

卤代烷烃结构与折光指数关系的拓扑化学研究

王克强

洛阳师范高等专科学校化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 本文根据分子拓扑学原理,

用色图方法探讨了卤代烷烃结构与折光指数的关系。提出一个普遍适用于卤代烷烃折光指数的定量关系式。应用这一定量关系, 不仅能够描述卤代烷烃折光指数的变化规律、预测卤代烷烃的折光指数。而且能够合理表征物质结构与性能之间的关系。

关键词 [分子结构](#) [结构与性能关系](#) [卤代烃](#) [拓扑](#) [折光指数](#) [定量关系](#) [河南省优秀中青年骨干教师基金](#)

分类号 [0641](#)

## Studies on the relationship between refractive indexes of haloalkanes and their molecular structure by using chemical topology

WANG KEQIANG

**Abstract** An approach based on the molecular topology is used to study the relationship between refractive indexes of haloalkanes and their molecular structure, and a quantitative relation has been established which can be used to characterize the structure-property relationship of haloalkanes to predict the refractive indexes  $n_D$  of liquid haloalkanes at 293K where  $\lambda$  and  $a_i (i=0\sim 4)$  are constants for haloalkanes,  $W_k$ ,  $P_3$ ,  $S_1$  and  $S_2$  are structural information indexes defined in this paper. The results show that the calculated values of refractive indexes agree with the experiment data satisfactorily, and the mean relative deviation is only 0.070% for 252 haloalkanes.

**Key words** [MOLECULAR STRUCTURE](#) [STRUCTURE AND PROPERTY CORRELATION](#) [HALOHYDROCARBON](#) [TOPOLOGY](#) [REFRACTIVE INDEX](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(0KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献](#)

服务与反馈

▶ [把本文推荐给朋友](#)

▶ [加入我的书架](#)

▶ [加入引用管理器](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“分子结构”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [王克强](#)