

研究论文

基于三维静电势参数研究C₆₀溶解性的构效关系

郭明; 邹建卫; 赵文娜; 商志才; 俞庆森

浙江大学化学系, 杭州 310027

摘要:

在量子化学从头算基础上,对一系列溶剂化合物分子进行了结构优化和三维静电势参数计算,运用多元线性回归分析和神经网络方法对C₆₀在121种不同溶剂的溶解性与计算的结构参数进行了构效关系研究.用建立起来的QSPR 关系式对15种不同结构类型溶剂进行了预测,并阐述了C₆₀溶质与不同溶剂之间的相互作用,获得了满意的结果.

关键词: 溶解性 C₆₀ 定量结构-性质关系(QSPR) 分子静电势 从头算

收稿日期 2002-09-25 修回日期 2002-12-09 网络版发布日期 2003-05-15

通讯作者: 邹建卫 Email: jwzou@css.zju.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 张诚, 徐宇, 徐意, 欧阳密, 马淳安. 螺二苄基可溶性共聚物的合成及发光性能[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0

扩展功能

本文信息

PDF(1467KB)

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

▶ 溶解性

▶ C₆₀

▶ 定量结构-性质关系(QSPR)

▶ 分子静电势

▶ 从头算

本文作者相关文章

▶ 郭明

▶ 邹建卫

▶ 赵文娜

▶ 商志才

▶ 俞庆森