

卤代苯沸点与分子结构的定量关系

张玉林

(西北农林科技大学 理学院, 陕西 杨凌 712100)

[摘 要] 用结构信息连接性指数 mL 研究了卤代苯的沸点与分子结构之间的定量关系。提出了计算有机分子中成键原子点价 δ_i^* 的新方法。基于 δ_i^* 和分子图的邻接矩阵,建构了一个新的结构信息连接性指数 mL ($m = 0, 1, 2$),并研究了 mL 指数与卤代苯沸点的相关性。结果表明, mL 指数与卤代苯的沸点具有良好的性质相关性,其相关性明显优于 ${}^mX^v$ 指数(Kier 指数)。以 mL ($m = 0, 1, 2$), $\lg {}^mL$ ($m = 0, 1, 2$)和相对分子质量 MW 为自变量的六元和七元回归方程的相关系数分别为 0.999 1 和 0.999 6,其对卤代苯沸点的预测结果非常令人满意。

[关键词] 结构信息连接性指数;卤代苯;沸点 (*b. p.*); 相关性

[中图分类号] O621. 21

[文献标识码] A

[文章编号] 1671-9387(2007)06-0227-05

Quantitative relationship between boiling points and molecular structure of halogeno-benzene compounds

ZHANG Yu-lin

(College of Sciences, Northwest A & F University, Yangling, Shaanxi 712100, China)

Abstract : Researches on the quantitative relationship between boiling points and molecular structure of halogeno-benzene compounds based on molecular structure information connectivity index mL are made. Based on the new atomic delta δ_i^* proposed in this paper, and the adjacency matrix of molecular topological graph, a novel molecular structure information connectivity index mL ($m = 0, 1, 2$) is constructed. Relativity between the topological indexes mL ($m = 0, 1, 2$) and boiling points of halogeno-benzene compounds is studied. The results show that for the boiling points of halogeno-benzene compounds the topological indexes mL ($m = 0, 1, 2$) have good structure-property correlativities and these correlativities are even better than those of the topological indexes ${}^mX^v$ (Kier's indexes). The correlation coefficients of the six and seven variable regression equations with mL ($m = 0, 1, 2$), $\lg {}^mL$ ($m = 0, 1, 2$) and MW (relative molecular weight) as independent variable are 0.999 1, 0.999 6, respectively. The predicted results are very satisfactory.

Key words : molecular structure information connectivity index; halogeno-benzene compound; boiling point (*b. p.*); correlativity

卤代苯是一类用途广泛的有机化合物,也是一类主要的有机污染物。研究卤代苯的理化性质与分子结构之间的定量关系,既具有重要的理论意义,又具有重大的实际意义。

近年来,随着计算机在化学中的广泛应用,用分

子拓扑指数研究物质的结构与性能之间的定量关系,已经引起化学工作者的广泛关注。在众多的分子拓扑指数中,由 Randic^[1] 首先提出、后来经 Kier 等^[2] 进一步发展的分子连接性指数应用非常广泛,也非常成功^[3-5]。很多学者^[6-13] 按照分子连接性指

† 收稿日期] 2006-04-26

[基金项目] 西北农林科技大学科研专项基金项目(08080240)

[作者简介] 张玉林(1943-),男,陕西岐山人,教授,主要从事有机化合物结构与性质间定量关系研究。

数的建构原理,建构了许多新的分子连接性指数,极大地扩展了分子连接性指数的应用范围。本研究根据分子拓扑学理论,建构了一个新的结构信息连接性指数 mL ($m=0,1,2$),并研究了 mL 指数与卤代苯沸点的定量关系,以期预测有机化合物的沸点提供一个有效的方法。

1 mL 的建构方法

有机物分子中成键原子的特征,主要由原子的结构和性质以及原子所处的化学环境等因素共同决定,本文在以往研究^[10,13-14]的基础上,经过对 37 种卤代苯沸点实验值^[15]的具体分析,提出了一个计算分子中成键原子点价 δ_i^* 的新方法,其公式是:

$$\delta_i^* = \frac{m_i(Z_i - h_i)w_i}{n_i^2},$$

$$w_i = \frac{V_i}{E_i} \cdot \left(\frac{X_{pi}}{X_{pc}} + 0.125 \frac{K_i}{n_i} \right) (n_i - 1)^{-0.5}。 \quad (1)$$

式中: m_i 、 Z_i 、 n_i 分别为 i 原子的成键电子数、价电子数和核外电子层数; h_i 为与 i 原子直接相连的氢原子数; w_i 为 i 原子的结构信息因子; V_i 、 E_i 分别为分子图中 i 原子的顶点度和边度; X_{pi} 、 X_{pc} 分别为 i 原子和碳原子的 Pauling 电负性标度; K_i 为 i 原子价电子层的孤电子对数。 i 原子的顶点度 V_i 是分子图中与 i 原子直接相连的顶点原子(非氢原子)的个数; i 原子的边度 E_i 是分子图中与 i 原子直接相连的化学键(包括 σ 键和 π 键)的数目。

在分子图邻接矩阵的基础上,由 δ_i^* 建构新的结构信息连接性指数 mL ,其一般计算公式为:

$${}^mL = \sum (\delta_i^* \cdot \delta_j^* \cdot \delta_k^* \dots)^{-0.5}。 \quad (2)$$

其 0 阶指数 0L , 1 阶指数 1L 和 2 阶指数 2L 的计算公式分别为:

$${}^0L = \sum (\delta_i^*)^{-0.5}, \quad (3)$$

$${}^1L = \sum (\delta_i^* \cdot \delta_j^*)^{-0.5}, \quad (4)$$

$${}^2L = \sum (\delta_i^* \cdot \delta_j^* \cdot \delta_k^*)^{-0.5}。 \quad (5)$$

式(3)中的“ $\sum$ ”是对分子中所有的顶点原子求和;式(4)中的“ $\sum$ ”是对分子中所有的化学键求和;式(5)中的“ $\sum$ ”则是对分子中所有相邻接的两条化学键求和。需要说明的是,用式(4)和式(5)计算时,无论是单键、双键还是三键,均应按一条化学键进行计算。由于原子点价 δ_i^* 包含了丰富的原子结构信息,因此将建立在 δ_i^* 基础上的 mL 指数称为结构信息连接性指数。

例如,氯苯的分子图如图 1 所示,图中数字 1 到 7 为顶点原子的随机编号。顶点原子 1 到 7 的顶点

度依次为 3, 2, 2, 2, 2, 2, 1, 边度依次为 4, 3, 3, 3, 3, 3, 1。按照式(1),氯苯分子中各顶点原子的点价 δ_i^* 依次为 $\sqrt{8}$, $\sqrt[3]{9}$, $\sqrt[3]{9}$, $\sqrt[3]{9}$, $\sqrt[3]{9}$, $\sqrt[3]{9}$, 0.726 0。按照式(3)~(5),氯苯的 0L , 1L 和 2L 分别为:

$${}^0L = (\sqrt{8})^{-0.5} + (\sqrt[3]{9})^{-0.5} \times 5 + (0.726\ 0)^{-0.5} = 5.235\ 0,$$

$${}^1L = (\sqrt{8} \times \sqrt[3]{9})^{-0.5} \times 2 + (\sqrt[3]{9} \times \sqrt[3]{9})^{-0.5} \times 4 + (\sqrt{8} \times 0.726\ 0)^{-0.5} = 3.445\ 4,$$

$${}^2L = (\sqrt{8} \times \sqrt[3]{9} \times \sqrt[3]{9})^{-0.5} \times 3 + (\sqrt[3]{9} \times \sqrt[3]{9} \times \sqrt[3]{9})^{-0.5} \times 3 + (\sqrt{8} \times \sqrt[3]{9} \times 0.726\ 0)^{-0.5} \times 2 = 2.825\ 3。$$

用式(1),式(3)~(5)计算了 37 种卤代苯的 0L , 1L , 2L , 计算结果列于表 1。由表 1 可见,卤代苯的 mL ($m=0,1,2$) 蕴含了分子中卤素原子的种类、数目以及卤素原子在苯环上的位置等分子结构信息,也就是说卤代苯的 mL ($m=0,1,2$) 指数可以用来表征卤代苯的分子结构。

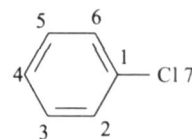


图 1 氯苯的分子图

Fig. 1 Molecular topological graph of chlorobenzene

2 mL ($m=0,1,2$) 与卤代苯沸点的定量关系

沸点是卤代苯主要的物理性质之一。卤代苯的沸点主要取决于其分子结构。而卤代苯的分子结构可以用 mL ($m=0,1,2$) 指数来表征。因此,卤代苯的 mL ($m=0,1,2$) 指数与其沸点之间必然存在着相关性。将表 1 中所列的 37 种卤代苯的 mL ($m=0,1,2$) 指数与其沸点的绝对温度值 $b. p. (^\circ\text{C}) / K^{[15]}$ 进行相关分析,得到线性回归方程如下:

$$b. p. / K = 211.812\ 0 + 35.614\ 2\ {}^0L, \quad (6)$$

$$n=37, R=0.975\ 9(0.965\ 0), s=12.56(15.07), F=698.76(474.05);$$

$$b. p. / K = 187.899\ 0 + 62.178\ 8\ {}^1L, \quad (7)$$

$$n=37, R=0.978\ 1(0.969\ 4), s=11.96(14.11), F=774.04(546.40);$$

$$b. p. / K = 271.809\ 8 + 46.072\ 7\ {}^2L, \quad (8)$$

$$n=37, R=0.967\ 9(0.962\ 4), s=14.44(15.62), F=519.48(439.13);$$

$$b. p. / K = 126.954\ 6 - 8.636\ 4\ {}^0L +$$

119.867 7¹*L* - 32.104 2²*L* ,
n = 37, *R* = 0.980 1(0.972 8) , *s* = 11.75(13.72) ,
F = 268.39(193.91) 。

得到四元线性回归方程为：
b. p. / K = 102.213 7 - 15.663 2⁰*L* + 138.180 3¹*L* -
6.621 1²*L* - 0.588 6*MW* ,
n = 37, *R* = 0.995 9(0.979 7) , *s* = 5.44(12.05) ,
F = 970.58(191.12) 。

(9)

(10)

相对分子质量 *MW* 是有机化合物一个重要的
结构参数。为了提高相关性,在式(9)中引入 *MW* ,

表 1 卤代苯类化合物的^{*m*}*L* (*m* = 0,1,2) 指数和沸点

Table 1 Topological index ^{<i>m</i>} <i>L</i> (<i>m</i> = 0,1,2) and boiling points of halogeno-benzene compounds										
编号 No.	化合物 Compound	⁰ <i>L</i>	¹ <i>L</i>	² <i>L</i>	<i>MW</i>	<i>b. p.</i> (实) <i>b. p.</i> (exp.) ^[15]	<i>b. p.</i> (计) / K		<i>b. p.</i> (cal.)	
							式(14) Eq. (14)	误差 Error	式(16) Eq. (16)	误差 Error
1	C ₆ H ₅ F	4.426 4	2.964 6	2.158 5	96.10	358.25	354.05	- 4.20	358.45	+ 0.20
2	1,2,3,4-C ₆ H ₂ F ₄	5.225 1	3.234 1	2.557 7	150.08	366.65	365.29	- 1.36	366.82	+ 0.17
3	1,2,4,5-C ₆ H ₂ F ₄	5.225 1	3.224 3	2.588 9	150.08	362.65	364.14	+ 1.49	363.55	+ 0.90
4	C ₆ H ₅ Cl	5.235 0	3.445 4	2.825 3	112.56	405.15	405.32	+ 0.17	404.66	- 0.49
5	1-F-2-Cl-C ₆ H ₄	5.501 3	3.535 2	2.907 0	130.55	410.75	407.18	- 3.57	408.31	- 2.44
6	1-F-3-Cl-C ₆ H ₄	5.501 3	3.525 5	2.990 6	130.55	400.75	404.65	+ 3.90	402.07	+ 1.32
7	1-F-4-Cl-C ₆ H ₄	5.501 3	3.525 5	2.983 8	130.55	403.15	404.78	+ 1.63	402.46	- 0.69
8	1,2-C ₆ H ₄ Cl ₂	6.309 9	4.016 0	3.526 3	147.00	453.65	452.53	- 1.12	453.86	+ 0.21
9	1,3-C ₆ H ₄ Cl ₂	6.309 9	4.006 3	3.657 3	147.00	446.15	448.60	+ 2.45	446.65	+ 0.50
10	1,4-C ₆ H ₄ Cl ₂	6.309 9	4.006 3	3.650 6	147.00	447.15	448.73	+ 1.58	446.92	- 0.23
11	1-Cl-2-Br-C ₆ H ₄	7.113 5	4.493 8	4.141 7	191.45	477.15	476.02	- 1.13	476.92	- 0.23
12	1-Cl-3-Br-C ₆ H ₄	7.113 5	4.484 1	4.319 9	191.45	469.15	470.80	+ 1.65	469.54	+ 0.39
13	1-Cl-4-Br-C ₆ H ₄	7.113 5	4.484 1	4.313 1	191.45	469.15	470.93	+ 1.78	469.73	+ 0.58
14	1-Cl-2-I-C ₆ H ₄	8.038 8	5.044 0	4.850 3	238.46	507.65	506.40	- 1.25	507.27	- 0.38
15	1-Cl-3-I-C ₆ H ₄	8.038 8	5.034 3	5.082 9	238.46	503.15	499.80	- 3.35	500.29	- 2.86
16	1-Cl-4-I-C ₆ H ₄	8.038 8	5.034 3	5.076 1	238.46	500.15	499.93	- 0.22	500.41	+ 0.26
17	1,2,3-C ₆ H ₃ Cl ₃	7.384 8	4.586 7	4.233 0	181.45	491.65	490.68	- 0.97	492.58	+ 0.93
18	1,2,4-C ₆ H ₃ Cl ₃	7.384 8	4.576 9	4.358 3	181.45	486.65	486.34	- 0.31	486.79	+ 0.14
19	1,3,5-C ₆ H ₃ Cl ₃	7.384 8	4.567 2	4.496 1	181.45	481.15	481.80	+ 0.65	480.94	- 0.21
20	1,2,3,4-C ₆ H ₂ Cl ₄	8.459 7	5.157 3	4.939 8	215.89	527.15	523.54	- 3.61	524.56	- 2.59
21	1,2,3,5-C ₆ H ₂ Cl ₄	8.459 7	5.147 6	5.071 8	215.89	519.15	518.71	- 0.44	519.51	+ 0.36
22	1,2,4,5-C ₆ H ₂ Cl ₄	8.459 7	5.147 6	5.066 0	215.89	517.65	518.82	+ 1.17	519.62	+ 1.97
23	C ₆ HCl ₅	9.534 5	5.728 0	5.653 3	250.34	550.15	553.04	+ 2.89	551.78	+ 1.63
24	C ₆ H ₅ Br	6.038 6	3.923 2	3.487 9	157.01	429.15	432.36	+ 3.21	430.10	+ 0.95
25	1,2-C ₆ H ₄ Br ₂	7.917 0	4.971 6	4.757 0	235.91	498.15	499.62	+ 1.47	500.29	+ 2.14
26	1,3-C ₆ H ₄ Br ₂	7.917 0	4.961 9	4.982 5	235.91	491.15	493.20	+ 2.05	493.23	+ 2.08
27	1,4-C ₆ H ₄ Br ₂	7.917 0	4.961 9	4.975 7	235.91	491.65	493.33	+ 1.68	493.36	+ 1.71
28	1-Cl-3-Cl-5-Br-C ₆ H ₃	8.188 4	5.045 0	5.158 7	225.90	505.15	501.70	- 3.45	502.19	- 2.96
29	1-Cl-3-Cl-2-Br-C ₆ H ₃	8.188 4	5.064 5	4.801 2	225.90	515.15	512.97	- 2.18	514.08	- 1.07
30	1-Cl-2-Cl-4-Br-C ₆ H ₃	8.188 4	5.054 7	5.020 9	225.90	510.15	506.57	- 3.58	507.16	- 2.99
31	1,2,4-C ₆ H ₃ Br ₃	9.795 5	6.010 3	6.251 7	314.80	548.15	550.98	+ 2.83	551.29	+ 3.14
32	1,3,5-C ₆ H ₃ Br ₃	9.795 5	6.000 6	6.483 9	314.80	544.15	543.89	- 0.26	546.81	+ 2.66
33	1,2,3,5-C ₆ H ₂ Br ₄	11.673 9	7.058 8	7.533 4	393.70	602.15	605.22	+ 3.07	600.57	- 1.58
34	C ₆ H ₅ I	6.963 9	4.473 4	4.250 8	204.01	461.45	465.18	+ 3.73	463.82	+ 2.37
35	1-F-2-I-C ₆ H ₄	7.230 2	4.563 2	4.231 0	222.00	461.75	461.11	- 0.64	460.58	- 1.17
36	1-F-4-I-C ₆ H ₄	7.230 2	4.553 5	4.409 4	222.00	456.15	455.83	- 0.32	453.39	- 2.76
37	1,3-C ₆ H ₄ I ₂	9.767 7	6.062 3	6.508 4	329.91	558.15	552.54	- 5.61	555.91	- 2.24

注:误差 = *b. p.* (计) - *b. p.* (实)
Note:Error = *b. p.* (cal.) - *b. p.* (exp.)

为了进一步提高相关性,更准确地预测卤代苯
类化合物的沸点,本文以^{*m*}*L* (*m* = 0,1,2) ,1*g^mL* (*m* =
0,1,2)和 *MW* 为自变量,建立的非线性回归方程如
下:
b. p. / K = - 3.659 0 + 23.702 8⁰*L* +
438.645 5*lg*⁰*L* - 0.359 2*MW* ,
n = 37, *R* = 0.992 1(0.980 7) , *s* = 7.43(11.59) ,
F = 688.17(276.05) ;
b. p. / K = 55.991 9 + 61.311 7¹*L* + 358.037 6*lg*¹*L* -
0.485 1*MW* ,
(11)
(12)

$$n = 37, R = 0.997\ 3(0.987\ 2), s = 4.31(9.43), \\ F = 2\ 066.49(422.16); \\ b.p./K = -429.704\ 1 - 210.048\ 7^0L + \\ 2\ 968.845\ 7\lg^0L + 494.812\ 2^1L - \\ 3\ 382.487\ 5\lg^1L - 0.774\ 6MW, \quad (13)$$

$$n = 37, R = 0.998\ 5(0.990\ 2), s = 3.34(8.54), \\ F = 2\ 070.74(310.65); \\ b.p./K = -522.456\ 9 - 235.717\ 3^0L + \\ 3\ 299.674\ 4\lg^0L + 563.775\ 6^1L - \\ 3\ 751.434\ 1\lg^1L - 18.337\ 5^2L - 0.760\ 8MW, \quad (14) \\ n = 37, R = 0.999\ 1(0.991\ 0), s = 2.70(8.30), \\ F = 2\ 636.67(274.57); \\ b.p./K = -54.291\ 4 - 5.317\ 1^0L + 36.456\ 6^1L + \\ 949.958\ 2\lg^1L + 10.948\ 3^2L - 282.997\ 4\lg^2L - \\ 0.459\ 1MW, \quad (15)$$

$$n = 37, R = 0.997\ 8(0.990\ 5), s = 4.11(8.56), \\ F = 1\ 134.72(258.06); \\ b.p./K = -815.512\ 1 - 276.528\ 9^0L + \\ 3\ 938.974\ 5\lg^0L + 536.715\ 1^1L - \\ 3\ 225.729\ 2\lg^1L + 38.089\ 0^2L - \\ 655.437\ 3\lg^2L - 0.818\ 9MW, \quad (16) \\ n = 37, R = 0.999\ 6(0.991\ 1), s = 1.89(8.43), \\ F = 4\ 622.37(228.35).$$

以上各回归方程中, n 为样本数, R 为相关系数, s 为标准偏差, F 为 F 检验值, 括号内数据则为用 ${}^mX^v$ ($m = 0, 1, 2$) 指数 (Kier 指数) 与卤代苯的沸点进行相应的回归所得到的结果。由上述各方程可以看出, mL ($m = 0, 1, 2$) 指数与卤代苯的沸点之间存在着良好的相关性, 而且 mL 指数与卤代苯沸点的相关性明显优于 ${}^mX^v$ 指数 (Kier 指数)。式(10) ~ (16) 7 个回归方程的相关系数都在 0.99 以上, 按通常衡量线性关联程度的标准, 均属优级相关; 特别是式(14), (16) 两个方程的相关系数分别为 0.999 1, 0.999 6, 其相关程度更高。用式(14), (16) 计算了 37 种卤代苯类化合物的沸点, 计算结果见表 1。由表 1 可见, 式(14), (16) 的计算值 $b.p.(\text{计})/K$ 与实验值 $b.p.(\text{实})/K$ 符合得相当好, 两个方程计算值的平均误差分别为 2.03 K 和 1.34 K, 表明用式(14), (16) 预测卤代苯类化合物的沸点可以获得非常令人满意的结果。

3 讨 论

式(1)中, n_i, Z_i, w_i 可以表征成键原子 i 的结构和性质; $m_i, V_i, E_i, Z_i - h_i$ 可以表征成键原子 i 的成

键状况; m_i 可以表征原子 i 的氧化状态; 对于 sp^3 杂化原子, $V_i = E_i, V_i/E_i = 1$, 对于 sp^2 杂化和 sp 杂化原子, $V_i < E_i, V_i/E_i < 1$, 因而, V_i/E_i 可以表征原子 i 的杂化状态。因此, 式(1)蕴含了十分丰富的原子结构信息, 由式(1)计算的 δ_i^* 不仅可以表征成键原子 i 的结构和性质, 而且可以表征成键原子 i 在分子中所处的化学环境。由此可见, 式(1)具有比较明确的物理意义, 由式(1)计算的 δ_i^* 实际上是一种表征分子中成键原子特征的结构参数。

${}^mX^v$ 指数 (Kier 指数) 中的原子点价 δ_i^* 既不能区分同一原子的不同氧化状态, 也不能区分同一原子的不同杂化状态^[9,11], 这极大地限制了 ${}^mX^v$ 指数 (Kier 指数) 的应用。同一种原子, 其氧化状态不同或者杂化状态不同, 成键状况也必然不同, 由式(1)计算的 δ_i^* 值也必然不同, 因此, δ_i^* 能够有效区分同一原子的不同氧化状态或者杂化状态。例如, 乙烯分子中碳原子与烷烃分子中仲碳原子的 δ_i^* 同为 2, 而它们的 δ_i^* 分别为 $\sqrt{2}$ (1.414 2) 和 2; 羰基氧原子与醚分子中氧原子的 δ_i^* 同为 6, 而它们的 δ_i^* 分别为 1.872 7 和 7.014 0。与 δ_i^* 相比较, δ_i^* 能更全面、更准确地反映分子中成键原子的特征。原子点价是连接性指数的核心概念, 因此, 在 δ_i^* 基础上建构的结构信息连接性指数 mL 必然是一种比较优良的分子拓扑指数, mL 指数与卤代苯沸点的相关性明显优于 ${}^mX^v$ 指数 (Kier 指数) 就说明了这一点。

式(13) ~ (16) 的回归结果表明, mL ($m = 0, 1, 2$) 和相对分子质量 MW 共同揭示了影响卤代苯沸点变化规律的本质因素, 其中, 1L 是影响卤代苯沸点的最主要的因素。

式(11), (12) 虽然都是三元回归方程, 但实际上独立的自变量只有 2 个; 式(13) 虽然是五元回归方程, 但实际上独立的自变量只有 3 个; 式(14) ~ (16) 虽然是六元或七元回归方程, 但实际上独立的自变量只有 4 个。结构参数 mL ($m = 0, 1, 2$) 和 MW 的求算相当容易, 尤其是 MW 非常容易得到。因此, 本研究方法具有结构参数较少、结构参数简便易得的特点。

本研究提供了一种预测卤代苯类化合物沸点的有效方法。

[参考文献]

- [1] Randic M. On characterization of molecular branching[J]. J Amer Chem Soc, 1975, 97(23): 6609-6615.
- [2] Kier L B, Hall L H. Molecular connectivity . specific treat-

- ment of heteroatoms [J]. J Pharm Sci, 1976, 65 (12): 1806-1809.
- [3] Seybold P G, May M, Bagal U A. Molecular structure-property relationships [J]. J Chem Educ, 1987, 64 (7): 575-581.
- [4] 许 禄. 化学计量学方法 [M]. 北京: 科学出版社, 1995: 309-311.
- [5] 王连生, 韩朔暎. 分子结构、性质与活性 [M]. 北京: 化学工业出版社, 1997: 340-347.
- [6] 冯长君, 沐来龙. 边价连接性指数及其应用 [J]. 化学通报, 2003, 66 (2): 125-133.
- [7] 蒋玉仁, 刘志国, 刘景亚, 等. 一个新的分子拓扑指数 [J]. 物理化学学报, 2003, 19 (3): 198-202.
- [8] 杨 锋, 王振东, 周培疆, 等. 分子连接性指数的新定义 [J]. 化学学报, 2003, 61 (4): 481-486.
- [9] 张玉林, 郭满才. 烷基苯标准生成焓与分子价连接性指数 $^m X^*$ 的关系 [J]. 化学通报, 2003, 66 (4): 281-286.
- [10] 张玉林, 高锦明, 郭满才. 分子连接性指数 $^m X^z$ 与不饱和链烃沸点的定量关系研究 [J]. 有机化学, 2003, 23 (9): 1039-1048.
- [11] 杨道武, 余训民. 新定义的价格连接性指数与有机物理化活性的相关性研究 [J]. 有机化学, 2004, 24 (5): 525-536.
- [12] 堵锡华. 结构信息连接性指数用于取代芳烃生物毒性与性质的研究 [J]. 化学通报, 2005, 68 (3): w032.
- [13] 张玉林. 一个新的分子连接性指数 ($^m Z^h$) 用于取代芳烃的定量构效关系研究 [J]. 西北农林科技大学学报: 自然科学版, 2006, 34 (8): 109-115.
- [14] 张玉林, 张 巍. 卤代苯的沸点与分子结构的定量关系 [J]. 有机化学, 2004, 24 (增刊): 303.
- [15] Weast R C. CRC handbook of chemistry and physics [M]. 63rd ed. Boca Raton Florida: CRC Press Inc. 1982-1983: c-130-c-141.

(上接第 226 页)

[参考文献]

- [1] 张兰桐, 袁志芳, 杜英峰, 等. 山茱萸的研究近况及开发前景 [J]. 中草药, 2004, 35 (8): 952-955.
- [2] 刘 洪, 许惠琴. 山茱萸及其主要成分的药理学研究进展 [J]. 南京中医药大学学报, 2003, 19 (4): 254-255.
- [3] 周京华, 李春生, 李电东. 山茱萸活性成分的研究进展 [J]. 中国新药杂志, 2001, 10 (11): 808-812.
- [4] 王勇亮. 山茱萸保健功能及其加工技术研究现状 [J]. 食品工程, 2006 (1): 10-13.
- [5] 呼世斌, 冯贵颖, 曹社会. 山茱萸的营养成分及保健作用 [J]. 西北农业大学学报, 1996, 24 (6): 108-110.
- [6] 胡青平, 徐建国, 朱志敏, 等. 山茱萸总皂甙的抑菌作用研究 [J]. 食品科学, 2006, 27 (10): 162-164.
- [7] 王 燕, 车振明. 食品防腐剂的研究进展 [J]. 食品研究与开发, 2005, 26 (5): 167-169.
- [8] Galal M, Bashir A K, Salih A M, et al. Activity of water extracts of *Albizia anthelmintica* and *A. lebbek* backs against experimental *Hymenolepis diminuta* infection in rats [J]. Journal of Ethnopharmacology, 1991, 33: 333-337.
- [9] 程丽娟, 薛泉宏. 微生物学实验技术 [M]. 西安: 世界图书出版公司, 2000.
- [10] 袁剑刚, 刘 昕, 汤展球. 橄榄的抑菌效应及其药效成分的初步研究 [J]. 食品科学, 2001, 22 (3): 82-84.
- [11] 卢成英, 徐东翔, 杜 勇, 等. 檫木叶抑菌活性成分提取分离与检测 [J]. 中成药, 2006, 28 (1): 132-134.
- [12] 刘 欣, 郝淑贤, 赵力超, 等. 葶苈英抑菌成分活性跟踪方法的研究 [J]. 食品科学, 2005, 26 (7): 78-81.
- [13] 高锦明. 植物化学 [M]. 北京: 科学技术出版社, 2004.