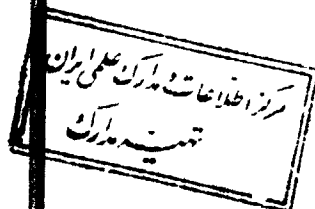


بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

اندازه گیری همزمان ترکیبات نیتروآمینی و نیتروآروماتی  
با روش اسپکتروفتومتری و کالیبراسیون چند متغیره  
(حداقل مربعات جزئی)

۱۳۸۰ / ۵ / ۳۰



رساله دکتری  
فروزان غلامیان

012422

استاد راهنما:  
خانم دکتر مرضیه چالوسی

دانشگاه تربیت معلم  
دانشکده شیمی

۳۵۶۸۰

اردیبهشت ۸۰

تقدیم بہ:

مادر مہر بانم،

سکینہ ثمری فرشتہ مہر و تلاش

پدر مہر بانم،

روانشاد ابراہیم غلامیان اسطورہٴ عشق و ایثار

## بسمه تعالی

خداوندا من با کدام زبان به سپاس تو بپردازم  
که گردش زبان به سپاس، خود نیازمند تشکر است.  
من چگونه نوای لک الحمد سر دهم که این نوای ارادت،  
خود از بی شمار نعمت های تو است و محتاج لک الحمدی دیگر.

خداوندا بی لطف تو مرا کدام صراط است به وجود عالی اعلی؟  
و بی نفوذ مشیتت کدام کمال است جویبار مرا به سوی رافت دریا؟  
این دانه به خاک نشسته را بی آب و آفتاب تو کجا سر شکفتن هست و  
این غریب و خسته را بی ماهتاب لطف تو کی پای رفتن.

خداوندا هر گاه دستانم می لرزد و عزمم سست می شود،  
دلم امیدوار رحمت توست و خاطرم جمع تو،  
چرا که می دانم هر که از غیر ببرد و کوله بار امید خویش را در سایه  
درخت توکل تو بر زمین بگذارد،  
تو از خنکای کفایتت در تابش طاقت سوز نیازها بر او می نوشانی.

من لم يشكر المخلوق لم يشكر الخالق

با تشکر از:

استاد راهنمای گرانقدرم سرکار خانم دکتر مرضیه چالوسی به جهت کمک های بیدریغ و مداوم ایشان در تمامی مراحل تدوین این رساله

و

استاد مشاور گرامی جناب آقای دکتر سید واقف حسین و جناب آقای دکتر بیرقی ریاست محترم دانشکده شیمی

و

ریاست محترم مجتمع دانشگاهی مواد و مهندسی شیمی جناب آقای دکتر صابری مقدم و ریاست محترم مرکز تحقیقات صنعتی شیمی و مهندسی شیمی دانشگاه صنعتی مالک اشتر جناب آقای مهندس صناعی به جهت مساعدتهای بیدریغ در راه انجام این رساله

و

معاونت تحصیلات تکمیلی دانشگاه صنعتی مالک اشتر جناب آقای دکتر شکری و جناب آقای مهندس حبیبی و جناب آقای مهندس حاج ملک و تمامی همکارانی که بنحوی در مراحل مختلف این پروژه از مساعدت های ایشان بهره مند بوده‌ام.

## فصل اول: طرح تحقیق

|                        |   |
|------------------------|---|
| ۲-۱-۱- مقدمه           | ۲ |
| ۲-۱-۲- طرح مسئله       | ۳ |
| ۳-۱- هدف و اهمیت تحقیق | ۴ |
| منابع فصل اول:         | ۷ |

## فصل دوم: تاریخچه کمومتری کس

|  |    |
|--|----|
| ۱-۲- مقدمه   | ۹  |
| ۲-۲- کالیبراسیون چند متغیره                          | ۱۲ |
| ۱-۲-۲- روش مستقیم D MA                               | ۱۶ |
| ۲-۲-۲- روش های غیر مستقیم و تعیین تعداد مهم فاکتورها | ۱۷ |
| ۱-۲-۲-۲- برگشت خطی چندگانه                           | ۱۷ |
| ۲-۲-۲-۲- روش های مبتنی بر تحلیل فاکتور (FA)          | ۱۹ |
| الف - روش PCR  | ۲۰ |
| ب - حداقل مربعات جزئی                                | ۲۴ |
| ۳-۲-۲-۲- تعیین تعداد مهم فاکتورها در روش های         |    |
| مبتنی بر فاکتور                                      | ۲۹ |
| الف - روش های مبتنی بر نظریه ملینسکی                 | ۲۹ |
| ب - ارزیابی متقابل                                   | ۳۱ |
| منابع فصل دوم  | ۳۳ |

فصل سوم: اندازه گیری همزمان مخلوط های دوتایی و سه تایی ترکیبات  
نیتروآمین و نیتروآروماتی با روش اسپکتروفتومتری - کالیبراسیون چند  
متغیره حداقل مربعات جزئی (PLS)

|  |    |
|--|----|
| دستگاهها و لوازم مورد نیاز                                       | ۳۷ |
| ۱-۳- اندازه گیری همزمان مخلوط های دوتایی نیتروآمین های RDX و HMX | ۳۹ |

مقدمه ..... ۳۹

روش کار ..... ۴۲

#### نتایج و بحث :

الف - کالیبراسیون و انتخاب تعداد فاکتورها ..... ۴۳

ب - معیار توانایی پیشگویی مدل ..... ۴۴

ج - معیار توانایی تشخیص نمونه های انحرافی ..... ۴۵

د - اندازه گیری همزمان HMX و RDX در

نمونه های صنعتی ..... ۴۶

۳-۲- اندازه گیری همزمان RDX و K-6 در نمونه های سنتزی ..... ۵۶

مقدمه ..... ۵۶

روش کار ..... ۵۷

#### نتایج و بحث :

الف - کالیبراسیون و انتخاب تعداد فاکتورها ..... ۵۷

ب - معیار توانایی پیشگویی مدل ..... ۵۸

ج - معیار توانایی تشخیص نمونه های انحرافی ..... ۵۸

د - اندازه گیری همزمان K-6 و RDX در

نمونه های سنتزی ..... ۵۸

۳-۳- اندازه گیری همزمان RDX و TNT در مخلوط های انفجاری

مقدمه ..... ۶۶

روش کار ..... ۶۸

#### نتایج و بحث :

الف - کالیبراسیون و انتخاب تعداد فاکتورها ..... ۶۸

ب - اندازه گیری همزمان RDX و TNT در

نمونه های صنعتی ..... ۶۹

۳-۴- اندازه گیری همزمان TNT و DNT در مخلوط های انفجاری ..... ۷۹

#### روش کار

#### نتایج و بحث :

الف- کالیبراسیون ..... ۸۰

ب - انتخاب تعداد فاکتورها ..... ۸۰

۳-۵- اندازه‌گیری مخلوط‌های دوجزیبی و سه‌جزیبی نیتروگوانیدین، گوانیدین نیترات، دی‌سیان‌دی‌آمید و آمونیوم نیترات.

|          |   |
|----------|---|
| ۸۶.....  | مقدمه   |
| ۹۰.....  | روش کار   |
|          | نتایج و بحث:  |
|          | ۳-۵-۱- اندازه‌گیری همزمان مخلوط‌های دوتایی نیتروگوانیدین و دی‌سیان‌دی‌آمید                    |
| ۹۰.....  | ۳-۵-۲- اندازه‌گیری همزمان مخلوط‌های دوتایی نیتروگوانیدین و گوانیدین نیترات                    |
| ۹۷.....  | ۳-۵-۳- اندازه‌گیری همزمان مخلوط‌های دوتایی گوانیدین نیترات و آمونیوم نیترات                   |
| ۱۰۳..... | ۳-۵-۴- اندازه‌گیری همزمان مخلوط‌های سه‌تایی گوانیدین نیترات، دی‌سیان‌دی‌آمید و آمونیوم نیترات |
| ۱۱۰..... | ۳-۵-۵- اندازه‌گیری همزمان مخلوط‌های سه‌تایی نیتروگوانیدین، گوانیدین نیترات و دی‌سیان‌دی‌آمید  |
| ۱۲۰..... | نتیجه‌گیری  |
| ۱۳۴..... | منابع فصل سوم   |
| ۱۴۱..... |   |

### فصل چهارم: جداسازی کنفورمرهای نیتروآمین‌ی بوسیله کروماتوگرافی مایع با کارایی بالا (HPLC)

|          |                        |
|----------|------------------------|
| ۱۴۵..... | مقدمه                  |
| ۱۴۶..... | الف - کنفورمرهای RDX   |
| ۱۴۸..... | ب - کنفورمرهای HMX     |
|          | بخش تجربی              |
| ۱۵۲..... | وسایل مورد نیاز        |
| ۱۵۲..... | مواد شیمیایی مورد نیاز |
| ۱۵۲..... | روش کار                |
| ۱۵۳..... | نتایج و توضیحات        |
| ۱۶۰..... | نتیجه‌گیری             |
| ۱۶۱..... | منابع فصل چهارم        |



فصل پنجم: اندازه‌گیری RDX و K-6 در مخلوط‌های منفجره نوع دوم  
با استفاده از کروماتوگرافی لایه نازک با کارآیی بالا

|   |     |
|---|-----|
| مقدمه :                                     | ۱۶۴ |
| بخش تجربی                                   |     |
| دستگاهها و لوازم مورد نیاز                  | ۱۶۵ |
| مواد شیمیایی مورد نیاز                      | ۱۶۵ |
| روش کار                                     | ۱۶۵ |
| نتایج و توضیحات                             |     |
| الف - انتخاب پذیری                          | ۱۶۷ |
| ب - کالیبراسیون و دامنه غلظتی مورد استفاده  | ۱۶۷ |
| ج- صحت                                      | ۱۶۸ |
| د - اندازه گیری ترکیب درصدها در نمونه حقیقی | ۱۶۹ |
| نتیجه‌گیری                                  | ۱۷۳ |
| منابع فصل پنجم                              | ۱۷۴ |
| ضمیمه                                       | ۱۷۵ |

- شکل ۱-۲ - دیاگرام روش تولید فاکتورهای اجزاء اصلی ..... ۲۴
- شکل ۲-۲ - دیاگرام نشان دهنده روش کلی تولید فاکتورهای PLS ..... ۲۷
- شکل ۳-۲ - نمایش مقدار PRESS برحسب تعداد فاکتورها برای  
 دو روش PCR و PLS ..... ۲۸
- شکل ۱-۳ - ساختمان شیمیایی RDX و HMX ..... ۴۰
- شکل ۲-۳ - طیف FT-IR نمونه خالص سازی شده HMX ..... ۴۷
- شکل ۳-۳ - طیف <sup>1</sup>H-NMR نمونه خالص سازی شده HMX در حلال DMSO-d<sub>6</sub> ..... ۴۸
- شکل ۴-۳ - طیف FT-IR نمونه خالص سازی شده RDX ..... ۴۸
- شکل ۵-۳ - طیف <sup>1</sup>H-NMR نمونه خالص سازی شده RDX در حلال استون دوتره ..... ۴۹
- شکل ۶-۳ - طیفهای جذبی RDX و HMX حل شده در استونیتریل ..... ۴۹
- شکل ۷-۳ - طیفهای جذبی استانداردهای دوتایی RDX و HMX ..... ۵۰
- مجموعه استاندارد (یادگیری)
- شکل ۸-۳ - نمودار مقدار PRESS ( حداقل خطای پیشگویی ) برحسب  
 تعداد فاکتورها ..... ۵۰
- شکل ۹-۳ - طیف جذبی نمونه حقیقی RDX ..... ۵۱
- شکل ۱۰-۳ - ساختمان شیمیایی RDX و K-6 ..... ۵۶
- شکل ۱۱-۳ - طیفهای جذبی RDX باغلظت و K-6 حل شده در استونیتریل ..... ۶۰
- شکل ۱۲-۳ - طیفهای جذبی استانداردهای دوتایی RDX و K-6 مجموعه  
 استاندارد (یادگیری) ..... ۶۰
- شکل ۱۳-۳ - نمایش مقدار PRESS ( خطای پیشگویی ) به ازای تعداد  
 فاکتورها در اندازه گیری RDX و K-6 ..... ۶۱
- شکل ۱۴-۳ - طیف جذبی نمونه حقیقی K-6 ..... ۶۱
- شکل ۱۵-۳ - طیفهای جذبی RDX و TNT حل شده در استونیتریل ..... ۶۹
- شکل ۱۶-۳ - طیفهای جذبی استانداردهای دوتایی RDX و TNT  
 مجموعه استاندارد (یادگیری) ..... ۷۰
- شکل ۱۷-۳ - نمودار مقدار PRESS ( حداقل خطای پیشگویی ) برحسب

- تعداد فاکتورها..... ۷۰
- شکل ۱۸-۳ - طیف جذبی نمونه حقیقی RDX-TNT در حلال استونیتریل..... ۷۱
- شکل ۱۹-۳ - کروماتوگرام HPLC استانداردهای دو جریبی RDX-TNT..... ۷۱
- شکل ۲۰-۳ - کروماتوگرام HPLC نمونه حقیقی RDX-TNT..... ۷۲
- شکل ۲۱-۳ - طیفهای جذبی DNT و TNT حل شده در استونیتریل..... ۸۰
- شکل ۲۲-۳ - طیفهای جذبی استانداردهای دوتایی TNT و DNT  
مجموعه استاندارد (یادگیری)..... ۸۱
- شکل ۲۳-۳ - نمودار مقدار PRESS ( حداقل خطای پیشگویی ) بر حسب  
تعداد فاکتورها..... ۸۱
- شکل ۲۴-۳ - طیف جذبی نیتروگوانیدین، N Q و دی سیان  
دی آمید (DA) در آب..... ۹۱
- شکل ۲۵-۳ - طیفهای جذبی استانداردهای دوتایی نیتروگوانیدین (NQ)  
و دی سیان دی آمید (DA) (مجموعه استاندارد (یادگیری)  
در حلال آب..... ۹۲
- شکل ۲۶-۳ - نمایش مقدار PRESS به ازای تعداد فاکتورها در  
اندازه گیری مخلوطهای دوتایی نیتروگوانیدین (NQ)  
و دی سیان دی آمید (DA)..... ۹۲
- شکل ۲۷-۳ - طیفهای جذبی نیتروگوانیدین (NQ) و  
گوانیدین نیترات در حلال آب..... ۹۷
- شکل ۲۸-۳ - طیفهای جذبی استانداردهای دوتایی نیتروگوانیدین (NQ)  
و گوانیدین نیترات (NQ) در حلال آب (مجموعه استاندارد)..... ۹۸
- شکل ۲۹-۳ - نمایش مقدار PRESS به ازای تعداد فاکتورها در  
اندازه گیری مخلوطهای دوتایی نیتروگوانیدین و گوانیدین نیترات..... ۹۸
- شکل ۳۰-۳ - طیفهای جذبی گوانیدین نیترات (NQ) و آمونیوم  
نیترات (AN) در حلال آب..... ۱۰۴
- شکل ۳۱-۳ - طیفهای جذبی استانداردهای دوتایی گوانیدین

- ۱۰۴..... نیترات QN و آمونیوم نیترات در حلال آب  
 شکل ۳-۳۲ - نمایش مقداری PRESS به ازای تعداد فاکتورها در  
 اندازه‌گیری مخلوط دوتایی گوانیدین
- ۱۰۵..... نیترات و آمونیوم نیترات
- ۱۱۲... شکل ۳-۳۳ - طیفهای جذبی استانداردهای QN, DA, و AN در حلال آب  
 شکل ۳-۳۴ - طیفهای جذبی استانداردهای سه تایی QN, DA, و AN  
 ۱۱۲ ..... مجموعه استاندارد یادگیری ( در حلال آب )  
 شکل ۳-۳۵ - نمایش مقدار PRESS به ازای تعداد فاکتورها در اندازه‌گیری  
 ۱۱۳..... مخلوطهای سه تایی QN, DA, AN  
 شکل ۳-۳۶ - طیفهای جذبی نمونه‌های حقیقی (گوانیدین نیترات )  
 ۱۱۳..... Z1, Z2, Z3 در حلال آب
- ۱۱۴..... شکل ۳-۳۷ - کروماتوگرام HPLC نمونه Z1 (نمونه گوانیدین نیترات )  
 شکل ۳-۳۸ - کروماتوگرام HPLC محلول های استاندارد دی سیان دی آمید..... ۱۱۴
- ۱۲۲.. شکل ۳-۳۹ - طیفهای جذبی استانداردهای QN, DA, و NQ در حلال آب  
 شکل ۳-۴۰ - طیفهای جذبی استانداردهای سه تایی QN, DA, و NQ  
 ۱۲۳..... مجموعه استاندارد یادگیری ( در حلال آب )  
 شکل ۳-۴۱ - نمایش مقدار PRESS به ازای تعداد فاکتورها در  
 ۱۲۳..... مخلوطهای سه تایی QN, DA, NQ
- ۱۲۴..... شکل ۳-۴۲ - طیف جذبی نمونه حقیقی Z4 (نیتروگوانیدین) در حلال آب  
 شکل ۳-۴۳ - کروماتوگرام HPLC نمونه Z4 (نمونه نیتروگوانیدین)؛  
 ۱۲۵..... دتکتور UV با طول موج ۲۱۵nm  
 شکل ۳-۴۴ - کروماتوگرام HPLC مربوط به ناخالصی موجود  
 ۱۲۵..... در نیتروگوانیدین (نمونه Z4)؛ با طول موج ۲۱۵nm  
 شکل ۳-۴۵ - کروماتوگرام HPLC نمونه Z4 (نمونه نیتروگوانیدین)؛  
 ۱۲۶..... دتکتور UV با طول موج ۲۶۵nm  
 شکل ۳-۴۶ - کروماتوگرام HPLC محلول های استاندارد گوانیدین نیترات..... ۱۲۶  
 شکل ۳-۴۷ - کروماتوگرام HPLC محلول های استاندارد نیتروگوانیدین..... ۱۲۷  
 شکل ۳-۴۸ - کروماتوگرام HPLC نمونه Z4 (نمونه نیتروگوانیدین) با سه غلظت  
 ۱۲۷..... در طول موج ۲۶۵nm

- شکل ۴-۱ - کنفورمرهای  $\alpha$ ،  $\beta$  و  $\gamma$ -اکتوزن..... ۱۴۹
- شکل ۴-۲ - کروماتوگرام حاصل از جداسازی RDX و HMX با استفاده از مخلوط حلال (۵۰:۵۰) MeOH:H<sub>2</sub>O..... ۱۵۶
- شکل ۴-۳ - کروماتوگرام حاصل از جداسازی RDX و HMX با استفاده از مخلوط حلال (۴۵:۵۵)..... ۱۵۶
- شکل ۴-۴ - کروماتوگرام حاصل از جداسازی RDX و HMX با استفاده از مخلوط حلال (۴۰:۶۰) MeOH:H<sub>2</sub>O..... ۱۵۷
- شکل ۴-۵ - کروماتوگرام حاصل از جداسازی RDX و HMX با استفاده از مخلوط حلال (۳۵:۶۵) MeOH:H<sub>2</sub>O..... ۱۵۷
- شکل ۴-۶ - کروماتوگرام حاصل از جداسازی RDX و HMX با استفاده از مخلوط حلال (۳۰:۷۰) MeOH:H<sub>2</sub>O..... ۱۵۸
- شکل ۴-۷ - کروماتوگرام حاصل از جداسازی RDX و HMX با استفاده از مخلوط حلال (۲۵:۷۵) MeOH:H<sub>2</sub>O..... ۱۵۸
- شکل ۴-۸ - کروماتوگرام حاصل از جداسازی RDX و HMX با استفاده از مخلوط حلال (۲۰:۸۰) MeOH:H<sub>2</sub>O..... ۱۵۹
- شکل ۵-۱ - جداسازی خط پایه‌ای بین K-6 ( $R_f = 0/69$ ) و RDX ( $R_f = 0/82$ )..... ۱۶۷
- شکل ۵-۲ - (RDX) کروماتوگرام پیمایش فتو دانسیتومتری لکه‌های استاندارد های RDX و نمونه حقیقی و (K-6) کروماتوگرام پیمایش دانسیتومتری لکه‌های استانداردهای K-6 در جهت عمود بر حرکت حلال..... ۱۷۱
- شکل ۵-۳ - منحنی کالیبراسیون خطی RDX..... ۱۷۲
- شکل ۵-۴ - منحنی کالیبراسیون خطی K-6..... ۱۷۲

## فهرست

- جدول ۱-۳ - داده‌های غلظتی استانداردهای متفاوت در مجموعه  
کالیبراسیون برای اندازه‌گیری R DX و HMX ..... ۵۲
- جدول ۲-۳ - داده‌های غلظتی استانداردهای متفاوت در مجموعه  
کالیبراسیون برای اندازه‌گیری R DX و HMX ..... ۵۳
- جدول ۳-۳ - پارامترهای آماری بدست آمده برای مدل PLS-2 برای RDX و HMX ..... ۵۳
- جدول ۴-۳ - مقادیر F محاسبه شده و F بحرانی در احتمال ۰/۰۱ برای  
مجموعه کالیبراسیون سیستم دوجزیی R DX و HMX ..... ۵۴
- جدول ۵-۳ - مقادیر F محاسبه شده و F بحرانی در احتمال ۰/۰۱ برای  
مجموعه کالیبراسیون سیستم دوجزیی ..... ۵۵
- جدول ۶-۳ - ترکیب درصد نمونه‌های صنعتی اندازه‌گیری شده  
با روش P LS-2 و روش استاندارد نظامی ..... ۵۵
- جدول ۷-۳ - داده‌های غلظتی استانداردهای دوتایی مجموعه  
کالیبراسیون در اندازه‌گیری همزمان R DX و keto-RDX ..... ۶۲
- جدول ۸-۳ - نتایج حاصل از اندازه‌گیری مخلوطهای دوتایی  
مجموعه پیشگویی R DX و K-6 ..... ۶۳
- جدول ۹-۳ - پارامترهای آماری بدست آمده برای اندازه‌گیری  
RDX و K-6 در سیستم دوجزئی ..... ۶۳
- جدول ۱۰-۳ - مقادیر F محاسبه شده و F بحرانی در احتمال ۰/۰۱  
برای مجموعه استاندارد سیستم دوجزیی R DX و K-6 ..... ۶۴
- جدول ۱۱-۳ - مقادیر F محاسبه شده و F بحرانی در احتمال ۰/۰۱  
برای مجموعه پیشگویی سیستم دوجزیی R DX و K-6 ..... ۶۵
- جدول ۱۲-۳ - ترکیب درصد RDX و K-6 در نمونه حقیقی ..... ۶۵
- جدول ۱۳-۳ - داده‌های غلظتی استانداردهای دوتایی مجموعه کالیبراسیون  
در اندازه‌گیری همزمان RDX و T NT ..... ۷۳
- جدول ۱۴-۳ - نتایج حاصل از اندازه‌گیری مخلوطهای دوتایی مجموعه  
پیشگویی R DX و TNT ..... ۷۴
- جدول ۱۵-۳ - پارامترهای آماری برای هر یک از اجزاء اندازه‌گیری در سیستم

- ۷۴..... دو جزئی RDX و TNT
- جدول ۱۶-۳ - مقادیر F محاسبه شده و F بحرانی در احتمال ۰/۰۱ در اندازه‌گیری
- ۷۵..... TNT و R DX (مجموعه استاندارد)
- جدول ۱۷-۳ - مقادیر F محاسبه شده و F بحرانی در احتمال ۰/۰۱ برای
- ۷۶..... مجموعه پیشگویی RDX و TNT
- جدول ۱۸-۳ - داده های کالیبراسیون و اطلاعات مربوط به نمونه های حقیقی
- ۷۷..... با روش HPLC
- جدول ۱۹-۳ - ترکیب درصدهای اندازه‌گیری شده در نمونه حقیقی با
- ۷۸..... استفاده از سه روش
- جدول ۲۰-۳ - داده‌های غلظتی استانداردهای دوتایی مجموعه کالیبراسیون
- ۸۲..... در اندازه‌گیری همزمان TNT و DNT
- جدول ۲۱-۳ - نتایج حاصل از اندازه‌گیری مخلوطهای دوتایی مجموعه
- ۸۳..... پیشگویی TNT و D NT
- جدول ۲۲-۳ - پارامترهای آماری برای هر یک از اجزاء اندازه‌گیری در سیستم
- ۸۳..... دو جزئی TNT و D NT
- جدول ۲۳-۳ - مقادیر F محاسبه‌شده و F بحرانی در احتمال ۰/۰۱ در اندازه‌گیری
- ۸۴..... TNT و DNT (مجموعه استاندارد)
- جدول ۲۴-۳ - مقادیر F محاسبه شده و F بحرانی در احتمال ۰/۰۱
- ۸۵..... برای مجموعه پیشگویی TNT و DNT
- جدول ۲۵-۳ - داده‌های غلظتی استانداردهای متفاوت در مجموعه کالیبراسیون
- ۹۳..... برای اندازه‌گیری D A و NQ
- جدول ۲۶-۳ - نتایج حاصل از اندازه‌گیری مخلوطهای دوتایی مجموعه پیشگویی
- ۹۴..... دی‌سیان دی‌آمید و نیتروگوانیدین
- جدول ۲۷-۳ - پارامترهای آماری بدست آمده برای مدل PLS-2 برای هر ترکیب
- ۹۴..... در سیستم دو جزئی D A و NQ
- جدول ۲۸-۳ - مقادیر F محاسبه شده و F بحرانی در احتمال ۰/۰۱ برای مجموعه
- ۹۵..... کالیبراسیون سیستم دو جزئی D A و NQ
- جدول ۲۹-۳ - مقادیر F محاسبه شده و F بحرانی در احتمال ۰/۰۱ برای مجموعه
- ۹۶..... پیشگویی DA و NQ