


【作者】	陈强, 寇英卫, 潘峰
【单位】	兰州大学大气科学学院环境质量评价研究中心, 甘肃兰州
【卷号】	37
【发表年份】	2009
【发表刊期】	3
【发表页码】	1307 - 1310
【关键字】	拓展的边邻接指数; 定量构效关系; 多氯酚; 生物毒性
【摘要】	基于邻接矩阵与边价的概念, 拓展了边邻接指数的定义, 拓展的边邻接指数有很好的结构表达唯一性。应用多元线性回归分析了一类重要环境污染物质多氯酚的定量构效关系, 建立了11种多氯酚的生物毒性QSAR模型, 相关系数在0.903~0.975, 标准估算误差在0.112~0.285, 计算值与试验值吻合得较好。所建立的模型有很好的拟合和预测能力。
【附件】	 PDF下载 <input type="button" value="PDF阅读器下载"/>

关闭