo – ability Relationship (QSTR) of these additives were studied by multiple linear regression (MLR) method. The antiwear properties of additives showed an appropriate relation with the dipole and the total energy, and strongly depended on the matrices. The QSTR models had an acceptable predictive ability, and can be used to design and synthesize new lubricating additives.

Key words: N – containing heterocyclic derivatives, lubricant additives, multiple linear regression, quantitative structure – tribo – ability relationship, wear

定量构效关系 (Quantitative Structure – Activity Relationship, QSAR) 研究是用数学模型描述化合物的性质与其结构之间相关性的一种方法. 目前, 该方法被广泛地应用于药物分子设计、环境毒理学研究以及新型材料研制等领域^[1-5]. 但是在摩擦学领域,

采用该方法的研究报道却非常少, 并且以定性分析为主, 定量的工作非常有限, 尚处于探索阶段^[6-11]. 如刘维民研究小组^[6-7]和 A E Jiménez 研究小组^[8]对离子液润滑油开展了摩擦学性能与结构相关性的定性研究; Himmat Singha 研究小组^[9]对烃类化合物

Received 4 June 2013, revised 22 September 2013, accepted 22 October 2013, available online 28 March 2014.

* Corresponding author. E – mail: gaoxi0131@163.com, Tel: +86 – 27 – 83943956.

The project was supported by the National Natural Science Foundation of China (51075309).

国家自然科学基金项目(51075309)资助.

润滑油进行了相关研究. 本课题组于2011年起开展了润滑油的摩擦学定量构效关系(Quantitative Structure-Tribo-ability Relationship, QSTR)研究, 已经取得了一些初步结果^[12], 研究结果表明 QSTR 方法是可行的, 并为未来新型润滑油添加剂分子的设计提供了新的思路.

含氮杂环衍生物是一类应用前景极高的多功能润滑油添加剂. 近年来, 对于该类添加剂的研制及摩擦学性能研究一直受到国内外学者的重视^[13-17]. 本文中依据摩擦学定量构效关系理论, 计算出一组含氮杂环衍生物润滑油添加剂的量子化学结构参数, 并运用多元线性回归法(MLR)对化合物的摩擦学性能进行了 QSTR 研究, 建立了合理的 QSTR 预测模型, 并对所建模型进行了摩擦学机理探讨.

1 实验部分

1.1 分子结构与磨损数据

选用的36个含氮杂环衍生物润滑油添加剂及其磨损数据取自文献^[18]. 所有化合物可归为苯并恶唑、苯并咪唑、苯并噻唑、二氢噻唑和哌嗪共五种母核结构, 见图1.

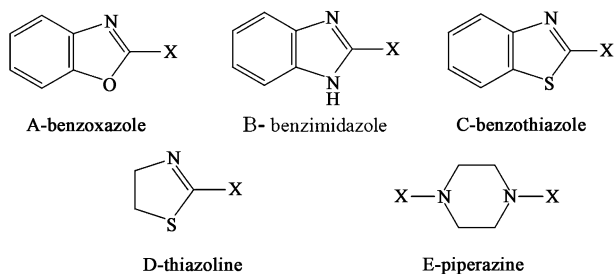


Fig. 1 Structures of matrices of N-containing heterocyclic derivatives

图1 含氮杂环衍生物的母核结构

合成的36个含氮杂环衍生物添加剂以不同的比例加入基础油液体石蜡中, 用济南试验机厂生产的四球摩擦试验机进行摩擦磨损试验. 试验条件如下: 转速1450 r/min; 试验时间30 min; 室温. 使用的钢球是直径为12.7 mm的GCr15轴承钢二级标准钢球, 硬度HRC 59~61. 用精度为0.01 mm的读数显微镜分别在196、294和392 N载荷下测量了基础油和加入不同添加剂润滑下的3个下试球的磨斑直径, 取其平均值^[18].

钢球表面磨斑大小和添加剂质量百分数有关, 考虑浓度的影响, 同时要将磨损面积转换成磨损体积,

因此对试验数据进行数学处理, 采用磨损体积量度VS表征润滑剂的抗磨能力比较合适, 计算公式如下:

$$VS = \log_{10} \frac{(S_0^{3/2} - S^{3/2}) \cdot MW}{\text{Ratio}}$$

其中, S_0 为基础油液体石蜡润滑下所测得的钢球表面磨斑面积的大小; S 为加入添加剂后在最优百分比下所测得的钢球表面磨斑面积的大小; Ratio 为添加剂的最优百分比; MW 为添加剂的分子量. 很显然, 磨损体积量度 VS 越大, 代表抗磨能力越好.

分子的具体结构和磨损体积量度 VS 见表1.

1.2 结构参数的计算以及模型的拟合方法

采用 ChemBioOffice 2008 软件绘制了36个分子模型, 以从头计算 Hartree-Fock (HF) 分子轨道量子化学法对这些分子进行了能量最小化以及结构最优化处理, 并计算了偶极矩、分子体积、分子力、总能量、熵、热焓、分子质量、热力学能和零点能等量子化学结构参数.

利用多元线性回归法对文献^[18]的实验数据和计算的结构参数进行 QSTR 分析. 多元线性回归时, 选用过多的参数可能造成共线性或过度拟合, 减弱模型的预测能力. 一般来说, 选取的样本数与变量数的比值应不小于5, 本文样本数为36, 因此, 最大能选取的变量数为7个^[19]. 而最终选择哪些变量则需要根据磨损体积量度与所有结构参数之间的相关性来确定. 回归分析工作采用 SPSS 20 统计软件进行, 选用其中的逐步线性回归法筛选变量, 相关系数 R 和 Fisher 检验值 F 作为 QSTR 模型拟合能力的评价指标, R 越接近1, F 值越大, 相应模型的拟合能力就越强.

2 结果与讨论

2.1 结构参数的确定和模型的建立

分别对低载荷196 N、中载荷294 N和高载荷392 N下的磨斑数据做了统计分析, 逐步回归结果表明: 回归模型的相关系数 R 随引入结构参数的变化而变化, 其中, 用总能量和偶极矩这两个结构参数能够较好地预测磨损体积量度, 其他变量的引入对预测模型的影响可忽略不计. 获得如下模型:

$$VS(196 \text{ N}) = 3.295(0.193) - 2.318e-7 \times E(0.000) + 0.098 \times D(0.039) \quad (1)$$

$$VS(294 \text{ N}) = 3.346(0.167) - 4.242e-7 \times E(0.000) + 0.067 \times D(0.034) \quad (2)$$

$$VS(392 \text{ N}) = 3.288(0.205) - 4.182e-7 \times E(0.000) + 0.078 \times D(0.041) \quad (3)$$

表1 含氮杂环衍生物的分子结构及摩擦学数据

Table 1 Structure and tribological data of N-containing heterocyclic derivatives

Matrices	Substituent X	VS(196 N)		VS(294 N)		VS(392 N)		
		Expt ^a	Pred	Expt ^a	Pred	Expt ^a	Pred	
1	A	S ₂ C ₁₂ H ₂₅	4.16	3.96	4.32	4.08	4.34	4.06
2	A	S ₂ C ₈ H ₁₇	4.40	3.63	4.58	3.82	4.63	3.77
3	A	S ₂ C ₄ H ₉	4.28	3.60	4.47	3.78	4.47	3.73
4	B	S ₂ C ₁₂ H ₂₅	4.12	4.03	4.11	4.12	4.18	4.12
5	B	S ₂ C ₈ H ₁₇	3.81	4.00	4.04	4.07	4.08	4.06
6	B	S ₂ C ₄ H ₉	3.88	3.96	3.95	4.02	3.96	4.01
7	C	S ₂ C ₁₂ H ₂₅	3.79	3.78	3.99	4.01	3.96	3.97
8	C	S ₂ C ₈ H ₁₇	3.70	3.76	3.91	3.97	3.75	3.93
9	C	S ₂ C ₄ H ₉	3.55	3.72	3.80	3.91	3.20	3.87
10	C	SCH ₂ CH(OH)CH ₂ SC = S(OC ₂ H ₅)	3.19	3.69	3.95	4.00	4.07	3.94
11	C	SCH ₂ CH(OH)CH ₂ SC = S(OC ₄ H ₉)	3.80	3.72	3.98	4.03	4.05	3.98
12	C	SCH ₂ CH(OH)CH ₂ SC = S(OC ₅ H ₁₁)	3.90	3.73	4.03	4.05	4.09	3.99
13	C	SCH ₂ CH(OH)CH ₂ SC = S(OC ₈ H ₁₇)	3.52	3.76	3.93	4.08	3.92	4.03
14	C	SCH ₂ CH(OH)CH ₂ SC = S[N(C ₂ H ₅) ₂]	3.35	3.99	3.67	4.21	3.31	4.18
15	C	SCH ₂ CH(OH)CH ₂ SC = S[N(C ₄ H ₉) ₂]	3.41	4.02	3.73	4.26	3.50	4.23
16	C	SCH ₂ CH(OH)CH ₂ SC = S[N(C ₈ H ₁₇) ₂]	3.51	4.12	3.83	4.38	3.82	4.36
17	C	SCH ₂ CH(OH)CH ₂ SP = S(OC ₄ H ₉) ₂	5.00	4.35	5.16	4.55	5.18	4.55
18	C	SCH ₂ CH(OH)CH ₂ SP = S(OC ₈ H ₁₇) ₂	4.74	4.40	4.93	4.64	4.96	4.64
19	C	SCH ₂ CH(OH)CH ₂ SP = S(OC ₁₂ H ₂₅) ₂	4.87	4.32	5.04	4.63	5.07	4.62
20	A	SCH ₂ N(C ₄ H ₉) ₂	3.85	3.80	3.94	3.89	4.02	3.86
21	A	SCH ₂ N(C ₈ H ₁₇) ₂	3.86	3.83	4.02	3.96	4.05	3.94
22	B	SCH ₂ N(C ₄ H ₉) ₂	3.69	3.93	3.91	3.98	3.95	3.97
23	B	SCH ₂ N(C ₈ H ₁₇) ₂	3.78	3.98	3.94	4.06	4.00	4.05
24	C	SCH ₂ N(C ₄ H ₉) ₂	3.66	3.83	3.83	3.97	3.65	3.94
25	C	SCH ₂ N(C ₈ H ₁₇) ₂	3.51	3.86	3.77	4.04	3.79	4.01
26	D	SCH ₂ N(C ₄ H ₉) ₂	3.59	3.85	3.71	3.96	3.72	3.93
27	D	SCH ₂ N(C ₈ H ₁₇) ₂	3.61	3.90	3.72	4.04	3.51	4.01
28	C	SC ₃ H ₇	3.94	3.67	3.91	3.81	3.95	3.77
29	C	SC ₈ H ₁₇	4.10	3.70	4.06	3.86	4.10	3.82
30	C	SC ₃ H ₅	4.02	3.74	4.05	3.86	4.03	3.82
31	B	SC ₃ H ₇	3.56	3.58	3.55	3.69	3.45	3.65
32	B	SC ₃ H ₅	3.60	3.76	3.66	3.81	3.63	3.79
33	A	SC ₃ H ₅	3.68	3.63	3.71	3.73	3.76	3.69
34	E	S = CSC ₁₀ H ₂₁	4.13	4.23	4.26	4.44	4.35	4.43
35	E	S = CSC ₈ H ₁₇	4.08	4.21	4.23	4.40	4.32	4.39
36	E	S = CSC ₄ H ₉	4.47	4.15	4.70	4.30	4.60	4.29

a. from Ref^[18]

表2 三种载荷下的线性回归结果

Table 2 Results of MLR analysis under three loads

Items	R ^a	F ^b	SE ^c	P ^d
VS(196 N)	0.526	6.306	0.364 85	0.005
VS(294 N)	0.622	10.386	0.316 22	0.000
VS(392 N)	0.561	7.574	0.387 91	0.002

a. correlation coefficient, b. Fisher value, c. standard error,

d. significance level.

式中, E 为总能量, Kcal/Mol; D 为偶极矩, Debye; 括号内数字表示偏差。

3个模型的拟合结果见表2。数据表明, 3种载

荷下的磨损体积量度均表现出与总能量和偶极矩较显著的相关性, 其中, 中载荷 294 N 的相关性最高。

2.2 模型的检验

从表3中的相关性系数可以看出, 回归模型中的两个变量偶极矩和总能量相互之间的相关性是不显著的, 而它们与3种载荷下的磨损体积量度之间则有较高的相关性, 说明选择偶极矩和总能量作为多元线性拟合的变量是合理的。

表1中列出了由拟合模型得到的3种载荷下磨损体积量度的计算值, 均比较接近于实验值。对模型的残差值进行检验, 结果表明残差呈近正态分布, 变

表3 结构参数的 Pearson 相关性矩阵
Table 3 Pearson's correlation coefficients matrix

Items	VS(196 N)	VS(294 N)	VS(392 N)	Dipole/Debye	Energy/(kcal · Mol ⁻¹)
VS(196N)	1.000				
VS(294 N)	-	1.000			
VS(392N)	-	-	1.000		
Dipole/Debye	0.476	.445	0.423	1.000	
Energy/(kcal · Mol ⁻¹)	-0.372	-.559	-0.490	-.340	1.000

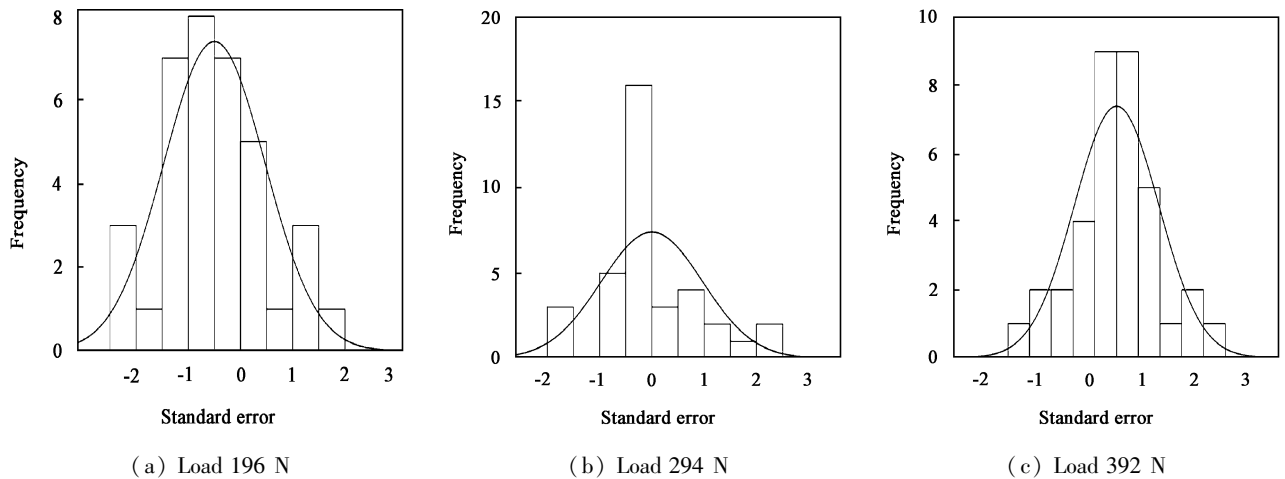


Fig. 2 Standard error distribution of anti-wear-scar-scale

图2 磨损体积分量的残差分布图

化范围为 $-2.5 \sim +2.5$. 这也进一步验证了拟合模型的合理性.

2.3 分析与讨论

摩擦过程中润滑油添加剂在金属表面经历 3 个过程:扩散、吸附和反应. 添加剂分子首先通过扩散, 分布于基础油中; 然后通过活性元素或者极性基团吸附于摩擦表面形成吸附层; 接下来, 分子中的活性元素与摩擦表面反应, 生成化学反应膜. 其中, 吸附强度依赖于分子的极性, 极性越强, 形成的吸附膜越牢固; 而化学反应的能力和分子的能量有关, 分子的能量越低, 反应活性就越高, 从而越容易生成化学反应膜. 因而提高润滑剂分子的稳定性和极性, 对抗磨能力的提高是有利的. 在本工作所得 3 个模型中, 润滑剂分子的磨损体积分量与分子总能量均呈现负相关, 与分子偶极矩呈现正相关, 分子总能量越低, 分子偶极矩越高, 则磨损体积分量越大. 分子总能量代表了分子的相对稳定性, 偶极矩是分子极性的表征, 说明分子稳定性越高, 极性越大, 抗磨能力越好. 这个结果和润滑机理是一致的.

比较表 3 中的相关系数, 可以看到, 磨损体积分量在低载荷下与偶极矩的相关系数更大, 而在中、高载荷下则与分子总能的相关系数更大. 这说明在不

同载荷下, 3 个过程对于润滑的贡献是不一样的. 低载荷时, 扩散和吸附的贡献是主要的, 因此与吸附相关的偶极矩相关性更大; 而在中、高载荷下, 扩散和吸附的影响越来越小, 反应的影响则不断增大, 因而与分子总能的相关性更大. 同时, 3 个模型中, 中载荷下的拟合效果均好于低载荷和高载荷. 这是因为低载荷时, 与扩散有关的参数并未引入到模型中, 如果加入相关参数, 可能会建立更好的相关性; 而在高载荷下, 分子可能处于激发态, 此时能量与计算所得的最优构型能量不一致, 因而也会在一定程度上减弱相关性.

另一方面, 本文中采用的分子结构具有苯并恶唑, 苯并咪唑, 苯并噻唑, 二氢噻唑以及哌嗪共 5 种母核, 多元线性回归模型可能对母核性质具有较强依赖性. 为了进行验证, 分别将 5 种母核的分子在 3 种载荷下的磨损体积分量对总能量和偶极矩做了回归分析, 拟合效果见表 4. 表 4 中给出了苯并恶唑, 苯并咪唑, 苯并噻唑 3 种母核分子的模拟结果, 二氢噻唑以及哌嗪两种母核由于分子数太少, 无法单独进行分析. 从相关系数 R 和检验值 F 可以看出, 多元线性回归模型针对单一母核的拟合能力明显优于针对所有分子.

表4 不同母核分子的拟合能力

Table 4 Fitting performance of lubricant additives with different matrices

Matrices	Number of samples	VS(196 N)		VS(294 N)		VS(392 N)	
		R	F	R	F	R	F
Benzoxazole A	6	0.907	6.988	0.936	10.530	0.928	9.327
Benzimidazole B	7	0.882	6.975	0.987	74.518	0.992	127.121
Benzothiazole C	18	0.673	6.207	0.751	9.715	0.663	5.870

3 结论

a. 采用 HF 从头计算分子轨道法计算 36 个含氮杂环衍生物的量子化学结构参数,对这些润滑油添加剂在 196、294 和 392 N 载荷下的磨损体积量度进行了 QSTR 研究,得到了 QSTR 模型。

b. 分子总能量的降低和偶极矩的增大,对于提高含氮杂环衍生物的抗磨损性能都是有利的. 在低载荷(196 N)下,偶极矩的影响更大;而在中、高载荷(294 和 392 N)下,总能量的影响更大. 这说明在不同载荷下,润滑油添加剂的润滑机理存在差异.

c. 多元线性回归模型对母核性质也具有较强的依赖性,如果样本数足够,采用单一母核分子建立的模型将对润滑剂添加剂的摩擦学性能具有更好的预测能力。

参考文献:

[1] Hansch C, Steward A R. The use of substituent constants in the analysis of the structure - activity relationship in penicillin derivatives[J]. *J Med Chem*, 1964, 7: 691 - 694.

[2] Lu G H, Yuan X, Zhao Y H. The acute toxicity of aniline, phenol derivatives to the *scenedesmus obliquus* and QSAR study [J]. *Environmental Chemistry*, 2000, 19(3): 225 - 229 (in Chinese) [陆光华,袁星,赵元慧. 苯酚、苯胺及其衍生物对斜生栅列藻的急性毒性及 QSAR 研究[J]. *环境化学*, 2000, 19(3): 225 - 229].

[3] Pei H P, Xu G J. Quantum chemistry parameters in QSAR toxicity studies of anilines [J]. *Journal of Zhejiang University (Science Edition)*, 2003, 30(3): 310 - 313 (in Chinese) [裴洪平,许高金. 量子化学参数用于苯胺类化合物的 QSAR 毒性研究[J]. *浙江大学学报*, 2003, 30(3): 310 - 313].

[4] Michael V, Shashank M, One S, *et al.* Local ordering in the pseudogap state of the high - T superconductor Bi₂St, CaCu₂O₈ + [J]. *Science*, 2004, 303(5666): 1 995 - 1 998.

[5] Deepika Sharma, Balasubramanian Narasimhan, Pradeep Kumar, *et al.* Synthesis and QSAR evaluation of 2 - (substituted phenyl) - 1H - benzimidazoles and [2 - (substituted phenyl) - benzimidazol - 1 - yl] - pyridin - 3 - yl - methanones [J]. *European Journal of Medicinal Chemistry*, 2009, 44(3): 1 119 - 1 127.

[6] Liu X Q, Zhou F, Liang Y M, *et al.* Tribological performance of phosphonium based ionic liquids for an aluminum - on - steel system and opinions on lubrication mechanism [J]. *Wear*, 2006, 261(10): 1 174 - 1 179.

[7] Yu G Q, Zhou F, Liu W M, *et al.* Preparation of functional ionic liquids and tribological investigation of their ultra - thin films [J]. *Wear*, 2006, 260(9): 1 076 - 1 080.

[8] Jiménez A E, Bermúdez M D, Iglesias P, *et al.* 1 - N - alkyl - 3 - methylimidazolium ionic liquids as neat lubricants and lubricant additives in steel - aluminium contacts [J]. *Wear*, 2006, 260(7): 766 - 782.

[9] Himmat Singha, Gulati I B. Tribological behaviour of some hydrocarbon compounds and their blends [J]. *Wear*, 1990, 139(2): 425 - 437.

[10] Rao W Q, Ren T H, Li J S, *et al.* The effect of molecular structure of six - element N - containing heterocyclic compounds on their wear properties [J]. *Tribology*, 2001, 21(2): 18 - 21 (in Chinese) [饶文琦,任天辉,李久盛,等. 六元含氮杂环化合物的分子结构对其抗磨性能的影响[J]. *摩擦学学报*, 2001, 21(2): 18 - 21].

[11] Huang W J, Wang X Y, Chen B S, *et al.* Quantum chemistry study on the relationship between the structure and performance of lubrication additive [J]. *Tribology*, 2002, 22(3): 206 - 209 (in Chinese) [黄伟九,王学业,陈波水,等. 润滑添加剂结构与性能的量子化学研究[J]. *摩擦学学报*, 2002, 22(3): 206 - 209].

[12] Dai K, Gao X L. Estimating antiwear properties of lubricant additives using a quantitative structure tribo - ability relationship model with back propagation neural network [J]. *Wear*, 2013, 306: 242 - 247.

[13] Ren T H, Xue Q J. A survey on multifunctional oil additives of N - containing heterocyclic compounds and their derivatives [J]. *Tribology*, 1994, 14(4): 370 - 381 (in Chinese) [任天辉,薛群基. 含 N 杂环化合物及其衍生物用作多功能润滑油添加剂的研究发展现状[J]. *摩擦学学报*, 1994, 14(4): 370 - 381].

[14] Li J S, Rao W Q, Zeng X Q, *et al.* Tribological behavior of an S - P containing benzotriazole derivative as an additive in rapeseed oil [J]. *Tribology*, 2002, 22(2): 122 - 125 (in Chinese) [李久盛,饶文琦,曾祥琼,等. 含硫和磷的苯并三氮唑衍生物作为菜籽油添加剂的摩擦学性能研究[J]. *摩擦学学报*, 2002, 22(2): 122 - 125].

[15] Huang W J. Tribological properties of benzothiazole derivatives as additives in rapeseed oil [J]. *Tribology*, 2003, 23(1): 33 - 37.

- (in Chinese)[黄伟九. 苯并噻唑衍生物在菜籽油中的摩擦学性能研究[J]. 摩擦学学报, 2003, 23(1): 33-37].
- [16] Ouyang P, Chen G X, Li H F, *et al.* Preparation and tribological behaviors of nitrogen - containing heterocyclic compounds without sulfur and phosphorus as oil additive[J]. Tribology, 2009, 29(3): 221-226 (in Chinese)[欧阳平, 陈国需, 李华峰等 新型无硫磷含氮杂环化合物的制备及其摩擦学特性[J]. 摩擦学学报, 2009, 29(3): 221-226].
- [17] Yang G B, Tian Y, Zhang J F, *et al.* Preparation and tribological properties of n - containing heterocyclic borates as lubricant additives[J]. Tribology, 2012, 32(4): 384-389 (in Chinese)[杨广彬, 田雨, 张金峰, 等. 含氮杂环硼酸酯添加剂的合成及其摩擦学性能[J]. 摩擦学学报, 2012, 32(4): 384-389].
- [18] Zhang J Y. The relationship between additives molecular structure and their tribological properties and the mechanism of boundary lubrication [D]. Lanzhou: Lanzhou Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, 1999 (in Chinese)[张俊彦, 添加剂构效关系及边界润滑机理研究[D]. 兰州: 中科院兰州化物所, 1999].
- [19] Zheng H Q, Li Y, Jiang Z Q, *et al.* 2D - QSAR Study of carbocyclic derivatives neuraminidase inhibitor [J]. Journal of Tianjin Normal University (Natural Science Edition), 2004, 26(4): 13-16 (in Chinese)[郑会勤, 李云, 蒋志勤, 等. 碳环类神经氨酸酶抑制剂的 2D - QSAR 研究[J]. 天津师范大学学报, 2004, 26(4): 13-16].

订 阅 指 南

本刊为中国科学院兰州化学物理研究所主办、科学出版社出版并向国内外公开发行的覆盖摩擦学各分支学科的综合性学术期刊(双月刊)。本刊为中国科学院文献评价中心《中国科学引文数据库统计源期刊》和科技部中国科学技术信息研究所《中国科技论文统计源期刊》,已连续五版列入《中文核心期刊要目总览》,已被美国《工程索引(EI)》、《金属文摘》、《化学文摘(CA)》、《剑桥科学文摘(CSA)》以及《日本科技文献速报(JST)》等国际知名检索系统收录。

本刊主要报道摩擦学设计、摩擦力学、摩擦化学、摩擦学材料、摩擦学表面工程、特殊工况下的摩擦学、摩擦学测试技术与设备及摩擦学系统工程与应用等重要的基础研究和应用研究新成果。设有研究简报、研究论文、工程应用、专家论坛、评述与进展、回顾等栏目。

读者对象主要是从事摩擦学研究和新材料研制的科研技术人员及高等院校相关专业的教师和研究生以及工业领域的技术人员等。

订 阅 方 式

1 邮局订阅

全国各地邮局均可订阅,邮发代号:54-42,2014年定价:30.0元/期,180.0元/年(全年6期)

2 直接汇款至编辑部订阅(可随时订阅)

方式一:邮局寄汇

地 址:兰州市天水中路18号中国科学院兰州化学物理研究所《摩擦学学报》编辑部收。

邮 编:730000

方式二:银行汇款

开 户 行:中国工商银行兰州市开发区支行

户 名:中国科学院兰州化学物理研究所

帐 号:2703000909026405762(银行汇款请注明“《摩擦学学报》编辑部”)