

研究报告

胺类化合物Kováts指数的拓扑研究

冯长君, 堵锡华

徐州教育学院统计化学研究室!江苏徐州221006

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 一种新的连接性指数被定义为 $mQ = \sum (t_i \cdot t_j \cdot t_k \cdot \dots) - 0.5$, 其中的 $0Q, 3Q$ 与 2 种胺类化合物在 3 种固定相 (OV 10 1, OV 2 2 5 和 INGA) 下的 Kováts 指数 (I) 显著相关。它们的线性方程如下: $I_{OV 10 1} = 118.341 + 197.854 \times 0Q + 4.48773 \times 3Q, r = 0.9733$; $I_{OV 2 2 5} = 2.49218 + 1815.760 \times 3Q + 34.322 \times 1Q, r = 0.9746$; $I_{INGA} = 382.196 + 2.004277 \times 3Q + 318.416 \times 1Q, r = 0.9734$ 。这些模型较好地解释了胺类化合物 Kováts 指数的递变规律, 并用 Jackknife 方法对模型的稳健性进行了检验。

关键词 [连接性指数](#) [胺类化合物](#) [Kováts 指数](#) [分子结构与色谱保留定量相关性](#) [Jackknife 检验](#)

分类号

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(175KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [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“连接性指数”的相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章

- [冯长君](#)
- [堵锡华](#)

Abstract

Key words

DOI:

通讯作者