

拓扑指数 mG 及其应用*

徐士友,张忠平,宋明友,薛建跃

(巢湖学院化学系,安徽巢湖 238000)

摘要:构建了拓扑指数 mG .用 mG 的0,1阶指数分别与20种碱金属卤化物的晶格能 U_1 、生成焓 $\Delta_f H_m$ 、离子水化能 $\Delta_h G_m^\theta$ 、气态碱金属卤化物核间距 R_0 、20种碱土金属卤化物的晶格能 U_2 、51种金属离子水合热 $\Delta_h H_h^\theta$ 和80种离子标准生成热 $\Delta_f H_m^\theta$ 关联,所获得的0,1阶指数的拟合回归方程的相关系数(复相关系数)分别为0.9964(0.9976),0.9802(0.9873),0.9779(0.9847),0.9970(0.9970),0.9879(0.9918),0.9922和0.9798.预测取得了较好的结果.

关键词:电负性;拓扑指数;晶格能;生成焓;离子水化能;离子水合热;离子标准生成热

中图分类号:O611.3

文献标识码:A

The topological index mG and its application

XU Shi-you, ZHANG Zhong-ping, SONG Ming-you, XUE Jian-yue

(Department of Chemistry, Chaohu College, Chaohu 238000, China)

Abstract: The topological index mG was proposed. Its 0-order index and 1-order index were related, respectively, with lattice energy, enthalpy of formation, ion hydrated energy of 20 kinds of alkali halides, internuclear distance bond length of gaseous alkali halides, lattice energy of 20 kinds of alkali-earth metal halides, 51 kinds of ion hydrated heat, and 80 kinds of ion standard heat of formation, then some regression equations were suggested. The related coefficients (multiple correlation coefficients) of the obtained equations are 0.9964(0.9976), 0.9802(0.9873), 0.9779(0.9847), 0.9970(0.9970), 0.9879(0.9918), 0.9922 and 0.9798, respectively, proving that the effectiveness of the index.

Key words: electronegativity; topological index; lattice energy; enthalpy of formation; ion hydrated energy; ion hydrated heat; ion standard heat of formation.

0 引言

目前,定量结构—活性/性质相关性(QSAR/QSPR)的研究,是国际上众多的科学家所从事的一项研究课题.拓扑指数法是QSAR/QSPR主要研究方法之一.在化合物中,用节点代表结构图中的原子,用边代表结构图中的连接键,则化合物的结构图就是一个拓扑图.拓扑指数就是从化合物拓扑图衍生出来的数学不变量,它隐含着物质结构的重要信

息.迄今为止,文献报道的拓扑指数约200种^[1],多数用于有机物的理化性质预测.

1975年,Randic建议一种最初称为支化指数的拓扑指数 1X ,定义了分子的支化度 p_i ^[2],后来由Kier和Hall加以扩展,使其应用范围大大拓宽,扩展后的指数称为分子连接度指数 mX ,并用点价 δ_i 替代了 p_i ^[3],后来Randic对支化指数作了修正,称为

* 收稿日期:2004-02-27;修回日期:2005-05-21

基金项目:安徽省教育厅自然科学基金(2003kj277)资助.

作者简介:徐士友(通讯作者),男,1944年生,副教授.研究方向:无机化学. E-mail: xushiyu2002@etang.com

IP 指数. 在很多情况下, 一般将上述的拓扑指数通称为 Randic 分子连接度指数 mX . 该指数已广泛应用于化学、生物学和物理学等各种领域, 是最重要的拓扑指数之一. mX 为化合物中若干个相邻原子的点价 δ_i 乘积的平方根倒数之和,

$${}^mX = \sum (\delta_i \delta_j \delta_k \cdots)^{-0.5}. \quad (1)$$

该拓扑指数可以组成一个系列. 其 0 阶(0X), 1 阶(1X)指数分别为

$${}^0X = \sum (\delta_i)^{-0.5}, \quad (2)$$

$${}^1X = \sum (\delta_i \delta_j)^{-0.5}. \quad (3)$$

Randic 拓扑指数原来只应用于烷烃. 后来, 有些学者对其核心概念点价 δ_i 进行适当的修改或另辟蹊径, 进行创建, 得出一些形式各异、用途不同的新的拓扑指数, 其中有一些可用于无机物的理化性质的预测^[4~10]. 我们对 Randic 拓扑指数的核心概念点价 δ_i 进行修改, 构建了一种新的拓扑指数, 用于预测一些无机物的理化性质, 取得了较好的结果.

1 拓扑指数 mG 的构建

我们认为, 物质之间发生化学反应的能力, 取决于元素 i 的氧化数 Z_i 、Pauling 电负性 x_i ^[11]及其原子的最外有效主量子数 n_i^* . 当然, 也与分子的大小及空间构型等因素有关. 为了预测一些无机物的理化性质, 我们对 Randic 拓扑指数进行修改, 将其核心概念点价 δ_i 修改为

$$\delta_i = (n_i^* + n_j^*) / (Z_i^2 x_i). \quad (4)$$

最外主量子数 n_i 和与其有效主量子数 n_i^* 的关系为^[12]

$$\begin{cases} n_i = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7; \\ n_i^* = 0.85, 1.99, 2.89, 3.45, 3.85, 4.36, 4.99. \end{cases}$$

将式(4)的值带入式(1), 就构成了一种新的拓扑指数 mG , 其 0 阶(0G), 1 阶(1G)指数分别为

$${}^0G = \sum [(n_i^* + n_j^*) / (Z_i^2 x_i)]^{-0.5}, \quad (5)$$

$${}^1G = \sum \{ [(n_i^* + n_j^*) / (Z_i^2 x_i)] \times [(n_i^* + n_j^*) / (Z_j^2 x_j)] \}^{-0.5}. \quad (6)$$

其中, 式(5)中的“ \sum ”是对分子中所有原子个数求和, 对简单离子, 即对离子电荷数求和; 式(6)中的“ \sum ”是对分子中所有化学键数求和. 以上表达式中的数值皆取正值.

计算示例, 如 NaF, $Z_{\text{Na}^+} = 1, x_{\text{Na}} = 0.93, Z_{\text{F}^-} =$

$1, x_{\text{F}} = 3.98, n_{\text{Na}}^* + n_{\text{F}}^* = 2.89 + 1.99 = 4.88$, 则
 ${}^0G = (4.88/0.93)^{-0.5} + (4.88/3.98)^{-0.5} = 1.3396$,
 ${}^1G = [(4.88/0.93) \times (4.88/3.98)]^{-0.5} = 0.3942$.
 对简单离子, 如 Mg^{2+} , $n_{\text{Mg}}^* = 2.89, Z_{\text{Mg}^{2+}} = 2, x_{\text{Mg}} = 1.31$, 则 ${}^0G = 2 \times [2.89 / (2^2 \times 1.31)]^{-0.5} = 2.69$.

由式(5)~(6)可以看出, ${}^0G, {}^1G$ 与元素的氧化数(离子的电荷数) Z_i , 电负性 x_i 正相关, 也与分子中原子个数或化学键数正相关, 而与原子的最外有效主量子数之和($n_i^* + n_j^*$)负相关.

2 拓扑指数 mG 对一些无机物的理化性质预测

2.1 mG 对碱金属卤化物晶格能 U_1 的预测

晶格能 U 是指 1 mol 离子化合物中的气态正负离子由相互远离的状态互相接近结合成离子晶体时所释放的能量, 通常取正值. 计算晶格能有理论公式和不少经验公式^[13], 但多数公式比较复杂, 计算结果也不甚精确. 本文将文献^[14]中 20 种碱金属卤化物的晶格能 U_1 与拓扑指数 ${}^0G, {}^1G$ 关联, 用最小二乘法处理, 拟合的回归方程为

$$U_1 = -52.25 + 1544.68 {}^0G^{0.5}, \quad (7)$$

$$N = 20, r = 0.9964(0.9801^{[8]}, 0.9841^{[9]}),$$

$$F = 2486, S = 9.4;$$

$$U_1 = 385.77 - 851.78 {}^0G^{0.5} + 2413.62 {}^1G^{0.5}, \quad (8)$$

$$N = 20, R = 0.9976(0.9818^{[8]}, 0.9906^{[9]}),$$

$$F = 1764, S = 6.8.$$

其中, N, r, R, F 和 S 分别为回归样品数、相关系数、复相关系数、Fischer 检验值和估计标准误差, 括号内的数值分别是文献^[8, 9]给出的相关系数和复相关系数. 由此可知, 本文计算的结果优于文献^[8, 9].

2.2 mG 对碱金属卤化物生成焓 $\Delta_f H_m$ 的预测

碱金属卤化物的生成焓 $\Delta_f H_m$ 是指 1 mol 气态碱金属卤化物离解为互相远离的气态碱金属离子和气态卤素离子所需要的能量(不同于离子键的键能). 将文献^[15]^[134-135]中的碱金属卤化物的 $\Delta_f H_m$ (kJ·mol⁻¹)与 ${}^0G, {}^1G$ 关联, 拟合的回归方程为

$$\Delta_f H_m = -103.68 + 1203.61 {}^0G^{0.5}, \quad (9)$$

$$N = 20, r = 0.9802, F = 441, S = 17.4;$$

$$\Delta_f H_m = 686.47 - 1536.01 {}^0G^{0.5} + 2770.04 {}^1G^{0.5}, \quad (10)$$

$$N = 20, R = 0.9873, F = 328, S = 13.1.$$

2.3 mG 对碱金属卤化物离子水化能 $\Delta_h G_m^\theta$ 的预测

这里的碱金属卤化物的离子水化能 $\Delta_h G_m^\theta$ 是指碱金属气态离子和卤素气态离子各 1 mol 溶于足够大量水中所产生的自由能变化. 将文献[16]中的碱金属卤化物的离子水化能 $\Delta_h G_m^\theta$ 与 ${}^0G, {}^1G$ 关联, 用最小二乘法处理的回归方程为

$$-\Delta_h G_m^\theta = -863.41 + 2.162.20 {}^1G^{0.25}, \quad (11)$$

$$N = 20, r = 0.9779, F = 394, S = 22.4;$$

$$-\Delta_h G_m^\theta = 641.71 - 3.014.32 {}^0G^{0.25} + 4.349.84 {}^1G^{0.25}, \quad (12)$$

$$N = 20, R = 0.9847, F = 271, S = 20.1.$$

2.4 mG 对气态碱金属卤化物核间距 R_0 的预测

本文将文献[15]¹³⁰⁻¹³¹中 20 种气态碱金属卤化物的核间距 R_0 的倒数 $1/R_0$ (nm^{-1}) 与拓扑指数 ${}^0G, {}^1G$ 关联, 用最小二乘法处理, 拟合的回归方程为

$$1/R_0 = 1.09 + 10.89 {}^1G, \quad (13)$$

表 1 碱金属卤化物的晶格能 U_1 、生成焓 $\Delta_f H_m$ 、离子水化能 $\Delta_h G_m^\theta$ 和核间距 R_0 与 ${}^0G, {}^1G$ 的相关性

Tab. 1 Correlativity between $U_1, \Delta_f H_m, \Delta_h G_m^\theta, R_0$ and ${}^0G, {}^1G$

化合物	0G	1G	$U_1/(\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1})$			$\Delta_f H_m/(\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1})$			$-\Delta_h G_m^\theta/(\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1})$			$(1/R_0)/(\text{nm}^{-1})$		
			exp.	式(7)	式(8)	exp.	式(9)	式(10)	exp.	式(11)	式(12)	exp.	式(13)	式(14)
LiF	1.496 2	0.496 2	1 049.0	1 035.8	1 044.1	755	744	759	942.3	951.3	958.7	6.46	6.49	6.49
NaF	1.339 6	0.394 2	927.7	917.6	915.3	632	652	648	837.5	852.0	845.5	5.43	5.38	5.40
KF	1.243 6	0.332 1	825.9	837.9	826.8	569	590	560	765.9	778.0	760.6	4.69	4.71	4.71
RbF	1.200 2	0.309 3	788.9	806.8	794.9	548	566	544	742.6	749.0	730.6	4.41	4.46	4.46
CsF	1.144 4	0.279 2	758.9	763.9	749.9	536	532	507	719.4	708.3	685.9	4.26	4.13	4.14
LiCl	1.252 8	0.360 6	862.0	875.3	881.8	628	619	631	820.1	812.1	823.4	4.95	5.02	5.02
NaCl	1.140 5	0.296 6	786.0	789.0	790.6	544	552	555	715.3	732.2	736.8	4.24	4.32	4.32
KCl	1.065 6	0.253 9	716.8	726.1	722.7	481	503	497	643.7	671.4	666.8	3.75	3.85	3.86
RbCl	1.033 5	0.238 8	687.9	702.6	699.3	460	484	478	620.5	648.1	643.2	3.58	3.69	3.69
CsCl	0.990 3	0.217 9	668.2	668.8	664.8	460	458	451	597.2	613.9	606.6	3.44	3.46	3.47
LiBr	1.162 1	0.313 1	818.6	812.1	818.1	603	570	581	791.4	754.0	765.8	4.60	4.50	4.50
NaBr	1.066 3	0.261 7	751.8	738.0	740.9	519	512	517	680.6	683.1	689.8	4.00	3.94	3.94
KBr	0.999 7	0.225 8	688.6	681.8	681.0	460	468	467	615.7	627.1	626.1	3.55	3.55	3.55
RbBr	0.971 9	0.213 4	661.0	661.3	661.0	441	452	452	591.5	606.2	605.2	3.39	3.41	3.42
CsBr	0.933 7	0.195 8	635.0	631.2	630.7	444	429	428	568.2	574.9	572.2	3.26	3.22	3.22
LiI	1.084 5	0.276 5	762.7	760.0	767.9	565	529	543	769.5	704.5	719.9	4.18	4.10	4.10
NaI	0.999 7	0.233 4	703.0	694.0	700.2	492	478	489	664.7	639.4	651.0	3.69	3.63	3.63
KI	0.938 8	0.202 3	646.9	642.5	646.0	435	438	444	593.1	586.7	591.8	3.28	3.29	3.29
RbI	0.914 1	0.191 8	625	624.2	628.4	416	423	431	569.8	567.5	572.9	3.14	3.18	3.18
CsI	0.879 4	0.176 6	602	596.9	601.3	414	402	410	546.6	538.2	542.5	3.01	3.01	3.01

注: $x_i(\text{Li})=0.98, x_i(\text{Na})=0.93, x_i(\text{K})=0.82, x_i(\text{Rb})=0.82, x_i(\text{Cs})=0.79, x_i(\text{F})=3.98, x_i(\text{Cl})=3.16, x_i(\text{Br})=2.96, x_i(\text{I})=2.66$

$$N = 20, r = 0.9970, F = 298.6, S = 0.06;$$

$$1/R_0 = 1.04 + 0.10 {}^0G + 10.68 {}^1G, \quad (14)$$

$$N = 20, r = 0.9970, F = 141.0, S = 0.03.$$

根据式(7)~(14)计算的结果一并列于表 1 中.

2.5 mG 对碱土金属卤化物晶格能 U_2 的预测

将文献[18]中的 20 种碱土金属卤化物晶格能 U_2 与 ${}^0G, {}^1G$ 关联, 拟合的回归方程为

$$U_2 = -203.44 + 2.349.84 {}^1G^{0.5}, \quad (15)$$

$$N = 20, r = 0.9879, F = 730, S = 67.4;$$

$$U_2 = -134.94 - 988.29 {}^0G + 4.334.54 {}^1G^{0.5}, \quad (16)$$

$$N = 20, R = 0.9918, F = 512, S = 55.5.$$

根据式(15)~(16)计算的结果列于表 2 中.

2.6 mG 对离子水合热 $\Delta_h H_m^\theta$ 的预测

离子水合热是 1 mol 气态离子溶于大量水中成为无限稀释溶液时所释放的热量. 通常文献中列出的是 298 K 和 1.01×10^5 Pa 下的数值, 以 $\Delta_h H_m^\theta$ 表示.

表 2 碱土金属卤化物的晶格能 U_2 与 ${}^0G, {}^1G$ 的相关性Tab. 2 Correlativity between U_2 and ${}^0G, {}^1G$

化合物	0G	1G	$U_2/(\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1})$			化合物	0G	1G	$U_2/(\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1})$		
			exp.	式(15)	式(16)				exp.	式(15)	式(16)
BeF ₂	3.256 1	2.512 3	3.476	3.521	3.517	BeBr ₂	2.549 7	1.585 1	2.896	2.755	2.802
MgF ₂	2.842 4	1.871 6	2.949	3.011	2.986	MgBr ₂	2.275 7	1.242 4	2.402	2.416	2.447
CaF ₂	2.568 2	1.466 9	2.617	2.642	2.577	CaBr ₂	2.071 3	0.997 4	2.134	2.143	2.147
SrF ₂	2.457 7	1.331 8	2.482	2.508	2.438	SrBr ₂	1.995 0	0.918 8	2.040	2.049	2.048
BaF ₂	2.332 1	1.185 6	2.330	2.355	2.280	BaBr ₂	1.906 4	0.831 3	1.942	1.939	1.933
BeCl ₂	2.743 8	1.825 7	2.994	2.972	3.010	BeI ₂	2.386 8	1.399 7	2.784	2.577	2.634
MgCl ₂	2.430 9	1.408 0	2.502	2.585	2.606	MgI ₂	2.138 2	1.107 8	2.293	2.270	2.314
CaCl ₂	2.206 3	1.121 5	2.231	2.285	2.275	CaI ₂	1.947 5	0.893 7	2.043	2.018	2.038
SrCl ₂	2.120 3	1.028 3	2.129	2.179	2.165	SrI ₂	1.878 0	0.825 8	1.940	1.932	1.948
BaCl ₂	2.021 1	0.925 2	2.024	2.057	2.037	BaI ₂	1.796 9	0.749 6	1.838	1.831	1.842

注: $x_i(\text{Be})=1.57, x_i(\text{Mg})=1.31, x_i(\text{Ca})=1.00, x_i(\text{Sr})=0.95, x_i(\text{Ba})=0.89$

离子水合热可用下述理论公式^[18]进行计算,

$$\Delta_h H_m^\theta = -\frac{N_A Z_i^2 \epsilon^2}{2r_i} \left[1 - \frac{1}{D} - \frac{T}{D^2} \left(\frac{\partial D}{\partial T} \right)_p \right], \quad (17)$$

其中, $N_A, Z_i, \epsilon, r_i, T$ 和 D 分别为 Avogadro 常数、离子的电荷数、电子的电量、离子晶体半径、绝对温标和溶剂的宏观介电常数。

用式(17)计算 $\Delta_h H_m^\theta$ 比较麻烦, 计算偏差也较大. 该式在理论上具有重要意义, 实际应用甚感不便. 本文经分析得知, $-\Delta_h H_m^\theta$ 与拓扑指数 ${}^0G, {}^1G$ 正相关, 因而试图用 mG 来预测离子水合热 $\Delta_h H_m^\theta$, 将文献[19]中的 51 种金属离子水合热 $\Delta_h H_m^\theta$ 与 0G 关联, 用最小二乘法进行回归分析, 得出的线性方程为

$$-\Delta_h H_m^\theta = -17.30 + 725.52 {}^0G, \quad (18)$$

$$N = 51, r = 0.9922, F = 3104, S = 203.6.$$

2.7 mG 对离子标准生成热 $\Delta_f H_m^\theta$ 的预测

离子标准生成热 $\Delta_f H_m^\theta$ 是指稳定的单质, 在标态下, 形成 1 mol 气态离子所需要的能量. 本文将文献[20]中所列出的 80 种正离子的标准生成热 $\Delta_f H_m^\theta$ 与 0G 关联, 拟合的线性方程为

$$\Delta_f H_m^\theta = -37.97 + 885.05 {}^0G, \quad (19)$$

$$N = 80, r = 0.9798, F = 1872, S = 1297.0.$$

将式(18)~(19)涉及的有关数据一并列于表 3 中.

3 结论

判断一个拓扑指数的优劣, 主要看它是否具有良好的结构选择性和相关性. 本文构建的拓扑指数 ${}^0G, {}^1G$, 其结构选择性基本上达到惟一性表征. 本文拟合的几个回归方程, 其相关系数和复相关系数

都大于 0.95, 属于优级 ($r \geq 0.99$) 或良级 ($0.99 > r \geq 0.95$) 标准^[21]. 特别是 ${}^0G, {}^1G$ 与碱金属卤化物晶格能 U_1 的相关系数和复相关系数分别高达 0.996 4 和 0.997 6, 相关程度高. 其估计标准误差为 9.4 和 6.8, 这是两个较小的数值, 说明实验值围绕回归直线的离散程度较小, 实验值与回归直线关系相当密切. 一般说来, 用于无机物理化性质的拓扑指数, 其选择性较高, 相关性较低. 相关系数大于 0.95, 就算较好. 可见, mG 是一种选择性和相关性均优的拓扑指数.

从拓扑指数 ${}^0G, {}^1G$ 的表达式可以看出, 元素的氧化数 Z_i 越大, 元素的电负性 x_i 值越大, 元素原子的最外有效主量子数之和 ($n_i^* + n_j^*$) 越小, 则 $Z_i^2 x_i / (n_i^* + n_j^*)$ 的值越大, 表示元素的结合力越大. ${}^0G, {}^1G$ 中的 “ \sum ” 取值越大, 则分子中原子个数或化学键数越多, 表征分子中原子之间作用次数或作用强度越大. 而 ${}^0G, {}^1G$ 表达式同时表征了原子结合力大小及它们的作用次数或作用强度. ${}^0G, {}^1G$ 值越大, 则碱金属卤化物的晶格能 U_1 、生成焓 $\Delta_f H_m^\theta$ 、离子水化能 $\Delta_h G_m^\theta$ 、碱土金属卤化物的晶格能 U_2 、金属离子水合热 $\Delta_h H_m^\theta$ 和离子标准生成热 $\Delta_f H_m^\theta$ 的绝对值越大, 碱土金属卤化物的核间距 R_0 越小. 故 ${}^0G, {}^1G$ 从原子、分子各个层次传递了无机物的结构信息, 这必然使 mG 与无机物的理化性质具有良好的相关性.

综上所述, 本文构建的拓扑指数 mG 是一种新的拓扑指数, 预测取得了较好的结果.

表 3 离子水合热 $\Delta_h H_m^\theta$ 、离子标准生成热 $\Delta_f H_m^\theta$ 与 0G 相关性Tab. 3 Correlativity between $\Delta_h H_m^\theta$, $\Delta_f H_m^\theta$ and 0G

No	M^{n+}	x_i	0G	$-\Delta_h H_m^\theta /$ (kJ · mol ⁻¹)	$\Delta_f H_m^\theta /$ (kJ · mol ⁻¹)	No	M^{n+}	x_i	0G	$-\Delta_h H_m^\theta /$ (kJ · mol ⁻¹)	$\Delta_f H_m^\theta /$ (kJ · mol ⁻¹)
1	Li ⁺	0.98	0.70	523.0	681.6	48	Cr ³⁺	1.66	6.24	4 623.3	5 628
2	Na ⁺	0.93	0.57	418.4	603.8	49	Mn ²⁺	1.55	2.68	1 861.9	2 509
3	K ⁺	0.82	0.49	334.7	508.4	50	Mn ³⁺	1.55	6.03	4 594.0	—
4	Rb ⁺	0.82	0.46	305.4	484.9	51	Mn ⁴⁺	1.55	10.72	—	10 777
5	Cs ⁺	0.79	0.42	280.3	454.0	52	Mn ⁷⁺	1.55	32.84	—	38 815
6	Fr ⁺	0.7	0.37	—	452	53	Fe ²⁺	1.83	2.91	1 958.1	2 736
7	Be ²⁺	1.57	3.55	—	2 980	54	Fe ³⁺	1.83	6.55	4 485.2	5 692
8	Mg ²⁺	1.31	2.69	1 966.5	2 334	55	Co ²⁺	1.88	2.95	2 079.4	2 832
9	Ca ²⁺	1.00	2.15	1 548.1	1 913	56	Co ³⁺	1.88	6.64	4 711.2	6 064
10	Sr ²⁺	0.95	1.99	1 426.7	1 777	57	Ni ²⁺	1.91	2.98	2 121.3	2 951
11	Ba ²⁺	0.89	1.81	1 313.8	1 645	58	Ni ³⁺	1.91	6.70	—	6 344
12	B ³⁺	2.04	9.11	—	7 456	59	Y ³⁺	1.22	5.07	—	4 323
13	Al ³⁺	1.61	6.72	—	5 467	60	Zr ⁴⁺	1.33	9.40	—	8 065
14	Ga ³⁺	1.81	6.52	4 703.8	5 799	61	Nb ⁵⁺	1.6	16.12	—	13 702
15	In ⁺	1.78	0.68	—	800.8	62	Mo ⁶⁺	2.16	26.96	—	22 467
16	In ³⁺	1.78	6.12	4 163.1	5 325	63	Ru ⁴⁺	2.2	12.09	—	10 259
17	Tl ⁺	2.04	0.68	334.7	771.5	64	Rh ²⁺	2.28	3.08	2 033.4	—
18	Tl ³⁺	2.04	6.16	4 117.1	5 617	65	Rh ³⁺	2.28	6.92	—	6 015
19	C ²⁺	2.55	4.53	—	4 155	66	Pd ²⁺	2.20	3.02	2 112.9	3 054
20	C ⁴⁺	2.55	18.11	—	14 560	67	Hf ⁴⁺	1.3	8.74	—	8 184
21	Si ²⁺	1.90	3.24	—	2 818	68	Ta ⁵⁺	1.5	14.66	—	12 640
22	Si ⁴⁺	1.90	12.97	—	10 408	69	W ⁶⁺	2.36	26.48	—	19 616
23	Ge ²⁺	2.01	3.05	—	2 672	70	Re ⁴⁺	1.9	10.56	—	9 260
24	Ge ⁴⁺	2.01	12.21	—	10 285	71	Os ²⁺	2.2	2.84	—	3 247
25	Sn ²⁺	1.96	2.85	1 564.8	2 422	72	Ir ²⁺	2.20	2.84	1 995.8	—
26	Sn ⁴⁺	1.96	11.42	7 644.2	9 292	73	Ir ⁴⁺	2.20	11.36	—	9 531
27	Pb ²⁺	2.33	2.92	1 502.1	2 360	74	Pt ²⁺	2.28	2.89	2 188.2	3 236
28	Pb ⁴⁺	2.33	11.70	—	9 523	75	Cu ⁺	1.90	0.74	581.6	1 083
29	N ³⁺	3.04	11.12	—	9 306	76	Cu ²⁺	1.90	2.97	2 121.3	3 100
30	N ⁵⁺	3.04	30.90	—	26 222	77	Ag ⁺	1.93	0.71	485.3	1 016
31	P ³⁺	2.19	7.83	—	6 156	78	Au ⁺	2.54	0.76	644.3	1 258
32	P ⁵⁺	2.19	21.76	—	17 382	79	Au ²⁺	2.54	3.05	—	3 237
33	As ³⁺	2.18	7.15	—	5 781	80	Zn ²⁺	1.65	2.77	2 058.5	2 770
34	As ⁵⁺	2.18	19.87	—	16 654	81	Cd ²⁺	1.69	2.65	1 828.4	2 610
35	Sb ³⁺	2.05	6.57	—	5 131	82	Hg ²⁺	2.00	2.71	1 845.1	2 877
36	Sb ⁵⁺	2.05	18.24	—	14 789	83	La ³⁺	1.10	4.52	3 368.1	3 905
37	Bi ³⁺	2.02	6.12	—	4 988	84	Ce ³⁺	1.12	4.56	3 426.7	—
38	Bi ⁵⁺	2.02	17.02	—	14 762	85	Ce ⁴⁺	1.12	8.11	6 451.7	—
39	Sc ²⁺	1.36	2.51	—	2 245	86	Pr ³⁺	1.13	4.58	3 451.8	—
40	Sc ³⁺	1.36	5.65	—	4 633	87	Nd ³⁺	1.14	4.60	3 468.6	—
41	Ti ²⁺	1.54	2.67	1 866.1	2 437	88	Gd ³⁺	1.20	4.72	3 606.6	—
42	Ti ³⁺	1.54	6.01	4 297.0	5 089	89	Dy ³⁺	1.22	4.76	3 623.3	—
43	Ti ⁴⁺	1.54	10.69	—	9 260	90	Ho ³⁺	1.23	4.78	3 661.0	—
44	V ²⁺	1.63	2.75	1 895.4	2 578	91	Er ³⁺	1.24	4.80	3 673.6	—
45	V ³⁺	1.63	6.19	4 405.8	5 046	92	Tm ³⁺	1.25	4.82	3 673.6	—
46	V ⁵⁺	1.63	17.18	—	16 309	93	Lu ³⁺	1.27	4.86	3 740.5	—
47	Cr ²⁺	1.66	2.77	1 924.6	2 641						

参考文献(References)

- [1] 许禄,胡昌玉. 应用化学图论[M]. 北京:科学出版社, 2000: 149-150.
- [2] Randic M. On characterization of molecular branching [J]. J. Am. Chem. Soc., 1975, 97: 6 609-6 615.
- [3] 辛厚文. 分子拓扑学[M]. 合肥:中国科学技术大学出版社, 1992: 41-43.
- [4] XIN Hou-wen, ZHANG Hong-guang. Bonding parameter topological index theory of critical temperature of superconductors[J]. Chin. J. Chem. Phys., 1990, 5: 22-29.
辛厚文,张宏光. 高温超导体临界温度的键参数拓扑指数理论[J]. 化学物理学报, 1990, 5: 22-29.
- [5] 李林峰,游效曾. 分子拓扑指数及其应用 I[J]. 科学通报, 1993, 5(25): 421-423.
- [6] YANG Feng, LUO Ming-dao. Studies on the relationship between structural parameter F and $\Delta_f H_m^\ominus$ of some gaseous compounds [J]. Chin. J. Chem. Phys., 1999, 12(6): 747-752.
杨锋, 罗明道. 结构参数 F 与部分气态化合物标准生成焓的相关性研究[J]. 化学物理学报, 1999, 12(6): 747-752.
- [7] 吴启勋, 祁正兴, 潘国庆, 等. 镧系元素的键参数拓扑指数及应用[J]. 化学通报, 1998, (4): 44-46.
- [8] FENG Chang-jun. A molecular connectivity index of valence energy level and its applications[J]. Chinese J. Inorg. Chem., 1999, 15(3): 363-370.
冯长君. 价电子能级连接性指数及其应用[J]. 无机化学学报, 1999, 15(3): 363-370.
- [9] FENG Chang-jun. The connection index of average energy level for valence electron and its applications [J]. Chin. J. Chem. Phys., 2000, 13(1): 66-70.
冯长君. 价电子平均能级连接性指数及其应用[J]. 化学物理学报, 2000, 13(1): 66-70.
- [10] FENG Chang-jun. Studies on the relationships between the quantitative structure and physic-chemical properties for the inorganic compounds [J]. J. Analytical Science, 2002, 18(1): 27-32.
冯长君. 无机物晶格能及其它理化性质的定量构效关系研究[J]. 分析科学学报, 2002, 18(1): 27-32.
- [11] 北京师范大学, 华中师范大学, 南京师范大学. 无机化学[M]. 3 版. 北京:高等教育出版社, 1992: 246-247.
- [12] Zhang Y H. Electronegativities of element in valence state and their applications [J]. J. Inorg. Chem., 1982, 21(11): 3 886-3 890.
- [13] 冯慈珍, 陈鉴, 杨宏孝, 等. 无机化学教学参考书[M]. 2 版. 北京:高等教育出版社, 1985.
- [14] 郑能武, 刘清亮, 刘双怀. 无机化学原理[M]. 合肥:中国科学技术大学出版社, 1988: 369-370.
- [15] 袁万钟, 隋亮. 无机化学教学笔谈[M]. 北京:高等教育出版社, 1991.
- [16] Johnson D A. 无机化学中一些热力学问题[M]. 杨德壬, 译. 上海:上海科学技术出版社, 1986: 148-149.
- [17] Aylward G H, Findlay T J. SI 化学数据表[M]. 周宁怀, 译. 北京:高等教育出版社, 1985: 106-107.
- [18] 黄子卿. 电解质溶液理论导论[M]. 北京:科学出版社, 1964: 32-33.
- [19] Basolo F, Pearson R G. Mechanisms of Inorganic Chemistry[M]. New York: Wiley, 1958: 66-68.
- [20] 蔡寿辉, 冯义. 气相离子生成焓及其应用[J]. 化学通报, 1985, (6): 40-44.
- [21] 徐光宪, 王祥云. 物质结构 [M]. 2 版. 北京:高等教育出版社, 1987: 276-277.