

烯烃顺反异构的拓扑方法研究

曹晨忠; 袁华

湖南科技大学化学化工学院, 湘潭 411201; 浙江大学药物信息研究所, 杭州 310027

摘要:

在烯烃的顺式与反式异构体中, 处于碳碳双键两端的顶点间的距离是不同的. 可根据几何原理计算与双键相连的顶点间的空间距离, 并以此构造分子图的修正距离矩阵来区分这种差异. 按照我们已报导的顶点度-距离指数(VDI)和边度-距离指数(EDI)的计算方法, 用修正距离矩阵(MD)代替距离矩阵(D), 得到修正的顶点度-距离指数(MVDI)和修正的边度-距离指数(MEDI). 这两个参数能较好地地区分烯烃顺反异构体的分子结构信息. 对烯烃顺反异构体的沸点($b.p.$)、折光率(n_D^{20})、密度(D_{20})及摩尔折光率(n_M)等物化性质进行定量相关, 得到模型方程的相关系数(R)分别为0.9981、0.9570、0.9884和0.9999. 同时, 交叉验证和随机抽样预测结果表明模型具有良好的稳定性和较强的预测能力.

关键词: 烯烃 顺反异构 拓扑指数 物化性质 QSPR

收稿日期 2004-08-12 修回日期 2004-11-07 网络版发布日期 2005-04-15

通讯作者: 曹晨忠 Email: czcao@hnust.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 李达刚, 夏春谷, 孙衍文, 杨薇曼. 烯烃氢甲酰化催化剂活性物种的原位 1H NMR研究[J]. 物理化学学报, 1996, 12(01): 71-74
2. 夏什文, 李树本, 尉迟力, 沈润南. Mycobacterium E3 休止细胞催化烯烃立体选择性环氧化[J]. 物理化学学报, 1996, 12(03): 218-223
3. 刘欣梅; 阎子峰; 王槐平. 多产低碳烯烃及柴油用分子筛的设计 [J]. 物理化学学报, 2001, 17(06): 547-551
4. 孟祥举; 肖丰收. 温和条件下新型铜基磷酸盐在氧化反应中的高催化活性[J]. 物理化学学报, 2004, 20(08S): 939-945
5. 陈开东; 颜其洁. 氧化铈对F-T反应铁钴催化剂的助催化作用[J]. 物理化学学报, 1996, 12(11): 990-994
6. 周志刚; 戴乾圆. 烯烃亲电加成反应机理的理论探讨[J]. 物理化学学报, 1999, 15(06): 500-505

扩展功能

本文信息

PDF(1652KB)

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

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 烯烃

▶ 顺反异构

▶ 拓扑指数

▶ 物化性质

▶ QSPR

本文作者相关文章

▶ 曹晨忠

▶ 袁华