

1003-7713/2005/02-211-7

环烷烃及烷烃的折光指数与结构的关系研究*

堵锡华^{a**}, 顾菊观^b

(a. 徐州教育学院化学系, 徐州 221006; b. 湖州师范学院理学院, 湖州 313000)

摘要: 以分子拓扑学点价和自相关函数研究为基础,设计开发出一种新的以点价计算为基础的结构信息自相关拓扑指数 tX .基于多元线性回归技术建立了对环烷烃及其烷烃的折光指数作出估算的定量结构-性质关系.点价被定义为 β_i ,由 β_i 建构结构信息自相关拓扑指数 tX .得到了它们与64种环烷烃的折光指数(n_D)的二元回归方程和与27种烷烃的折光指数的二元回归方程.对环烷烃和烷烃折光指数的计算结果表明,计算值与实验值的一致性令人满意,平均误差为0.25%.利用建立的模型,对另外5种烷烃的折光指数进行了预测.

关键词: 定量结构-性质相关性;点价;结构信息自相关拓扑指数;折光指数;环烷烃;烷烃

中图分类号: O657.7 文献标识码: A

Study on Structure-Refractive Index Relationship of Cycloalkanes and Alkanes*

Du Xihua^{a**}, Gu Juguan^b

(a Department of Chemistry, Xuzhou Education College, Xuzhou 221006;

b School of Sciences, Huzhou Normal College, Huzhou 313000)

Abstract A new structure information autocorrelation topological index tX is designed and developed based on the vertex degree of molecular topology and autocorrelation function of mathematics. Quantitative structure-property relationships for estimating the refractive index of cycloalkane and alkane are set up based on multiple linear regression. The vertex degree is defined as β_i . The structure information autocorrelation topological index tX is set up with the β_i . The refractive index (n_D), for the 64 cycloalkanes, are correlated with this topological indices. The index, for the 27 alkanes, are also correlated with this topological indices. The calculated results showed that the calculated refractive index of cycloalkanes and alkanes are in good agreement with the experimental data, with the mean relative deviation 0.25%. With the established model, the refractive index of the other 5 alkanes are predicted.

Keywords Quantitative structure-property relationships, Vertex degree, Structure information autocorrelation topological index, Refractive index, Cycloalkane, Alkane

1 引言

由于化合物内部分子结构特征及分子间的组合方式等结构信息决定了化合物所表现的性质,因此

通过对各种化合物的分子结构信息与性质关系的研究,获得具有性质预测能力的定量模型,成为许多学者研究的重点^[1-4].由于拓扑学方法具有其独特的优越性,故用拓扑指数进行定量结构与性质相关性

* Project supported by the Natural Science Foundation of Jiangsu Universities(02KJB150008) and by the Science and Technical Information Foundation of Xuzhou(200377)

** Corresponding author, Email: duxihua0715gy@mail.xzjy.cn Received 16 December 2003; in final form 11 April 2004.

(QSPR)研究,成为目前非常活跃的领域^[5-8],在已报道的拓扑指数中,最为常用的是 Kier 等人提出的分子连接性指数^[9],而对自相关拓扑指数的开发与应用研究则较少^[10].另外,利用拓扑指数来研究有机物折光指数也较为少见,王克强等人利用基团键贡献法来计算烷烃和环烷烃折光指数的研究取得了满意结果^[11].本工作对传统的自相关拓扑指数计算方法进行了适当改进,建构了一种新的自相关拓扑指数—结构信息自相关拓扑指数¹X,用于环烷烃与烷烃折光指数的相关性研究,用相关方程对另外部分烷烃分子的折光指数进行了预测,取得了令人满意的结果.

2 自相关拓扑指数¹X的建构原理

化合物的性能不仅与分子中原子的种类和数目有关,而且与原子的连接性有关,考察文献[11]所列环烷烃的折光指数与其结构的关系,考虑了环烷烃环的大小对折光指数的影响,而且其变化比较缓慢的特性,定义原子点价 β_i :

$$\beta_i = (n_i - 1) \left(\frac{\chi_i}{\chi_c} \right)^{0.5(n_i-1)} \times m_i - \left(\frac{m_c}{m_i} \right)^{0.5} \times h_i \quad (1)$$

式中, n_i 、 χ_i 、 m_i 分别为*i*原子的主量子数、Pauling电负性、价电子数; χ_c 为碳原子电负性; h_i 为与*i*原子直接连接的氢原子个数.该参数不仅适用于烃类化合物,还适用含杂原子的化合物.

将分子的隐氢图作为一拓扑空间,自相关拓扑指数可表示为:

$$F_{(t)} = \sum f_{(i)} f_{(j)} \quad (2)$$

式中,*i*、*j*为相距边(化学键)数为*t*(=0,1,2...)的两个非氢原子; $f_{(i)}$ 、 $f_{(j)}$ 为节点*i*、*j*的某种特征值或某种理化性质.这里以上述 β_i 为参数,建构自相关拓扑指数¹F定义式为:

$${}^1F = \sum (\beta_i \cdot \beta_j) \quad (3)$$

其中0阶指数⁰F、1阶指数¹F的计算公式为:

$${}^0F = \sum (\beta_i \cdot \beta_i) = \sum \beta_i^2 \quad (4)$$

$${}^1F = \sum (\beta_i \cdot \beta_j) \quad (5)$$

笔者将(3)式修正为:

$${}^1X = \left[\sum (\beta_i \cdot \beta_j)^{0.5} \right]^{-1.5} \quad (6)$$

将¹X仍称为(修正的)自相关拓扑指数,相应0阶指数⁰X、1阶指数¹X的计算公式为:

$${}^0X = \left[\sum (\beta_i \cdot \beta_i)^{0.5} \right]^{-1.5} = \left[\sum \beta_i \right]^{-1.5} \quad (7)$$

$${}^1X = \left[\sum (\beta_i \cdot \beta_j)^{0.5} \right]^{-1.5} \quad (8)$$

由于式(1)引入了原子结构因子,式(6)又保留了分子连接性性质,故将¹X称为(修正的)结构信息自相关拓扑指数.点价 β_i 与自相关拓扑指数¹F的物理意义主要体现为:①有较高的结构区分能力.每一种原子的主量子数、电负性、价电子数以及连接的氢原子个数都不尽相同,根据式(1)计算得到的点价 β_i 也就不同,另外分子中成键原子的种类与数目也不同,根据式(3)计算得到的自相关拓扑指数也就不同,其中¹X对有机分子的结构选择性较高.②蕴含丰富的结构信息.自相关拓扑指数¹X不但能反映分子大小,而且能反映分子的支化程度.碳原子数或杂原子数越多,体积越大,折光指数值越大,相应拓扑指数值越大;支化度越大,折光指数越小,相应¹X也就越小.

3¹X与环烷烃折光指数关系和预测

由于原子结构参数建构的结构信息自相关拓扑指数蕴含了分子结构信息因素,所以折光指数 n_D 成为¹X的函数成为必然.取文献[11]其中64种环烷烃的折光指数的实验值与⁰X进行关联,得到一元方程如下:

$$n_D = -2.8245 {}^0X + 1.4680 \quad (9)$$

$$n' = 64, \quad S = 0.0060, \quad r = 0.9649$$

式中, n' 为样本数; S 为估计标准误差; r 为相关系数(下同).为了能比较直观的分析自相关拓扑指数与折光指数的关系,相关方程用MATLAB进行编程得到相关的平面和立体图像.式(9)的折光指数 n_D 与指数⁰X的关系见图1.

将折光指数 n_D 与¹X进行关联,得到一元方程:

$$n_D = -3.0648 {}^1X + 1.4661 \quad (10)$$

$$n' = 64, \quad S = 0.0085, \quad r = 0.9296$$

式(10)的折光指数 n_D 与指数¹X的关系见图2.

如把折光指数 n_D 与指数⁰X和¹X同时用最小二乘法拟合,则得到二元回归方程为:

$$n_D = -6.3440 {}^0X + 4.0063 {}^1X + 1.4685 \quad (11)$$

$$n' = 64, \quad S = 0.0045, \quad r = 0.9807$$

式(11)的折光指数 n_D 与指数⁰X和¹X的关系见图3.根据式(11)得到的计算值(Cal.1)和实验值(Exp.1)列于表1中,两者基本吻合,平均相对误差仅为0.25%.计算值(Cal.1)与实验值(Exp.1)的关系见图(4),可以看出两者基本相符.

如果用 0F 、 1F 与 n_D 进行回归分析,则得到相关方程的相关系数为0.94,平均相对误差接近0.5%,而根据修正以后的式(6)一式(8)计算得到的 0X 和 1X 与 n_D 进行回归分析的相关系数大大提高,说明相关性更好,而且估算的平均相对误差降低近一倍,估算准确度得到了提高。

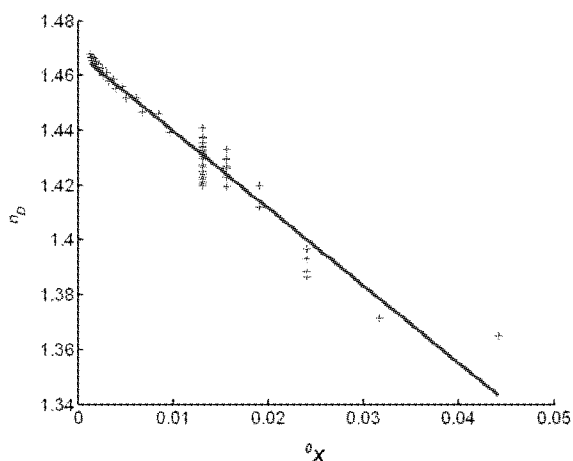


图1 拓扑指数 0X 与折光指数的关系
Fig.1 Relationship between the topological index 0X and the refractive index

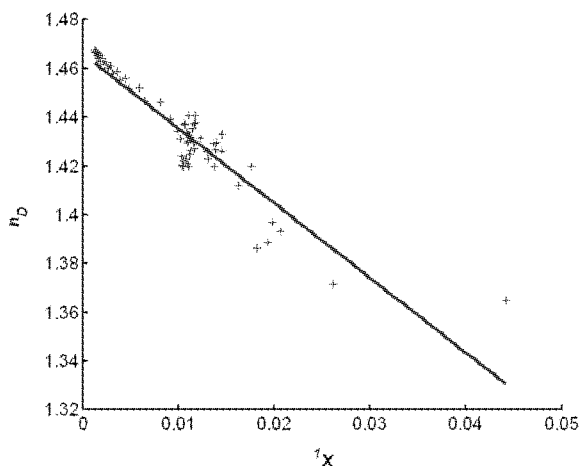


图2 拓扑指数 1X 与折光指数的关系
Fig.2 Relationship between the topological index 1X and the refractive index

4 1X 与烷烃折光指数关系和预测

为了检验本法应用的广泛性,用 0X 和 1X 对27种烷烃的折光指数实验值进行关联,得到二元回归方程为:

$$n_D = 22.3370 {}^0X^{1.5} - 35.2515 {}^1X^{1.5} + 1.4341 \quad (12)$$

$$n' = 27, \quad S = 0.0028, \quad r = 0.9600$$

根据式(12)得到的估算值(Cal. 2)与实验值(Exp. 2)基本吻合,将27种烷烃的 0X 和 1X 以及折光指数实验值、估算值列于表2中.并用式(12)对另外5种烷烃的折光指数进行预测,得到的预测值与实验值也基本接近,将其一并列入表2中,全部32个烷烃的相对平均误差也只有0.25%,说明本法预测效果较为可靠。

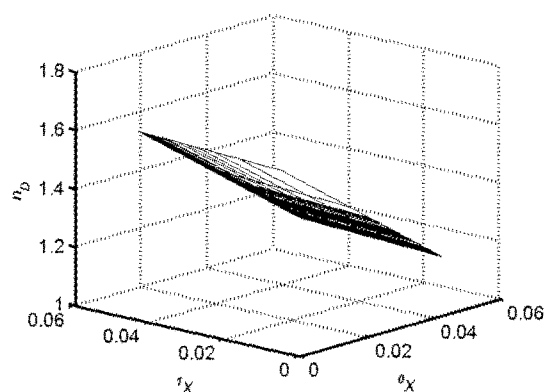


图3 拓扑指数 0X 、 1X 与折光指数的关系
Fig.3 Relationship between the topological index 0X , 1X and refractive index

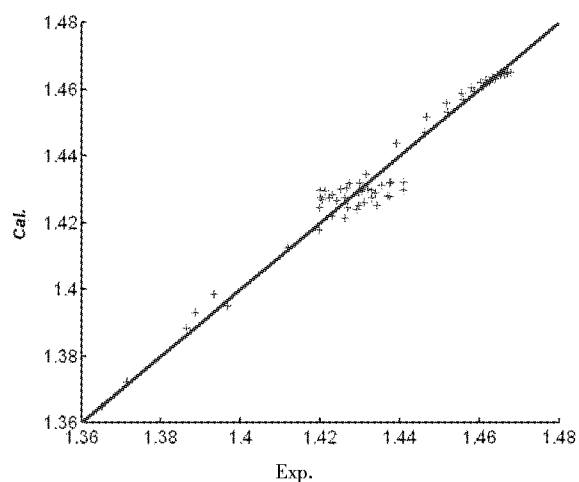


图4 折光指数实验值与计算值的关系
Fig.4 Relationship between the experimental refractive index and calculated ones

5 结果与讨论

由于原子点价 β_i 建构的 1X 既考虑了原子结构、化学键连接,又考虑了连接氢原子对其的影响,所以能较为全面客观地反映分子大小、支化度等信息,对环烷烃和烷烃分子具有良好的结构选择性,而

表1 环烷烃的 0X 和折光指数
Table 1 0X and refractive index of cycloalkanes

No.	Cycloalkane	0X	1X	n_D		Relative error/%
				Exp. 1	Cal. 1	
1	1- <i>trans</i> -2-Dimethylcyclopropane	0.0316	0.0261	1.3714	1.3725	0.08
2	Propylcyclopentane	0.0156	0.0146	1.4262	1.4277	0.11
3	Hexylcyclopentane	0.0097	0.0092	1.4392	1.4439	0.33
4	Nonylcyclopentane	0.0067	0.0065	1.4467	1.4517	0.35
5	Dodecylcyclopentane	0.0050	0.0049	1.4518	1.4560	0.29
6	Pentadecylcyclopentane	0.0040	0.0038	1.4554	1.4588	0.24
7	Octadecylcyclopentane	0.0032	0.0031	1.4581	1.4607	0.18
8	Heneicosylcyclopentane	0.0027	0.0026	1.4602	1.4620	0.12
9	Tetracosylcyclopentane	0.0023	0.0022	1.4618	1.4630	0.08
10	Heptacosylcyclopentane	0.0020	0.0019	1.4632	1.4638	0.04
11	Triacontylcyclopentane	0.0017	0.0017	1.4644	1.4644	0
12	Tritriacontylcyclopentane	0.0015	0.0015	1.4654	1.4649	-0.03
13	Hexatriacontylcyclopentane	0.0013	0.0013	1.4664	1.4653	-0.08
14	Ethylcyclopentane	0.0191	0.0176	1.4198	1.4180	-0.13
15	1- <i>trans</i> -2-Dimethylcyclopentane	0.0191	0.0163	1.4120	1.4126	0.04
16	1-Methyl- <i>cis</i> -2-Ethylcyclopentane	0.0156	0.0137	1.4293	1.4241	-0.36
17	1-Methyl- <i>trans</i> -3-Ethylcyclopentane	0.0156	0.0138	1.4197	1.4246	0.35
18	1- <i>cis</i> -2- <i>cis</i> -3-Trimethylcyclopentane	0.0156	0.0130	1.4262	1.4214	-0.34
19	1- <i>cis</i> -2- <i>cis</i> -4-Trimethylcyclopentane	0.0156	0.0131	1.4230	1.4219	-0.08
20	Butylcyclopentane	0.0131	0.0123	1.4316	1.4347	0.22
21	Tert-butylcyclopentane	0.0131	0.0109	1.4338	1.4290	-0.33
22	1-Methyl- <i>trans</i> -2-Propylcyclopentane	0.0131	0.0116	1.4274	1.4320	0.32
23	1- <i>trans</i> -2-Dimethylcyclohexane	0.0156	0.0138	1.4269	1.4247	-0.15
24	1-Methyl- <i>trans</i> -2-Ethylcyclohexane	0.0131	0.0116	1.4375	1.4320	-0.38
25	1- <i>cis</i> -2- <i>trans</i> -3-Trimethylcyclohexane	0.0131	0.0111	1.4410	1.4299	-0.77
26	1- <i>cis</i> -2- <i>trans</i> -4-Trimethylcyclohexane	0.0131	0.0112	1.4320	1.4302	-0.13
27	1-Methyl-1-Isopropylcyclopentane	0.0131	0.0107	1.4371	1.4283	-0.61
28	1-Methyl- <i>cis</i> -3-Isopropylcyclopentane	0.0131	0.0112	1.4250	1.4302	0.36
29	1- <i>cis</i> -2-Diethylcyclopentane	0.0131	0.0115	1.4354	1.4315	-0.27
30	1- <i>trans</i> -3-Diethylcyclopentane	0.0131	0.0116	1.4299	1.4319	0.14
31	1- <i>cis</i> -2-Dimethyl-1-Ethylcyclopentane	0.0131	0.0106	1.4374	1.4279	-0.66
32	1- <i>cis</i> -2-Dimethyl- <i>trans</i> -3-Ethylcyclopentane	0.0131	0.0110	1.4305	1.4295	-0.07
33	1- <i>cis</i> -2-Dimethyl- <i>cis</i> -4-Ethylcyclopentane	0.0131	0.0111	1.4328	1.4298	-0.21
34	1- <i>cis</i> -3-Dimethyl-1-Ethylcyclopentane	0.0131	0.0107	1.4229	1.4285	0.39
35	1- <i>cis</i> -3-Dimethyl- <i>trans</i> -2-Ethylcyclopentane	0.0131	0.0110	1.4211	1.4295	0.59
36	1- <i>cis</i> -3-Dimethyl- <i>trans</i> -4-Ethylcyclopentane	0.0131	0.0111	1.4199	1.4298	0.70
37	1,1,2,2,-Tetramethylcyclohexane	0.0131	0.0099	1.4342	1.4252	-0.63
38	1,1- <i>cis</i> -2- <i>cis</i> -4-Tetramethylcyclohexane	0.0131	0.0103	1.4241	1.4267	0.18

续表 1.

No.	Cycloalkane	0X	1X	n_D		Relative error/%
				Exp. 1	Cal. 1	
39	1,1- <i>cis</i> -3- <i>cis</i> -4- Tetramethylcyclohexane	0.0131	0.0104	1.4204	1.4270	0.46
40	1,2,2- <i>trans</i> -3- Tetramethylcyclohexane	0.0131	0.0102	1.4311	1.4262	-0.34
41	1- <i>cis</i> -2- <i>trans</i> -3- <i>cis</i> -4-Tetramethylcyclohexane	0.0131	0.0105	1.4223	1.4276	0.37
42	1- <i>trans</i> -2- <i>trans</i> -3- <i>cis</i> -4-Tetramethylcyclohexane	0.0131	0.0105	1.4199	1.4276	0.54
43	Ethylcyclohexane	0.0156	0.0146	1.4330	1.4277	-0.37
44	1-Methyl-1-Ethylcyclopentane	0.0241	0.0193	1.3887	1.3932	0.32
45	1,1,2-Trimethylcyclopentane	0.0241	0.0182	1.3864	1.3886	0.16
46	Cyclobutane	0.0442	0.0442	1.3651	1.3652	0.01
47	1,1-Dimethylcyclobutane	0.0241	0.0198	1.3967	1.3953	-0.10
48	1- <i>cis</i> -3-Dimethylcyclobutane	0.0241	0.0207	1.3932	1.3988	0.40
49	Hexylcyclohexane	0.0085	0.0081	1.4462	1.4471	0.06
50	Nonylcyclohexane	0.0061	0.0059	1.4520	1.4534	0.10
51	Dodecylcyclohexane	0.0046	0.0045	1.4559	1.4571	0.08
52	Pentadecylcyclohexane	0.0037	0.0036	1.4588	1.4595	0.05
53	Octadecylcyclohexane	0.0030	0.0029	1.4610	1.4612	0.01
54	Heneicosylcyclohexane	0.0025	0.0025	1.4627	1.4624	-0.02
55	Tetracosylcyclohexane	0.0022	0.0021	1.4641	1.4633	-0.05
56	Heptacosylcyclohexane	0.0019	0.0018	1.4653	1.4640	-0.09
57	Triacontylcyclohexane	0.0016	0.0016	1.4662	1.4646	-0.11
58	Tritriacontylcyclohexane	0.0015	0.0014	1.4670	1.4650	-0.14
59	Hexatriacontylcyclohexane	0.0013	0.0013	1.4678	1.4654	-0.16
60	1- <i>cis</i> -4- Dimethylcyclohexane	0.0156	0.0139	1.4297	1.4252	-0.31
61	Isopropylcyclohexane	0.0131	0.0117	1.4409	1.4324	-0.59
62	1-Methyl- <i>cis</i> -4- Ethylcyclohexane	0.0131	0.0117	1.4377	1.4323	-0.38
63	1,1,3-Trimethylcyclohexane	0.0131	0.0109	1.4296	1.4293	-0.02
64	1- <i>cis</i> -3- <i>cis</i> -5- Trimethylcyclohexane	0.0131	0.0113	1.4266	1.4306	0.28

且对分子的结构差异具有较强的区分能力. 有机物折光指数取决于分子间相互作用, 并随着分子量、分子的可接触表面积或分子中碳原子数的增加而升高, 相应得到的自相关拓扑指数值也越大; 对于环烷烃, 支化度越大, 其形状越似球体, 相应色散力越小, 折光指数越小, 相应 1X 越小, 两者正相关, 这与式 (11) 前的系数大于零一致; 对于烷烃, 支化度越大, 折光指数也越大, 相应 1X 越小, 两者负相关, 这也与式 (12) 中 1X 前的系数小于零一致. 所以环烷烃、烷烃的折光指数是一个与分子的大小和支化度密切相关的物理性质, 1X 正蕴含这些结构信息. 从图 1 和图 2 可以看出, 无论是 0X 还是 1X 与折光指数的

相关性均令人满意, 但 0X 对化合物的区分性相对差一点, 而 1X 对化合物的区分性较好一点, 这从图 1 中的点在横坐标成串而图 2 中的点则较为分散可以反应出来; 如采用二元线性相关, 则图 3 中可以看到是一平面, 而且点相对较为集中, 没有点脱离于平面之外而使离散性增大. 对 64 种环烷烃折光指数的计算结果表明, 无论是单环还是多环环烷烃, 计算值与实验值的一致性令人满意, 计算误差小于 0.50% 的有 56 种, 占总数 87.5%; 计算误差 0.51% ~ 1.00% 的有 8 种, 占总数 12.5%; 平均相对误差仅为 0.25%, 其中误差最大的 1-顺-2-反-3-三甲基环己烷分子, 这可能与它具有顺反结构的三个基团比较

表 2 烷烃的 $^0\chi$ 和折光指数
Table 2 $^0\chi$ and refractive index of alkanes

No.	Alkane	$^0\chi$	$^1\chi$	n_D		Relative error/%
				Exp. 2	Cal. 2	
1	2,4 -Dimethylpentane	0.0241	0.0246	1.3815	1.3817	0.01
2	2-Methyl-3-Ethylpentane	0.0191	0.0187	1.4040	1.4029	-0.08
3	2-Methyloctane	0.0156	0.0167	1.4031	1.4015	-0.11
4	2,4 -Dimethylheptane	0.0156	0.0157	1.4034	1.4083	0.35
5	2-Methyl-3-Ethylhexane	0.0156	0.0153	1.4120	1.4109	-0.08
6	2,3 -Dimethyl-3- Ethylpentane	0.0156	0.0138	1.4221	1.4205	-0.11
7	2-Methylnonane	0.0131	0.0139	1.4100	1.4098	-0.01
8	2,3 -Dimethyloctane	0.0131	0.0130	1.4149	1.4153	0.03
9	3,5 -Dimethyloctane	0.0131	0.0130	1.4139	1.4153	0.10
10	4-Methyl-4-Ethylheptane	0.0131	0.0123	1.4137	1.4195	0.41
11	3,4,4-Trimethylheptane	0.0131	0.0118	1.4235	1.4224	-0.08
12	2,3 -Dimethyl-3- Ethylhexane	0.0131	0.0117	1.4270	1.4230	-0.28
13	4-Methyldecane	0.0112	0.0116	1.4177	1.4165	-0.08
14	2,4 -Dimethylnonane	0.0112	0.0112	1.4158	1.4188	0.21
15	3,5 -Dimethylnonane	0.0112	0.0111	1.4192	1.4194	0.01
16	3-Methyl-4-Ethyloctane	0.0112	0.0109	1.4251	1.4205	-0.33
17	2,2,3-Trimethyloctane	0.0112	0.0103	1.4217	1.4237	0.14
18	2,3,5-Trimethyloctane	0.0112	0.0106	1.4207	1.4221	0.10
19	2,5,5-Trimethyloctane	0.0112	0.0104	1.4179	1.4232	0.37
20	2,4,5-Trimethyloctane	0.0112	0.0106	1.4270	1.4221	-0.34
21	4-Methyl-4-Propylheptane	0.0112	0.0106	1.4249	1.4221	-0.20
22	3,5-Diethylheptane	0.0112	0.0109	1.4247	1.4205	-0.30
23	2,3-Dimethyl-5-Ethylheptane	0.0112	0.0105	1.4237	1.4226	-0.07
24	2,6-Dimethyl-3-Ethylheptane	0.0112	0.0106	1.4206	1.4221	0.11
25	2,2,4,4 -Tetramethylheptane	0.0112	0.0098	1.4250	1.4264	0.10
26	2,3,3,5 -Tetramethylheptane	0.0112	0.0098	1.4246	1.4264	0.12
27	2,4,4,5 -Tetramethylheptane	0.0112	0.0098	1.4260	1.4264	0.03
*	3-Methyl-3,4 -Diethylhexane	0.0112	0.0099	1.4374	1.4259	-0.80
*	2,2,5-Trimethyl-4 -Ethylhexane	0.0112	0.0100	1.4192	1.4253	0.43
*	3,3,4-Trimethyl-4 -Ethylhexane	0.0112	0.0092	1.4443	1.4295	-1.03
*	2,3,3,4,4 -Pentamethylhexane	0.0112	0.0090	1.4431	1.4305	-0.87
*	2,2,4,4 -Tetramethyl-3-Ethylpentane	0.0112	0.0092	1.4371	1.4295	-0.53

接近相互影响较大从而导致折光指数出现较大异常有关. 但总体来看本法用来估算环烷烃折光指数较为可靠, 这从图 4 可以看出, 估算值与实验值的吻合度较好, 说明本法用来估算环烷烃的折光指数是切实可行的. 另外, 通过对 27 个烷烃分子的回归分析

也可以看出, 本法具有广泛适用性, 用所建模型来对别的分子进行预测, 能得到较为可靠的结果. 目前计算折光指数的方法主要是加和法^[10], 该方法的计算误差为 0.7% ~ 1.6%, 本法直接根据分子结构计算折光指数, 计算精度总体来说令人满意. 由此可见,

本法采用分子连接性法结合使用 MATLAB 编程使相关关系图像化能更直观的反应出各种关系,会有更好的应用前景.

参 考 文 献

- [1] Xin H W (辛厚文), Zhang H G (张宏光), *Chin. J. Chem. Phys.* (化学物理学报), 1990, **3**: 331
- [2] Roy K, Saha A. *Journal of Molecular Modeling*, 2003, **9**: 259
- [3] Dyekjaer J D, Jonsdottir S O. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2003, **42**: 4241
- [4] Xin H W (辛厚文). *Topology of Molecules (分子拓扑学)*, Hefei(合肥): University of Science and Technology of China Press (中国科学技术大学出版社), 1991. 1
- [5] Cheng A L, Merz K M. *Journal of Medicinal Chemistry*, 2003, **46**: 3572
- [6] Du X H (堵锡华). *Chin. J. Chem. Phys.* (化学物理学报), 2001, **14**: 308
- [7] Yang F (杨锋), Luo M D (罗明道), Qu S S (屈松生). *Chin. J. Chem. Phys.* (化学物理学报), 1999, **12**: 747
- [8] Feng C J (冯长君). *Chin. J. Chem. Phys.* (化学物理学报), 2001, **14**: 687
- [9] Kier L B, Hall H. *Molecular Connectivity in Chemistry and Drug Reserch*, New York: Academic Press, 1976.
- [10] Wang P (王鹏), Su J C (苏建成), Shan J J (单俊杰). *Chinese Chemistry (化学通报)*, 1998, (10): 40
- [11] Wang K Q (王克强), Sun X Z (孙献忠). *Chin. J. Org. Chem.* (有机化学), 2001, **21**: 144