

研究论文

DMSO溶剂中有机化合物pKa的定量构效关系研究

谢昆* 乔澍 程聪

(重庆三峡学院化学与环境工程学院 重庆 万州 404000)

收稿日期 2008-8-5 修回日期 2008-8-26 网络版发布日期 2009-2-24 接受日期 2008-10-30

摘要

应用物质结构-性质关系(QSPR, quantitative structure-property relationships)方法研究了DMSO溶剂中45个有机化合物的pKa数值与电拓扑状态指数之间的定量关系, 并建立如下模型: $pKa = -1.545 \times E2 + 0.633 \times E4 - 0.737 \times E5 + 0.973 \times E6 - 4.048 \times E7 - 1.456 \times E8 + 0.628 \times E9 + 28.650$. $R=0.991$, $S=0.828$. “逐一剔除”交叉验证的结果证明模型具有良好的稳定性和较强的预测能力. 研究表明电拓扑状态指数能够有效地预测有机化合物的pKa值.

关键词

[电拓扑状态指数](#) [QSPR](#) [pKa值](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

谢昆 xiekun_79@163.com

作者个人主页:

谢昆* 乔澍 程聪

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF](#) (355KB)
- ▶ [\[HTML全文\]](#) (0KB)
- ▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [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](#)
- ▶ [引用本文](#)
- ▶ [Email Alert](#)

相关信息

- ▶ [本刊中 包含 “](#)

[电拓扑状态指数” 的相关文章](#)

- ▶ 本文作者相关文章

· [谢昆, 乔澍, 程聪](#)