

不饱和烃的理化性质与分子拓扑指数的关系研究

倪才华,冯志云,李良超

荆州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 定义并分别求算了不饱和烃(烯烃、炔烃、烷基苯)的价键连通性指数和价键信息拓扑指数,将拓扑指数分别与这些物质的标准生成热、标准熵、标准生成自由能等一系列理化性质相关联,用计算机回归方法确定了不同性质的最佳函数形式。回归的复相关系数和重新计算的误差结果显示拓扑指数与理化性质具有优良的相关性。

关键词 [炔烃](#) [苯](#) [P](#) [烯烃](#) [理化性质](#) [拓扑指数](#)

分类号 [0641](#)

Studies on the physico-chemical properties of unsaturated hydrocarbons using topological indices

NI CAIHUA,FENG ZHIYUN,LI LIANGCHAO

Abstract Some properties of unsaturated hydrocarbons have been investigated with topological methods in this study. Fifteen physico-chemical properties of alkenes, alkynes and alkyl benzenes are correlated with topological indices and a general empirical equation is proposed as follows:

$Pt=AN^a+BXv^b+Clx^c+D$. Regression analyses have given the calculated results. It is found the fifteen physico-chemical properties of the unsaturated hydrocarbons have excellent correlativity with the topological indices.

Key words [ALKYNE](#) [BENZENE](#) [P](#) [ALKENE](#) [PHYSICO-CHEMICAL PROPERTIES](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(383KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“炔烃”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [倪才华](#)

· [冯志云](#)

· [李良超](#)