文章编号: 1007 - 4252(2021)03 - 0003 - 216

饱和链烷烃结构与沸点、热力学性质的 QSPR 研究

杨逸婷,宋露露,杨增霞,杨　林*
(青海师范大学 化学化工学院,西宁 810008)

摘要: 利用密度泛函理论(DFT)在 B3LYP/6-31g(d, p)水平下计算一系列饱和链烷烃的最优几何构型,获取空间坐标计算自定义的空间距离指数 $Y_{w'}$、Y_h、HF 能量,利用多元线性回归(MLR)和 BP 神经网络算法构建饱和链烷烃的空间距离指数 $Y_{w'}$、Y_h、HF 能量分别与沸点(Tb)、热力学性质[$-\Delta_f H^{\theta}_{298}(g)$]的 QSPR 模型,BP 算法的预测值与文献值相关性系数大于 0.99,MLR 方法的预测值与文献值相关性系数大于 0.9,预测结果准确性高,模型可靠,对饱和链烷烃的物化性质研究具有理论指导意义。

关键词: $Y_{w'}$; Y_h; 密度泛函理论; QSPR; 热力学性质
中图分类号: O641　　**文献标志码**: A

QSPR study between the space structure and boiling point, thermodynamic properties of saturated alkanes

YANG Yi-ting, SONG Lu-lu, YANG Zeng-xia, YANG Lin*
(School of Chemistry and Chemical Engineering, Qinghai Normal University, Qinghai 810008, China)

Abstract: Density functional theory (DFT) calculations employing the Becke - Lee - Yang - Parr (B3LYP) functional combined with a popletype 6-31g(d, p) basis set were performed on the saturated chain alkanes. Accessed to coordinate data to calculate the new defined spatial distance index $Y_{w'}$, Y_h and Hartree-Fock (HF). The multiple linear regression (MLR) methods and back propagation neural network (BP) are used to establish the quantitative structure property correlation (QSPR) model between the structure characteristic index $Y_{w'}$, Y_h, HF and boiling point (Tb) or thermodynamic properties [$-\Delta_f H^{\theta}_{298}(g)$] of saturated alkanes. The correlation coefficient between predicted value and literature value of BP method is greater than 0.99, the correlation coefficient between predicted value and literature value of MLR method is greater than 0.9, the accuracy of prediction result is high, the model is reliable, and the physicochemical property of saturated alkanes is good qualitative research has theoretical significance.

Key words: $Y_{w'}$; Y_h; DFT; QSPR; Thermodynamic properties

收稿日期: 2021-05-13;　　**修订日期**: 2021-06-15
基金项目: 青海省科技厅项目(2016-HZ-805).
作者简介: 杨逸婷(1997-),女,四川成都人,硕士研究生,主要研究方向为分析化学(E-mail: 1842389923@qq.com).
通信作者: 杨　林(1960-),男,青海西宁人,学士,教授,主要研究方向为分析化学(E-mail: yanglin@qhnu.edu.cn).

0　引言

饱和链烷烃结构简单,有文献报道可利用分子连接性指数研究其结构与沸点、热力学性质的关系[1-3]。分子连接性指数基于分子拓扑结构,分子空间距离指数基于化合物的空间结构特征,反映化合物空间结构的合理性以及氢原子影响的能力较强。例如: 利用原子距离指数、分子空间特征指数等为分子描述变量,建立描述变量与多氯代苯并噻吩的气相色谱保留时间的 QSPR 模型,具有良好的预测效果[4]。密度泛函理论(DFT) 被广泛应用于研究化合物的空间结构,并在优化构型的基础上进行量子化学方面的研究,探寻物质的构性关系[5,6]。标准生成热是测定反应焓和热力学稳定性分析所需的基本热物理性质,标准生成焓对于研究键能、共振能和化学键的性质具有重要意义,标准生成熵、标准吉布斯自由能等能够影响化合物的表观性质,因此对于化合物构性关系的研究对化工产品的开发和生产具有重要意义[7-11]。建立定量结构-性质相关(QSPR) 模型预测同类化合物的性质,具有理论指导实践的作用[12-19]。

本文利用密度泛函理论(DFT) 在 B3LYP/6-31g(d, p) 水平下优化了饱和链烷烃的几何构型,计算空间距离指数 $Y_{w'}$、Y_h、HF 能量; 应用多元线性回归(MLR) 和 BP 神经网络算法建立饱和链烷烃的空间距离指数 $Y_{w'}$、Y_h、HF 能量分别与沸点(Tb) 、热力学性质 $[-\Delta_f H^{\theta}_{298}(g)]$ 的 QSPR 模型,进行了预测值与文献值的相关性分析及模型检验,为饱和链烷烃的物化参数提供了基础数据。

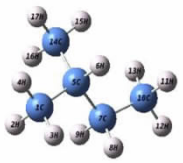
1　数据来源与指数计算

1.1　数据来源

利用 Gaussian 09 软件包进行 DFT 计算在 B3LYP/6-31g(d, p) 水平下优化一系列饱和链烷烃的几何构型,获取能量和坐标数据分别以各个原子为中心计算所有原子间的空间距离,以 2-甲基丁烷为例见图 1; 沸点和热力学数据来源于文献[21]。

1.2　指数计算

Y_w 是选定某个原子作为中心原子,计算所有原子到中心原子的距离之和的一半[20],$Y_{w'}$ 指数是在 Y_w 指数基础上对分子结构的进一步分析,通过获取饱和链烷烃最优构型的空间坐标,分别以各个原子为中心,计算原子间的空间距离得原子空间距离方阵,如图 1 所示,计算原子间距离之和的一半,即求方阵数据之和的一半得到的原子空间距离指数。Y_h 指数是选定 1 号碳原子为中心原子,计算所有原子与中心原子的距离之和得到。新定义指数 $Y_{w'}$ 和 Y_h 均为分子空间结构特征指数能更好的反映分子中各原子的空间分布。所有计算通过 MATLAB 自编程序完成。



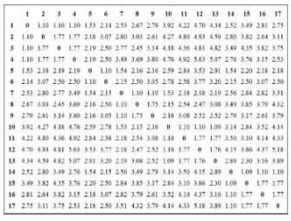


图 1　2M4A(2-甲基丁烷) 在 B3LYP/6-31g(d, p) 水平下的最优几何构型和原子空间距离矩阵

Fig. 1 The optimal geometric configuration and atomic space distance matrix of 2M4A (2-methylbutane) at the level of B3LYP/6-31g(d, p)

2　结果与讨论

2.1　结构特征指数与沸点、热力学性质的相关性分析

利用归一化法将结构特征指数 $Y_{w'}$、Y_h、HF、沸点及热力学数据化为 0-1 数量级,HF 能量与沸点、热力学性质呈现负相关,为便于直观的比较相关性,先将 HF 能量值全部取负数然后再进行归一化处理,将处理后的结构特征指数分别与沸点、热力学性质进行相关性分析,见图 2。由图可知 HF 能量与沸点、热力学性质的相关性最好,相关性系数分别为 0.9845 和 0.9420; $Y_{w'}$ 与沸点、热力学性质具有明显的数据差别,通过进行回归分析发现 $\ln(Y_{w'})$ 与沸点、热力学性质的相关性较好,相关性系数分别为 0.9795 和 0.9309; Y_h 的数据处理方法同上, $\ln(Y_h)$ 与沸点、热力学性质的相关性系数分别为 0.9139 和 0.8203。由以上分析结果可知所选择的结构特征指数与物化性质之间的相关性非常好,可用于建模。结构特征指数的选择和数据预处理对构建有效可靠的 QSPR 模型具有至关重要的作用。

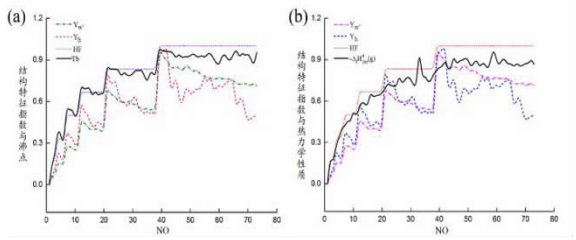


图 2 (a) 结构特征指数与沸点的相关性。(b) 结构特征指数与热力学性质的相关性

Fig. 2 (a) Correlation between structural characteristic index and boiling point. (b) Correlation between structural characteristic index and thermodynamic properties

2.2 构建结构特征指数分别与沸点、热力学性质的 QSPR 模型

根据结构特征指数与沸点、热力学性质间的数据关系，利用多元线性回归法建立以 $Y_{w'}$、Y_h、HF 能量为自变量，饱和链烷烃的沸点(Tp)、热力学数据[$-\Delta_f H^{\theta}_{298}(g)$](数据来源于文献[21])分别作为因变量的 QSPR 模型。结构特征指数与沸点(Tp)和热力学性质[$-\Delta_f H^{\theta}_{298}(g)$]的回归方程见表 1，对比发现饱和链烷烃沸点(Tp)的多元线性回归模型 F 检验值更高，而热力学数据[$-\Delta_f H^{\theta}_{298}(g)$]对应的与 HF 能量相关的一元线性回归模型 F 检验值更高，但多元线性回归的 R 值和 S 值更高，且 F 检验值也远高于对照表中 2.736。考虑到三个结构特征指数 $Y_{w'}$、Y_h、HF 是从三维空间特征、原子分布情况、能量等不同方面描述结构特征，较全面的描述了饱和链烷烃的空间结构，所以选用多元线性回归模型。

表 1 回归方程和相关参数

Table 1 Regression equation and related parameters

研究对象	方法	方程	R	S	F
Tb	一元线性回归	$y = 270.790 + 0.092Y_{w'}$	0.9490	12.9500	603.570
		$y = 252.259 + 1.453Y_h$	0.8700	20.3284	205.730
		$y = 161.337 - 0.706HF$	0.9850	7.1837	2109.952
	多元线性回归	$y = -88.858 + 62.436\ln Y_{w'} - 3.354\ln Y_h - 0.154HF$	0.9960	5.5733	3116.733
$-\Delta_f H^{\theta}_{298}(g)$	一元线性回归	$y = 132.821 + 0.069Y_{w'}$	0.9170	12.698	348.410
		$y = 125.124 + 1.013Y_h$	0.7860	19.6585	106.912
		$y = 47.661 - 0.538HF$	0.9720	7.4596	1134.859
	多元线性回归	$y = 26.744 + 16.585\ln Y_{w'} - 17.851\ln Y_h - 0.487HF$	0.9740	7.3778	387.875

采用 3 层 BP 神经网络，包括输入层、隐含层和输出层，网络结构见图 3，隐含层的节点数为 100。

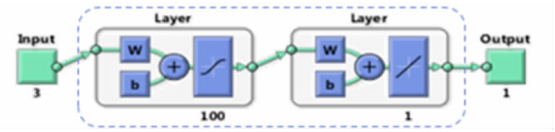


图 3 BP 神经网络结构

Fig. 3 Structure of BP neural network

以结构特征指数 $Y_{w'}$、Y_h、HF 为输入层，分别以沸点(Tb)和热力学性质[$-\Delta_f H^{\theta}_{298}(g)$]作为输出目标进行训练。训练精度设置为 0.0001，附加动量因子为 0.95，学习速率为 0.01，最大训练次数为 100。实际收敛步数均为 100 步，以沸点和热力学性质作为输出目标的均方误差的最佳训练结果分别为 1.2929×10^{-4}、3.2469×10^{-4}(图 4)，虽然最终的结果未达到要求的训练精度，但已非常接近，误差极小，相比训练精度为 0.001 时有更好的预测结果。

2.3 预测饱和链烷烃的沸点和热力学性质

分别利用多元线性回归方程和 BP 神经网络算法对沸点和热力学性质进行预测，其预测结果见表 2，并对预测结果进行相关性分析，见图 5，由图可知沸点、热力学性质的多元线性回归(MLR)与 BP 神经网络预测值与文献值的曲线重叠效果很好，说明预测值与文献值非常接近。沸点的 MLR、BP 的预

测值与文献值的相关性分别为 0.9960 和 0.9985，热力学性质的 MLR、BP 的预测值与文献值的相关性分别为 0.9740 和 0.9960。选取分子式为 C_9H_{20} 的 5 个同分异构体分子作为外部测试集其沸点相近但有一定差别，具有代表性。沸点的 MLR、BP 方法的 Q_{ext} 检验值分别为 0.9734、0.9987; 热力学性质的 MLR、BP 方法的 Q_{ext} 检验值分别为 0.9676、0.9971。预测结果的相关性及 Q_{ext} 检验的结果表明，模型可靠并具有稳定性。

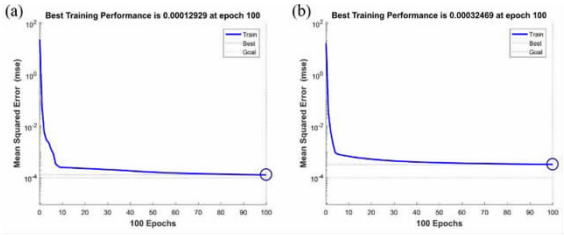


图 4　BP 训练过程(a) 以沸点作为输出目标。(b) 以热力学性质作为输出目标

Fig. 4 BP training process (a) with boiling point as the output target. (b) Taking thermodynamic properties as output targets

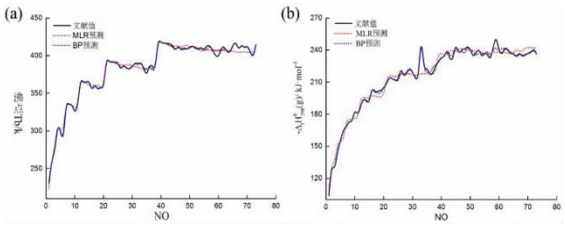


图 5　饱和链烷烃的沸点、热力学性质的预测值与文献值的相关性(a) 沸点的 MLR、BP 预测值与文献值的比较; (b) 热力学性质的 MLR、BP 预测值与文献值的比较

Fig. 5 Correlation between predicted values of boiling points and thermodynamic properties of saturated paraffins and literature values (a) Comparison of predicted values of MLR and BP of boiling points with literature values; (b) Comparison of MLR and BP predicted values of thermodynamic properties with literature values

表 1　　饱和链烷烃的结构特征指数及沸点(T_b) 、热力学性质 $-\Delta_f H^{\theta}_{298}(g)$ 的文献值和预测值

Table 1 The structural feature index, boiling point (T_b) , and thermodynamic properties of saturated paraffins. Literature values and predicted values

编号	结构编码	结构特征指数			Tb/K			$-\Delta_f H^{\theta}_{298}(g)$ /kJ·mol^{-1}		
		$Y_{w'}$	Y_h	HF	文献值	P_{MLR}	P_{BP}	文献值	P_{MLR}	P_{BP}
1	3A	130.59	20.85	−119.16	231.08	224.00	231.08	103.90	111.36	103.90
2	2M3A	236.99	30.18	−158.47	261.42	266.02	261.42	134.50	133.78	134.51
3	4A	241.72	31.86	−158.47	272.65	267.07	272.65	126.20	133.15	126.19
4	5A	426.48	51.40	−197.79	309.22	306.97	309.21	146.20	153.17	146.22
5	2M4A	393.52	43.71	−197.79	301.00	302.50	301.00	154.50	154.73	154.47
6	2M2M3A	375.27	39.44	−197.79	282.65	299.87	282.65	166.00	155.78	166.02
7	6A	645.36	69.21	−237.10	341.89	337.89	341.88	167.20	173.88	167.21
8	2M5A	618.45	60.46	−237.10	333.42	335.69	333.43	174.30	175.58	174.22
9	3M5A	605.82	62.36	−237.10	336.43	334.29	336.42	171.60	174.69	171.67
10	2M2M4A	568.05	52.90	−237.10	322.89	330.83	322.92	185.60	176.56	185.57
11	2M3M4A	579.86	54.25	−237.10	331.14	332.03	331.10	177.80	176.45	177.85
12	7A	991.17	96.94	−276.42	371.58	369.61	371.59	187.80	194.13	187.79
13	2M6A	918.40	81.41	−276.42	363.20	365.43	363.17	194.90	195.98	195.16
14	3M6A	898.08	83.24	−276.42	365.00	363.96	365.02	192.30	195.21	192.19
15	3E5A	837.00	75.07	−276.42	366.63	359.91	366.48	189.70	195.89	193.14
16	2M2M5A	841.52	69.53	−276.42	352.35	360.50	352.41	206.10	197.34	204.43

编号	结构编码	结构特征指数			Tb/K			$-\Delta_f H^{\theta}_{298}(g)$ /kJ·mol^{-1}		
		$Y_{w'}$	Y_h	HF	文献值	P_{MLR}	P_{BP}	文献值	P_{MLR}	P_{BP}
17	2M3M5A	840.45	71.15	−276.42	362.93	360.35	362.82	199.20	196.91	202.23
18	2M4M5A	853.09	75.15	−276.42	353.65	361.10	353.80	202.00	196.18	199.02
19	3M3M5A	817.62	73.38	−276.42	359.21	358.52	359.28	201.50	195.90	199.52
20	2M2M3M4A	791.81	63.56	−276.42	354.03	357.00	354.03	204.80	197.94	204.90
21	8A	1403.03	125.52	−315.74	398.82	396.49	398.82	208.40	214.43	208.42
22	2M7A	1309.33	105.78	−315.74	390.80	392.75	390.81	215.50	216.33	215.30
23	3M7A	1276.30	107.96	−315.74	392.08	391.09	392.05	212.60	215.55	213.14
24	4M7A	1266.73	111.18	−315.74	390.86	390.52	390.87	212.10	214.90	211.80
25	3E6A	1191.39	97.25	−315.73	391.68	387.14	391.93	210.90	216.26	209.79
26	2M2M6A	1197.61	90.46	−315.74	379.99	387.71	380.96	224.70	217.65	220.62
27	2M3M6A	1187.20	92.08	−315.73	388.76	387.10	387.87	213.90	217.18	216.38
28	2M4M6A	1186.82	87.10	−315.74	382.58	387.27	382.78	219.40	218.17	219.55
29	2M5M6A	1217.69	90.81	−315.74	382.25	388.73	381.92	222.60	217.85	224.45
30	3M3M6A	1158.26	94.32	−315.73	385.12	385.48	385.53	220.10	216.34	219.38
31	3M4M6A	1167.14	97.75	−315.73	390.88	385.84	390.61	213.00	215.83	213.89
32	2M3E5A	1131.79	84.28	−315.73	388.80	384.41	386.69	211.20	217.97	210.86
33	3M3E5A	1097.61	85.07	−315.73	391.41	382.47	392.05	256.80	217.29	254.07
34	2M2M3M5A	1100.03	80.20	−315.73	382.99	382.80	383.12	220.10	218.38	220.01
35	2M2M4M5A	1117.72	84.72	−315.73	372.39	383.62	379.92	224.10	217.67	219.87
36	2M3M3M5A	1073.69	80.11	−315.73	387.91	381.29	387.28	216.40	218.00	216.97
37	2M3M4M5A	1116.15	85.27	−315.73	386.62	383.51	380.64	217.40	217.53	224.79
38	2M2M3M3M4A	1046.40	74.30	−315.73	379.62	379.94	379.74	225.90	218.92	225.83
* 39	9A	1915.24	132.61	−355.05	423.95	421.79	423.96	229.00	237.75	229.01
40	2M8A	1799.58	134.26	−355.05	416.41	417.86	416.36	233.30	236.50	233.22
41	3M8A	1757.21	136.46	−355.05	417.33	416.32	417.39	233.30	235.81	233.42
42	4M8A	1734.67	139.60	−355.05	415.63	415.44	415.62	241.20	235.19	241.15
43	3E7A	1641.74	100.53	−355.05	416.15	413.10	413.66	230.50	240.14	234.73
44	4E7A	1620.46	104.38	−355.05	414.15	412.16	412.09	230.50	239.25	233.38
45	2M2M7A	1657.37	114.71	−355.05	405.84	413.25	405.88	246.80	237.94	246.74
46	2M3M7A	1633.52	96.01	−355.05	413.65	412.94	413.58	235.60	240.88	235.15
47	2M4M7A	1580.67	86.95	−355.05	406.65	411.22	406.65	240.50	242.10	240.54
48	2M5M7A	1645.51	101.54	−355.05	409.15	413.21	412.21	240.50	240.00	234.92
49	2M6M7A	1683.39	104.59	−355.05	408.36	414.53	408.14	243.40	239.85	244.14
50	3M3M7A	1593.38	97.61	−355.05	410.45	411.33	411.78	241.60	240.17	239.25
51	3M4M7A	1589.56	99.44	−355.05	413.75	411.12	412.08	232.80	239.80	239.30
52	3M5M7A	1604.02	103.51	−355.05	409.15	411.55	412.00	237.60	239.23	233.81
* 53	4M4M7A	1574.40	101.50	−355.05	408.35	410.45	407.62	241.60	239.27	238.17
54	2M3E6A	1527.06	105.93	−355.05	411.15	408.41	406.34	232.80	238.00	236.99
55	2M4E6A	1535.04	115.52	−355.04	406.95	408.44	407.18	237.60	236.54	235.60
56	3M3E6A	1500.30	106.00	−355.04	413.75	407.30	407.48	236.30	237.69	240.83

编号	结构编码	结构特征指数			Tb/K			$-\Delta_f H^{\theta}_{298}(g)$ /kJ·mol^{-1}		
		$Y_{w'}$	Y_h	HF	文献值	P_{MLR}	P_{BP}	文献值	P_{MLR}	P_{BP}
57	3M4E6A	1513.20	116.14	−355.04	413.55	407.53	413.35	229.90	236.21	231.07
* 58	2M2M3M6A	1473.98	99.42	−355.04	406.75	406.41	407.22	243.20	238.54	242.26
59	2M2M4M6A	1494.21	104.85	−355.05	399.69	407.08	406.46	254.00	237.83	241.65
60	2M2M5M6A	1515.16	106.07	−355.05	397.23	407.91	406.06	238.80	237.85	238.86
61	2M3M3M6A	1485.49	103.32	−355.04	410.83	406.76	407.66	235.10	237.99	242.34
* 62	2M3M4M6A	1494.93	107.45	−355.04	412.15	407.03	408.45	242.80	237.39	241.06
63	2M3M5M6A	1483.86	109.02	−355.04	404.49	406.52	407.21	240.80	237.01	239.97
64	2M4M4M6A	1494.23	110.77	−355.04	403.80	406.90	403.42	235.90	236.84	238.41
65	3M3M4M6A	1464.25	108.70	−355.04	413.61	405.69	413.22	237.20	236.84	236.46
* 66	3E3E5A	1421.41	84.44	−355.04	419.32	404.69	419.46	233.00	240.86	232.99
67	2M2M3E5A	1425.37	94.54	−355.04	406.98	404.48	406.59	238.20	238.89	236.44
68	2M3M3E5A	1419.41	95.89	−355.04	415.15	404.17	415.50	233.60	238.56	235.31
69	2M3E4M5A	1446.41	82.19	−355.04	409.88	405.87	409.63	235.10	241.63	236.21
70	2M2M3M3M5A	1391.92	75.30	−355.04	413.42	403.76	413.46	237.20	242.56	236.79
71	2M2M3M4M5A	1418.50	77.11	−355.04	406.17	404.86	406.02	237.00	242.44	238.39
72	2M2M4M4M5A	1429.50	79.44	−355.04	395.43	405.25	395.76	242.00	242.04	239.57
73	2M3M3M4M5A	1403.11	79.47	−355.03	414.70	404.08	414.55	236.20	241.72	236.72

注: M 表示甲基,E 表示乙基,A 表示烷烃; Tb、$-\Delta_f H^{\theta}_{298}(g)$ 为文献[21]中的实验值,P_{MLR}、P_{BP}分别为多元线性回归和 BP 神经网络算法的预测值; * 表示外部测试集。

3　结论

利用密度泛函理论计算了饱和链烷烃的最优构型,获取空间坐标和能量数据计算了系列结构特征指数 $Y_{w'}$、Y_h、HF,采用多元线性回归和 BP 神经网络算法建立了饱和链烷烃的空间距离指数与沸点、热力学性质的 QSPR 模型,BP 神经网络算法预测值与文献值的相关性均大于 0.99,两种方法的预测结果均相对误差小、相关性好、准确性高,模型具有优良的内部、外部预测能力和可靠性,为饱和链烷烃的物化性质提供了一种可参考的研究方法。

参考文献:

[1] Turaci M O. On vertex and edge eccentricity-based topological indices of a certain chemical graph that represents bidentate ligands [J]. Journal of Molecular Structure, 2020, 1207: 127766.

[2] Mozrzymas, A. On the head group effect on critical micelle concentration of cationic surfactants using molecular connectivity indices and atomic partial charges [J]. Journal of Solution Chemistry, 2019, 48(6): 875-890.

[3] Ali A, Du Z B, Shehzadi K. Estimating Some General Molecular Descriptors of Saturated Hydrocarbons [J]. Molecular Informatics, 2019, 38(11-12).

[4] 张文华, 赵继颖, 王琼瑶等. 多氯代苯并噻吩分子空间坐标指数与气相色谱保留时间的 QSPR 研究 [J]. 生态毒理学报, 2018, 13(03): 220-225.

[5] Fatogoma D, Mawa K, Kafoumba B, et al. Development of predictive QSPR model of the first reduction potential from a series of Tetracyanoquinodimethane (TCNQ) molecules by the DFT (density functional theory) method [J]. Computational Chemistry, 2019, 07(4): 121-142.

[6] Ruelas-Ávila M E, Cruz-Enriquez A, Campos-Gaxiola J J. et al. Crystal structure, hirshfeld surface, DFT calculations and photophysical properties of 2,4,5-tris(4-pyridyl) imidazole hydrogen chloride [J]. Journal of Molecular Structure, 2020, 1213: 128175.

[7] Mehdi B, Krishna Y, Khaled A M, et al. Molecular modeling of the standard state heat of formation [J]. Energy Conversion and Management, 2013, 65: 587-596.

[8] Hajibabaei M, Shafiei F, Abdoli-Senejani M. Quantitative modeling for prediction of thermodynamic properties of some pyridine derivatives using molecular descriptors and genetic algorithm-multiple linear regressions [J]. Journal of the

Chinese Chemical Society. 2019, 67(4): 514-538.
[9]周 俊, 堵锡华. 多溴代芴热力学性质的理论预测研究[J]. 分子科学学报, 2017, 33(06): 482-485.
[10] Dadfar E, Shafiei F. Prediction of some thermodynamic properties of sulfonamide drugs using genetic algorithm-multiple linear regressions [J]. Journal of the Chinese Chemical Society, 2019, 67(4): 492-513.
[11]堵锡华, 冯长君, 李 靖. 全氟化合物热力学性质的密度泛函理论研究[J]. 分子科学学报, 2015, 31(01): 1-5.
[12] Zhu T Y, Yan H T, Singh R P, et al. QSPR study on the polyacrylate-water partition coefficients of hydrophobic organic compounds [J]. Environmental Science and Pollution Research, 2020, 27(15): 17550-17560.
[13] Ser C T, Žuvela P, Wong M W. Prediction of corrosion inhibition efficiency of pyridines and quinolines on an iron surface using machine learning-powered quantitative structure-property relationships [J]. Applied Surface Science, 2020, 512: 145612.
[14] Withnall M, Lindelof E, Engkvist O, et al. Building attention and edge message passing neural networks for bioactivity and physical-chemical property prediction [J]. Journal of Cheminformatics, 2020, 12(1): 1.
[15] Liu S S, Jin L M, Yu H Y, et al. Understanding and predicting the diffusivity of organic chemicals for diffusive gradients in thin-films using a QSPR model [J]. Science of the Total Environment, 2020, 706: 135691.
[16] Ma Y X, Ma K, Wang H X, et al. QSPR modeling of azeotropic temperatures and compositions for binary azeotropes containing lower alcohols using a genetic function approximation [J]. Chinese Journal of Chemical Engineering, 2019, 27: 835-844.
[17] Chen K X, Shen Q Q, Shen S Y, et al. In-silico prediction of the sweetness of aspartame analogues from QSPR analysis [J]. Chinese Journal of Structural Chemistry, 2018, 37(11): 1689-1702.
[18] Furtula B, Das K C, Gutman I. Comparative analysis of symmetric division deg index as potentially useful molecular descriptor [J]. International Journal of Quantum Chemistry, 2018, 118(17): e25659.
[19] Khajeh A, Rasaei M R. Diffusion coefficient prediction of acids in water at infinite dilution by QSPR method [J]. Structural Chemistry, 2012, 23(2): 399-406.
[20]杨 娜, 杨 林. Wiener 指数空间上的新定义及其对有机酮理化性质的 QSPR 研究[J]. 西南大学学报, 2012, 34(7): 68-72.
[21]方 兴. 用拓扑指数 T 研究有机化合物定量构性关系[D]. 重庆: 重庆大学, 2005.