



- 首页
- 期刊介绍
- 基本信息
- 编委会
- 编辑团队
- 期刊荣誉
- 收录一览
- 征稿简则
- 作者中心
- 编辑中心
- 订阅指南
- 联系我们
- English

吉首大学学报自然科学版 » 2006, Vol. 27 » Issue (4): 84-89 DOI:

化学化工 [最新目录](#) | [下期目录](#) | [过刊浏览](#) | [高级检索](#)

[« Previous Articles](#) | [Next Articles »](#)

## 羧酸类化合物pKa的定量构效关系

(徐州师范大学化学系, 江苏 徐州 221116)

### The Quantitative Structure-Property Relationships Research of pKa Values of Substituted Carboxylic Acids

(Department of Chemistry, Xuzhou Normal University, Xuzhou 221116, Jiangsu China)

- 摘要
- 参考文献
- 相关文章

全文: [PDF \(902 KB\)](#) [HTML \(1 KB\)](#) 输出: [BibTeX](#) | [EndNote \(RIS\)](#) [背景资料](#)

#### 服务

- ▶ [把本文推荐给朋友](#)
- ▶ [加入我的书架](#)
- ▶ [加入引用管理器](#)
- ▶ [E-mail Alert](#)
- ▶ [RSS](#)

#### 作者相关文章

- ▶ [杨伟华](#)
- ▶ [冯长君](#)

**摘要** 对38种有机一元羧酸的电拓扑状态指数(En)及价分子连接性指(m<sub>xv</sub>)进行了计算,建立了有机羧酸 pKa与拓扑指数的数学模型.最佳七元回归模型为:  $pK_a = 6.271 + 2.391E8 - 0.470E39 - 0.171E38 + 10.082E6 - 0.730E40 - 0.192E17 + 1.8674xv$ . 其  $R = 0.967, s = 0.2997$ , 优于文献研究结果.通过Jackknife法检验该模型具有总体稳健性.结果表明,电拓扑指数能够较好表征分子结构特征,有效揭示影响羧酸pKa的本质因素.

**关键词:** 羧酸化合物 pKa 电拓扑状态指数 分子连接性指数 定量结构性质相关

**Abstract:** In this paper, Hall's electrotopological state indices(En) and Kier's molecular connectivity indices (m<sub>xv</sub>) are calculated for 38 monocarboxylic acids. A satisfactory relationship between pKa and En, m<sub>xv</sub> is expressed as:  $pK_a = 6.271 + 2.391E8 - 0.470E39 - 0.171E38 + 10.082E6 - 0.730E40 - 0.192E17 + 1.8674xv$  where R and s are 0.967 and 0.2997, respectively. The model is examined to validate overall robustness with Jackknife tests. The regression results show that the electrotopological state indices can characterize molecular structure and explain influential factors of pKa.

**Key words:** carboxylic acid pKa electropological state indices molecular connectivity indices QSPR

#### 基金资助:

江苏省高校自然科学基金项目(02KJB150008); 徐州师范大学自然科学研究项目(04XLB16)




**作者简介:** 杨伟华(1970-),女,山东淄博人,工学硕士,徐州师范大学化学系讲师,主要从事物质构效学研究; 冯长君(1954-),男,江苏徐州人,徐州师范大学化学系教授,主要从事物质结构学研究.

#### 引用本文:

杨伟华,冯长君. 羧酸类化合物pKa的定量构效关系[J]. 吉首大学学报自然科学版, 2006, 27(4): 84-89.

YANG Wei-Hua, FENG Chang-Jun. The Quantitative Structure-Property Relationships Research of pKa Values of Substituted Carboxylic Acids[J]. Journal of Jishou University (Natural Sciences Edit), 2006, 27(4): 84-89.

- [1] 许祿,胡昌玉.应用化学图论 [M].北京:科学出版社, 2000.
- [2] 王连生.环境化学进展 [M].北京:化学工业出版社, 1995.
- [3] DUCHOWICZ P, CASTRO E A. Calculate of Molecular Polarizability and Water Solubility of Alkanes and Alcohols [J]. J. Indian. Chem. Soc., 2001, 78(4): 192.
- [4] 徐光宪. 21世纪理论化学的挑战和机遇 [J]. 结构化学, 2002, 21(5): 463-469.
- [5] 冯长君, 堵锡华, 唐自强. 取代芳烃对发光菌、大型蚤、呆鲈鱼急性毒性的QSAR研究 [J]. 应用化学, 2002, 19(11): 1 037-1 042.

- [6] ESTRADA E J.Edge Adjacency Relationships and a Novel Topological Index Related to Molecular Volume [J].Chem. Inf. Comput. Sci.,1995,35 (1) :31. 
- [7] 王超,冯长君.原子配分参数、配分连接性指数及其应用 [J].无机化学学报,2002,18(8):792-796.
- [8] 冯长君,李鸣建,陈艳,等.取代芳烃对五种生物急性毒性的QSAR研究 [J].化学学报,2001,59(6):853-861.
- [9] RANDIC M.On Characterization of Molecular Branching [J].J.Amer.Chem.Soc.,1975,69(1):17-21.
- [10] KIER L B,HALL L H.Molecular Connectivity in Structure-Activity Analysis [M].England:Research Studies Press,1986.
- [11] HALL L H,KIER L B,BROWN B B.Molecular Similarity Based on Novel Atom-Type Eletrotological State Indices [J].J. Chem. Inf. Comput. Sci.,1995,35(6):1074-1080. 
- [12] HALL L H,KIER L B.Eletrotological State Indices for Atom Types:A Novel Combination of Eletronic,Topological,and Valence State Information [J].J. Chem. Inf. Comput. Sci.,1995,35(6):1 039-1 045. 
- [13] 齐玉华,许禄.羧酸类化合物的结构和萃取性能的相关性 [J].高等学校化学学报,2002,23(8):1 489-1 493.

没有找到本文相关文献

版权所有 © 2012《吉首大学学报(自然科学版)》编辑部

通讯地址:湖南省吉首市人民南路120号《吉首大学学报》编辑部 邮编:416000

电话传真:0743-8563684 E-mail:xb8563684@163.com 办公QQ:1944107525

本系统由北京玛格泰克科技发展有限公司设计开发 技术支持:support@magtech.com.cn