

研究简报

新型拓扑电负性指数模拟烃类物质闪点的标度

戴益民^{1,2,3}, 李 浔^{1,3}, 曹 忠^{1,3}, 杨道武^{1,3}, 黄可龙²

(¹ 长沙理工大学化学与生物工程学院, 湖南 长沙 410004; ² 中南大学化学化工学院, 湖南 长沙 410083;

³ 湖南省电力与交通材料保护重点实验室, 湖南 长沙 410004)

关键词: 烃类物质; 闪点; 拓扑电负性指数; 路径数; 定量结构-性质关系

中图分类号: O 651

文献标识码: A

文章编号: 0438-1157 (2009) 10-2420-06

**Modeling flash point scale of hydrocarbon by novel
topological electro-negativity indices**

DAI Yimin^{1,2,3}, LI Xun^{1,3}, CAO Zhong^{1,3}, YANG Daowu^{1,3}, HUANG Kelong²

(¹ School of Chemical and Biological Engineering, Changsha University of Science and Technology,

Changsha 410004, Hunan, China; ² School of Chemistry and Chemical Engineering, Central South

University, Changsha 410083, Hunan, China; ³ Hunan Province Key Laboratory of Materials Protection

Electric Power and Transportation, Changsha 410004, Hunan, China)

Abstract: Two novel topological electro-negativity indices based on distance matrix, named Y_C and W_C indices, were proposed to be used for modeling properties of multiple bond organic compounds by equilibrium electro-negativity of atom and relative bond length of molecule. A quantitative structural property relationship (QSPR) model for estimating flash point of 92 compounds was developed based on the newly introduced topological electro-negativity indices Y_C and W_C and path number parameter P_3 . The model correlation coefficient and standard error for training set in multiple linear regression were 0.9923 and 5.28, respectively. The average absolute error of flash point was only 3.86 K between experimental and calculated values, and the relative error was 1.46%. Furthermore, the model was strictly tested by both internal and external validations. The predicted values were in good agreement with experimental values for leave-one-out (LOO), and the training set and validation set. The results show that this QSPR model is of good stability and powerful prediction ability.

Key words: hydrocarbon; flash point; topological electro-negativity indices; path number; quantitative structure-property relationship

引 言

闪点是可燃液体在空气中或液面附近产生蒸气, 遇到明火或电火花时能被点燃的最低温度, 它

是衡量可燃液体火灾危险程度的重要物理量。通常蒸发速度越快, 闪点越低, 危险性越大, 因此闪点在石油化工的理论研究、安全生产以及储存运输等方面有着极其重要的应用。通常影响化合物蒸发速

2009-04-10 收到初稿, 2009-07-02 收到修改稿。

联系人及第一作者: 戴益民 (1974—), 男, 讲师。

基金项目: 国家自然科学基金项目 (20775010); 国家高技术研究发展计划项目 (2008AA05Z405, 2008AA100801); 湖南省自然科学基金项目 (09JJ3016); 湖南省科技攻关项目 (2008GK3063); 湖南省教育厅科学研究基金项目 (09C066)。

Received date: 2009-04-10.

Corresponding author: DAI Yimin, yimindai@163.com

Foundation item: supported by the National Natural Science Foundation of China (20775010), the High-tech Research and Development Program of China (2008AA05Z405, 2008AA100801) and the Natural Science Foundation of Hunan Province (09JJ3016).

度的因素很多，目前还无法准确测量，当前测量闪点的方法主要有开口杯法和闭口杯法两种^[1]。对于测量易挥发、易爆炸、有毒、有辐射的物质或尚未合成的物质，在进行实验之前就有必要对其闪点进行估算和预测，以确定发生火灾爆炸的可能性。

近年来，除了实验测量闪点外，理论上预测闪点的方法主要是定量结构-性质相关研究，基团贡献法和拓扑学方法^[2-7]是两种应用较广的方法。其中前者基团的划分比较简单和粗糙，同分异构体难以区分，同时难以考虑基团环境和基团在分子中位置的影响，预测精度不能令人满意。拓扑指数是基于图论衍生出的分子结构描述符，其中最为著名的有 Wiener 指数、Randic-Kier 指数等，这些指数由于计算简便、取值客观等优点而备受计算化学家的青睐，已在物质的 QSPR/QSAR 研究领域发挥了重要作用^[8-11]。遗憾的是，已报道的拓扑指数大多只能反映原子间连接顺序、方式以及可能的几种异构体，很难区分含杂原子、多重键的化合物，同时也很难反映化合物的局部化学微环境。鉴于此，本文在距离矩阵的基础上采用原子的平衡电负性和相对键长校正含有多重键的化合物提出了两个新颖的拓扑电负性指数 Y_C 、 W_C ，用其表征化合物的结构特征，结合极化数 P_3 对 92 种碳氢化合物的闪点进行了定量构效关系研究。

1 原理与方法

1.1 拓扑电负性指数的构建

分子隐氢图中每条边都是由化学键构成的，必然涉及成键原子的电负性，为了反映不同杂原子与碳原子的成键情况不同及同一元素不同的轨道成键能力也不一样的特点，采用原子平衡电负性和相对键长来表示成键能力。对于不同原子或同一原子在不同分子中所处化学环境不同的结构特征，对拓扑距离和分子隐氢图的各个顶点作如下修正：(1) 用相对键长度代替分子图中相邻两顶点间的拓扑距离。一个化学键的相对长度定义为该键长与碳碳单键键长的比值。具体方法是将在 C—C 键的键长看作 1，其他各相邻顶点间的距离则定义为相应键长与 C—C 键键长的比值。例如 C=C 键的相对键长为 $0.134/0.154=0.8701$ 。(2) 通常同一化学键在不同的化学环境中键长稍有变化，为此采用原子的平衡电负性^[12-13]对分子隐氢图的各个顶点进行着色，将相应顶点平衡电负性定义为电负性矩阵 ($\mathbf{X}$)。

另外考虑分子中每一原子的成键情况、原子之间的联结关系建立分子距离矩阵 ($\mathbf{D}$)、顶点距离加和矩阵 ($\mathbf{S}$)、顶点度矩阵 ($\mathbf{R}$)。

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} d_{11} & d_{12} & \cdots & d_{1n} \\ d_{21} & d_{22} & \cdots & d_{2n} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ d_{n1} & d_{n2} & \cdots & d_{nn} \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} s_1 \\ s_2 \\ \vdots \\ s_n \end{bmatrix}, \mathbf{R} = \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \vdots \\ r_n \end{bmatrix}, \mathbf{X} = \begin{bmatrix} \chi^1 \\ \chi^2 \\ \vdots \\ \chi_n \end{bmatrix}$$

其中， s 和 r 分别为该顶点到其他顶点的距离和以及支化度数，在矩阵 $\mathbf{S}$ 、 $\mathbf{R}$ 、 $\mathbf{X}$ 的基础上，提出新的拓扑电负性指数 Y_C 、 W_C

$$Y_C = \lg \sum_j^n (s_j r_j \chi_j) \quad (1)$$

$$W_C = \frac{1}{P_n^2} \sum_j^n s_j \quad (2)$$

为了定量研究烷烃的沸点，Wiener 提出 W 指数的同时在分子图的基础上引出了路径数 P_3 的概念，称为极化数，并指出 P_3 用以表征分子的形状^[14]，路径数是指两原子间间隔若干个化学单键即相距的边数， P_3 即长度为 3 的路径 (C—C—C—C) 的数目。

1.2 模型建立

应用多元线性回归方法，建立拓扑电负性指数 Y_C 、 W_C 及极化数 P_3 与碳氢化合物闪点相关的定量相关模型

$$FP = aY_C + bW_C + cP_3 + d \quad (3)$$

其中， a 、 b 、 c 和 d 为模型的回归系数。模型回归结果采用复相关系数 R 、均方根误差 RMS 和 Fisher 检验值 F 来衡量。

1.3 模型检验

一个好的 QSPR 模型除了具有良好的校正统计性与稳定性之外，还必须具有良好的外部预测能力。为了验证所建模型的外部预测能力，本文采用留一法交互验证及随机抽样验证相结合的方法对模型的稳定性及预测能力进行综合评价。

2 结果与讨论

为了检验所提出的拓扑电负性指数 Y_C 、 W_C 及极化数 P_3 ，选择了 92 个碳氢化合物闪点作为研究对象进行 QSPR 研究，这些化合物包括烷烃、烯烃、炔烃、二烯烃和芳香烃^[15]。表 1 中列出了所

采用的化合物的名称及相应的闪点实验值和计算得到的拓扑电负性指数 Y_C 、 W_C 及极化数 P_3 。根据统计原理,采用多元线性回归分析应辨别变量的多重相关性,为此本文采用方差膨胀因子^[16] (variance inflation factors, VIF) 来进行评价: $VIF=1/(1-R^2)$, R 为自变量中某一变量与余下

变量的相关系数。如 $VIF=1$, 表明各自变量间完全不相关; 当 $VIF_j \geq 10$ 时, 说明变量 j 与其他参数之间存在严重的共线性, 所建模型不能用于估算和预测。通过计算各自变量 Y_C 、 W_C 和 P_3 的 VIF 值依次为 7.32、5.48 和 3.62, 说明采用拓扑描述符 Y_C 、 W_C 及极化数 P_3 得到的模型自相关性较低。

表 1 训练集 72 种化合物与检验集 20 种化合物的实验数据和计算结果

Table 1 Experimental and calculated data of training set for 72 compounds and validation set for 20 compounds

No.	Compound	Y_C	W_C	P_3	Flash point/K	
					Exp.	Cal.
training set						
1	propane	1.3612	1.3333	0	169	173
2	butane	1.8093	1.6667	1	213	203
3	2,2-dimethylpropane	2.0794	1.6000	0	208	213
4	hexane	2.4046	2.3333	3	250	250
5	2,2-dimethylbutane	2.2784	1.8667	3	225	234
6	2,3-dimethylbutane	2.2986	1.9333	4	244	239
7	heptane	2.6234	2.6667	4	269	269
8	2,4-dimethylpentane	2.5406	2.2857	4	261	256
9	3-ethylpentane	2.5404	2.2857	6	255	262
10	2,2-dimethylpentane	2.5171	2.1905	4	250	255
11	2,2,4-trimethylpentane	2.6835	2.3571	5	261	268
12	3-methyl-3-ethylpentane	2.6662	2.2857	9	276	275
13	3-methylheptane	2.7585	2.7143	6	279	281
14	3,3-dimethylhexane	2.6916	2.3929	7	272	274
15	2,3-dimethylhexane	2.7149	2.5000	7	283	277
16	2,5-dimethylhexane	2.7448	2.6429	5	271	277
17	nonane	2.9744	3.3333	6	304	304
18	3,4-dimethylheptane	2.8699	2.7222	9	288	293
19	2,3-dimethylheptane	2.8911	2.8333	8	288	294
20	2,3-dimethyl-3-ethylpentane	2.8003	2.3889	12	288	290
21	3-methyloctane	2.9300	3.0556	7	297	298
22	2,2,3,4-tetramethylpentane	2.8008	2.3889	10	284	286
23	2,2-dimethylheptane	2.9015	2.8889	6	297	291
24	2,4-dimethylheptane	2.8910	2.8333	7	288	292
25	3,3,4-trimethylhexane	2.8128	2.4444	11	288	290
26	2,3,5-trimethylhexane	2.8594	2.6667	8	288	289
27	2,2,3-trimethylhexane	2.8369	2.5556	9	288	288
28	3,5-dimethylheptane	2.8806	2.7778	8	288	293
29	tetraethylmethane	2.8124	2.4444	12	294	292
30	4-ethyloctane	2.8906	2.8333	8	314	294
31	undecane	3.2504	4.0000	8	333	335
32	tetradecane	3.5784	5.0000	11	372	377
33	hexadecane	3.7586	5.6667	13	408	403
34	2-methylbutane	2.0794	1.8000	2	216	221
35	2-methylpentane	2.3554	2.1333	3	250	243
36	2,3,3-trimethylpentane	2.6486	2.2143	9	273	273
37	2,2-dimethylhexane	2.7228	2.5357	5	269	274
38	3-ethyl-2,2-dimethylpentane	2.8128	2.4444	10	286	287
39	2,4,4-trimethylhexane	2.8367	2.5556	8	288	286
40	4,4-dimethylheptane	2.8591	2.6667	8	288	289

Table 1 (continued)

No.	Compound	Y _C	W _C	P ₃	Flash point/K	
					Exp.	Cal.
41	2,3,3-trimethylhexane	2.8250	2.5000	10	288	289
42	3-methylpentane	2.3640	2.0667	4	241	245
43	2,3-dimethylpentane	2.5169	2.1905	6	258	259
44	2,2,3-trimethylbutane	2.4660	2.0000	6	247	253
45	octane	2.8107	3.0000	5	286	287
46	2,2,3,3-tetramethylbutane	2.6122	2.0714	9	273	268
47	2,3,4-trimethylpentane	2.6749	2.3214	8	273	274
48	3,4-dimethylhexane	2.6992	2.4286	8	277	277
49	tridecane	3.4780	4.6667	10	352	363
50	pentadecane	3.6715	5.3333	12	388	390
51	propene	1.3368	1.2467	0	165	170
52	1-pentene	2.1334	1.9480	2	222	227
53	1-hexene	2.3998	2.2900	3	247	249
54	2-methyl-1-butene	2.0713	1.7480	2	223	220
55	3-methyl-1-butene	2.0706	1.7480	2	216	220
56	3,3-dimethyl-1-butene	2.2718	1.8234	3	230	233
57	2-methyl-1-pentene	2.3501	2.0900	3	247	242
58	3-methyl-1-pentene	2.3311	2.0234	3	244	240
59	1-heptene	2.6203	2.6296	4	265	268
60	2-heptene	2.6159	2.6048	4	269	267
61	3-heptene	2.6133	2.5924	4	267	267
62	2,4-dimethyl-1-pentene	2.5372	2.2486	4	257	257
63	2,3-dimethyl-2-pentene	2.5048	2.1162	6	269	257
64	2-octene	2.8051	2.9443	5	294	286
65	1-decene	3.1187	3.6407	7	321	319
66	2-ethyl-1-butene	2.3318	2.0234	4	247	242
67	1-hexyne	2.3997	2.2597	3	252	248
68	2-methyl-1,3-butadiene	2.0625	1.6961	2	220	218
69	propylbenzene	2.9046	3.6511	8	320	311
70	4-isopropyl-1-methyl-benzene	3.0017	3.5224	11	320	320
71	1-octene	2.8086	2.9675	5	294	286
72	2-methyl-1,3-pentadiene	2.3384	3.0311	3	261	260
validation set						
1	pentane	2.1410	2.0000	2	224	228
2	3,3-dimethylpentane	2.4924	2.0952	6	254	256
3	2,2,3-trimethylpentane	2.6579	2.2500	8	270	272
4	3-ethylhexane	2.7296	2.5714	7	278	279
5	2,4-dimethylhexane	2.7226	2.5357	6	283	276
6	2,6-dimethylheptane	2.9210	3.0000	6	299	295
7	2,2,5-trimethylhexane	2.8706	2.7222	6	286	287
8	2,3,4-trimethylhexane	2.8366	2.5556	10	288	291
9	decane	3.1197	3.6667	7	319	319
10	dodecane	3.3692	4.3333	9	344	349
11	2-methylheptane	2.7790	2.8214	5	277	282
12	2-methylpropane	1.7431	1.5000	0	186	194
13	3-methylhexane	2.5626	2.3810	5	258	263
14	2,2,4,4-tetramethylpentane	2.8135	2.6667	6	276	283
15	2,2,4-trimethylhexane	2.8484	2.6111	7	288	286
16	1-butene	1.7964	1.6017	1	193	201
17	4-methyl-1-pentene	2.3495	2.0900	4	241	244
18	3-methyl-2-pentene	2.3252	1.9974	4	250	241
19	2,3-dimethyl-1-pentene	2.5132	2.1534	6	256	258
20	5- <i>tert</i> -butyl- <i>m</i> -xylene	3.1902	3.5446	15	345	338

将 92 个化合物随机抽取 20 个样本作为检验集, 余下样本为训练集 (见表 1), 以训练集建立模型, 然后预测检验集样本。利用多元线性回归 (MLR) 技术将 72 个碳氢化合物的分子结构描述符 Y_C 、 W_C 及 P_3 与闪点实验值建立回归模型, 并采用留一法 (LOO) 对该模型进行交互检验 (CV), 所得结果为

$$FP = (48.5367 \pm 4.6571) Y_C + (19.6266 \pm 1.7633) W_C + (2.2409 \pm 0.3743) P_3 + (80.3574 \pm 7.1707)$$

$$n = 72, R = 0.9923, \text{RMS} = 5.28,$$

$$F = 1456.89, R_{CV} = 0.9914 \quad (4)$$

由以上结果可知, 描述符 Y_C 、 W_C 及 P_3 与碳氢化合物闪点呈明显的线性相关, 具体表现为留一法检验得到的判定系数与回归方程的判定系数非常接近, 同时从图 1 中闪点实验值与预测值的比较可以看出所有样本都均匀分布于过原点 45° 直线周围, 大多数化合物闪点计算值与实验值基本吻合, 平均绝对误差为 3.86 K, 平均相对误差仅为 1.46%, 考虑到化合物比较复杂, 包括烷烃、烯烃、炔烃、二烯烃和芳香烃, 这样的结果是令人满意的。而在图 2 中绝大多数样本的误差分布在 ± 2 倍总体均方根误差以内, 仅少数几个样本为离群值, 其中 4-乙基辛烷的误差达到了 19.81, 明显超出了标准偏差的 2 倍, 从而导致总体估计误差偏大 ($\text{RMS} = 5.28$)。这可能由以下几种原因造成: ① 由于不同研究者测定闪点实验数据时存在一定的差别从而导致计算误差增大, 例如丁烷, 文献 [1] 的闪点值为 199 K, 文献 [15] 的闪点数据为 213 K, 式 (4) 的计算值为 203.1 K, 结果支持前者; ② 通常高闪点物质和低闪点物质分别采用开口杯法和闭口杯法测量, 对于 4-乙基辛烷难以严格区分闪点的高低使得实验方法不同导致计算误差增大; ③ 由于分子大小、支化程度、取代基的位置以及分支之间距离等因素都对闪点有着不同程度的影响, 而 4-乙基辛烷结构的特殊性使得多元线性回归方法没有充分反映分支之间距离的变化规律。将训练集关联得到的模型预测检验集中 20 个样本的闪点值, 得到预测值与实验值之间的复相关系数为 0.9938, 20 个样本的平均绝对误差为 4.24 K, 平均相对误差仅为 1.67% (图 1、图 2、表 1), 说明训练集模型同样具有良好的对外样本的预测能力。

Tropsha 等^[17]的研究表明一个合理的 QSPR 模型其预测能力与留一法交互验证的决定系数 R_{CV}^2

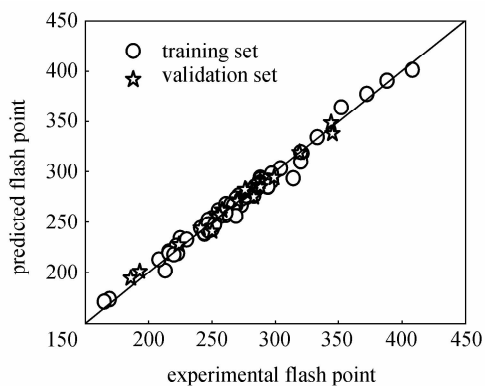


图 1 92 个烃类物质闪点计算值与预测值比较

Fig. 1 Experimental and predicted value of flash point for 92 hydrocarbons

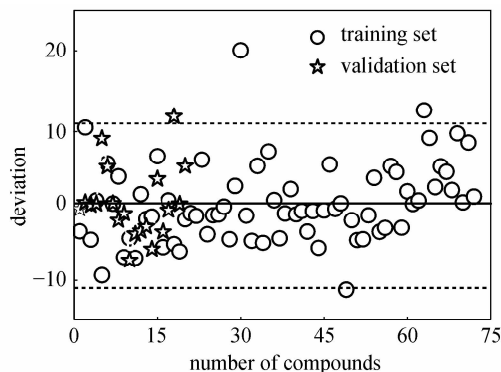


图 2 92 个烃类物质闪点计算结果偏差

Fig. 2 Deviations of flash point for 92 hydrocarbons

并没有明显相关, 其评价只能通过外部样本集来进行, 并且必须具备以下 3 个统计条件: ① 训练集决定系数 $Q^2 > 0.5$ 同时检验集决定系数 $R^2 > 0.6$; ② 对于检验集, 决定系数 R_0^2 (预测值与实验值) 和决定系数 $R_0'^2$ (实验值与预测值) 与检验集决定系数 R^2 相近, 即 $(R^2 - R_0^2) / R^2 < 0.1$ 或 $(R^2 - R_0'^2) / R^2 < 0.1$; ③ 检验集通过原点的回归线的斜率 k 和 k' 在 0.85 和 1.15 之间 ($0.85 \leq k \leq 1.15$ 或 $0.85 \leq k' \leq 1.15$)。从图 1 可知, 训练集决定系数达 0.9847, 并且将 20 个检验集进行回归分析可知其削减误差比例为 0.9895, 同时对检验集预测值与实验值作图分析得到回归线的斜率 k 和 k' 分别为 1.0460、0.9442, 所得结果均能满足以上条件。因此, 可以得出结论: 由分子结构描述符 Y_C 、 W_C 及 P_3 与碳氢化合物闪点建立的 QSPR 模型是可靠的, 可以对未知化合物的闪点进行精确预测。

Pan 等^[7]建立了一个基于误差反向传播神经网络方法的基团贡献模型用于预测 92 种烷烃闪点,

基于神经网络与多元线性回归得到闪点预测值与实验值的平均绝对误差分别为 4.8 K 和 6.1 K。Katritzky 等^[18]以 271 个有机化合物的闪点为样本, 建立了三参数模型, 相关系数 $R=0.924$, 标准偏差大于 14 K, 且其沸点的实验数据作为主要模型参数。而利用 CODESSA PRO 软件包提取几何参数、拓扑参数、量子参数以及电性参数建立的 758 个样本的理论模型, 相关系数 $R=0.921$, 标准偏差接近 19 K, 平均绝对误差达 13.9 K^[19]。本文样本数包括烷烃、烯烃、炔烃、二烯烃和芳香烃等大量极性和非极性化合物, 从分子结构出发提取 3 个分子拓扑描述符建立碳氢化合物闪点的统一模型, 方法计算简单, 不需计算软件, 模型参数不含实验数据, 结果准确度高, 具有很好的实用性。

3 结 论

(1) 采用原子的平衡电负性和相对键长校正含有多重键的化合物提出新的分子拓扑电负性指数 Y_C 、 W_C , 结合分子极化数 P_3 计算了烷烃、烯烃、炔烃、二烯烃和芳烃等有机分子的 3 个结构描述符, 与实验测定的闪点进行 QSPR 研究, 模型的相关能力良好。

(2) 采用留一法 (LOO) 交互验证及随机抽样验证相结合的方法对模型的预测能力进行综合评价, 结果表明建立的 QSPR 模型具有良好的稳定性和预测能力。

(3) 对 72 个训练集样本和 20 个检验集样本的平均相对误差分别仅为 1.46% 和 1.67%, 完全在实验范围之内。因此, 利用该方法预测有机物的闪点是可行的, 这有助于今后利用该方法对有机物的危险特性进行预测和评价。

References

- [1] Lyman W J, Reehl W F, Rosenblatt D H. Handbook of Chemical Property Estimation Methods. New York: McGraw-Hill, 1982
- [2] Suzuki T, Ohtaguchi K, Koide K. A method for estimating flash points of organic compounds from molecular structures. *J. Chem. Eng. Jpn.*, 1991, **24**: 258-261
- [3] Albahri T A. Flammability characteristics of pure hydrocarbons. *Chem. Eng. Sci.*, 2003, **58**: 3629-3641
- [4] Vazhev V V, Aldabergenov M K, Vazheva N V. Estimation of flash points and molecular masses of alkanes from their IR spectra. *Petrol. Chem.*, 2006, **46**: 136-139
- [5] Liaw H J, Chiu Y Y. A general model for predicting the flash point of miscible mixtures. *J. Hazard. Mater.*, 2006, **137**: 38-46
- [6] Pan Yong (潘勇), Jiang Juncheng (蒋军成), Wang Zhirong (王志荣). Prediction of the flash points of alkanes by group bond contribution method using artificial neural networks. *Chemical Engineering (化学工程)*, 2007, **35** (4): 38-41
- [7] Pan Yong, Jiang Juncheng, Wang Zhirong. Quantitative structure-property relationship studies for predicting flash points of alkanes using group bond contribution method with back-propagation neural network. *J. Hazard. Mater.*, 2007, **147**: 424-430
- [8] Mu Lailong (沐来龙), Feng Changjun (冯长君). Novel connectivity index of edge valence and its application. *Journal of Chemical Industry and Engineering (China)* (化工学报), 2004, **55** (4): 531-540
- [9] Chen Yan (陈艳), Du Xihua (堵锡华). QSPR research on thermodynamic properties of poly-chlorinated diphenyl ethers. *Journal of Chemical Industry and Engineering (China)* (化工学报), 2008, **59** (10): 2427-2435
- [10] Shu Qing, Wang Jinfu, Peng Baoxiang, Wang Dezheng, Wang Guangrun. Predicting the surface tension of biodiesel fuels by a mixture topological index method at 313 K. *Full.*, 2008, **87**: 3586-3590
- [11] Kahrs O, Brauner N, Gholakov G S, Stateva R P, Marquardt W, Shacham M. Analysis and refinement of the targeted QSPR method. *Comput. Chem. Engin.*, 2008, **32**: 1397-1410
- [12] Nie Changming (聂长明), Dai Yimin (戴益民), Wen Songnian (文松年), Li Zhonghai (李忠海), Zhou Congyi (周丛艺), Peng Guowen (彭国文). Topological homologous regularity for additive property of alkanes. *Acta Chimica Sinica* (化学学报), 2005, **63** (15): 1449-1455
- [13] Nie Changming (聂长明). Group electro-negativity. *J. Wuhan Univ.: Nat. Sci. Ed.* (武汉大学学报: 自然科学版), 2000, **46** (2): 176-180
- [14] Wiener H. Structural determination of paraffin boiling points. *J. Am. Chem. Soc.*, 1947, **69** (1): 17-20
- [15] Dean J A. Lange's Handbook of Chemistry. 15th ed. New York: McGraw-Hill Inc., 1999
- [16] Yu Xinliang (禹新良), Wang Xueye (王学业), Gao Jinwei (高进伟), Li Xiaobing (李小兵), Wang Hanlu (王寒露). QSPR studies on vinyl polymers based on quantum chemical descriptors. *Acta Chimica Sinica* (化学学报), 2006, **64** (7): 629-636
- [17] Tropsha A, Gramatica P, Gombar V K. The importance of being earnest: validation is the absolute essential for successful application and interpretation of QSPR models. *Quant. Struct. Act. Relat. Comb. Sci.*, 2003, **22** (1): 69-77
- [18] Katritzky A R, Petrukhin R, Jain R, Karelson M. QSPR analysis of flash points. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, 2001, **41**: 1521-1530
- [19] Katritzky A R, Stoyanova-Slavova I B, Dobchev D A, Karelson M. QSPR modeling of flash points: an update. *J. Mol. Graph. Model.*, 2007, **26**: 529-536