

含氮和硼掺杂的六元环的非线性光学化合物的 几何结构和第一超极化率

贾玉波, 江丽芝, 朱小蕾

(南京工业大学化学化工学院, 材料化学工程国家重点实验室, 江苏 南京 210009)

[摘要] 采用 HF/6-31G(d)//CPHF/6-31G(d) 方法研究了含氮和硼掺杂的六元环非线性光学化合物的优化结构、第一超极化率和其它物理性质. 根据计算结果分析和讨论了推/吸电子基团的取代位置和极化率对体系的超极化率的影响. 本文的研究结果有助于设计新型的非线性光学材料.

[关键词] HF, 杂环, 非线性光学, 第一超极化率

[中图分类号] O626.4 [文献标识码] A [文章编号] 1001-4616(2009)04-0072-05

Geometries and First Hyperpolarizabilities of Nonlinear Optical Compounds Containing Nitrogen-and Boron-doped Six-membered Rings

Jia Yubao, Jiang Lizhi, Zhu Xiaolei

(State Key Laboratory of Materials-Oriented Chemical Engineering, College of Chemistry and Chemical Engineering,
Nanjing University of Technology, Nanjing 210009, China)

Abstract The optimized structures, first hyperpolarizabilities and other physical properties of title molecules are investigated using the HF/6-31G(d)//CPHF/6-31G(d) method. The effect of substituent position of donor/acceptor and polarizability on the first hyperpolarizabilities of systems is analyzed and discussed based on the results, which is helpful for designing novel non-linear optical materials.

Key words HF, heterocycle, non-linear optics, first hyperpolarizability

随着激光技术的发展, 非线性光学材料已成为当今研究的热点^[1-17]. 具有 D- π -A 结构的有机化合物是有机物非线性光学材料的一类典型代表, 也是被较早发现的一类有机非线性光学材料. 近几年来, 随着电子科技的发展和激光技术的进步, 对非线性光学材料的要求也越来越高, 不但要求有机非线性光学材料具有大的非线性光学响应, 而且还要求非线性光学材料具有一定的热稳定性及化学稳定性. 前人的研究中大多以烯烃、炔烃、苯环等作为连接推/吸电子基团的 π 共轭桥链, 此种结构非常有利于推电子基团到吸电子基团间的电子转移, 因此具有此种 D- π -A 结构的有机非线性光学材料具有较大第一超极化率, 但是这类有机非线性光学材料的热稳定性和化学稳定性较差, 因而这类有机非线性光学材料在实际应用中存在一定的缺陷.

近年来, 杂环被引入到有机非线性光学材料中, 因为此类有机物化学稳定性与热稳定性较好, 并且也具有较好的共轭性和较高的非线性光学响应, 在非线性光学应用领域有很大的潜力, 因而逐渐受到人们的重视. 对含有五元杂环的有机非线性光学材料的研究较早, 上世纪 80 年代已经有人开始研究含有五元杂环的有机非线性光学材料, 90 年代初, Dirk^[11]和 Cheng^[12]对含有噻唑、咪唑、噻吩的非线性光学有机物进行了研究, 此后又相继出现了其它五元杂环的报道^[3-10], 因此现在对含五元杂环的有机非线性材料的研究比较成熟. Brasselet 等人^[11-13]对含有六元杂环的非线性光学材料进行了研究, 他们指出此类有机物具有较好的非线性光学性质, 但至今对含有六元杂环的有机非线性光学材料的研究报道较少.

Park 等人^[8]对含氧、硫、氮的五元杂环的非线性光学化合物进行了研究. 本文在此基础上, 设计了一

收稿日期: 2008-11-09

基金项目: 江苏省科技厅自然科学基金 (BK2008372)、国家自然科学基金 (20706029 和 20876073) 资助项目.

通讯联系人: 朱小蕾, 博士, 教授, 研究方向: 分子模拟. E-mail: xlxu@njit.edu.cn

些含氮和硼掺杂的六元杂环的非线性光学化合物, 考察了中心杂环上不同的杂原子及推 吸电子基团在中心杂环上的取代位置对分子第一超极化率的影响, 探索了设计分子的非线性光学响应产生的机理, 为实验工作者合成新型的非线性光学材料提供了基础数据.

1 计算方法

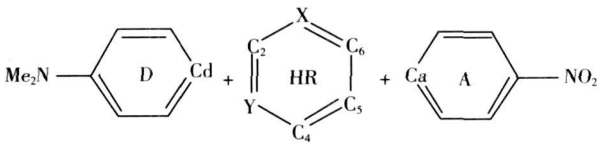
如图 1所示, 设计的 D- π - A 分子为中心六元杂环 (XC₂YC₄C₅C₆, X= N 或 B, Y= C, N, 或 B)连接硝基苯吸电子基 (A) 和二甲氨基苯推电子基 (D).

本文采用 HF/6- 31G (d) 方法优化了所有设计的分子, 通过频率分析考察优化结构的稳定性, 并用 CPHF/6- 31G (d) 方法计算了它们的第一超极化率和其它物理性质.

2 结果与讨论

本文以 N, N-二甲氨基苯作为推电子基, 硝基苯为吸电子基, 中间以含氮和硼原子的六元杂环相连接, 形成 D- π - A 结构的分子. 通过改变推电子基团与吸电子基团在中心杂环上的取代位置, 寻找非线性光学响应强的化合物.

设计分子的部分优化参数 (D₁ 和 D₂)列在表 1 中. 从表 1 可以看出, 推 吸电子基团基与 HR1、HR3上的 C₂、C₄、C₅ 相连接时吸电子基团与中心杂环形成了较大的二面角, 推 吸电子基团基与 HR2、HR4、HR5上的 C₂ 相连接时推 吸电子基团与中心杂环几乎成平面结构, 当与 C₄、C₅ 相连接时则出现了较大的二面角, 以上结果与前人计算结果^[8]一致. 当推 吸电子基团与 HR1、HR3上 C₂ 相连接时, 与 C₂ 相邻的 C₃ 上有 1 氢原子, 因此推 吸电子基团在与 HR1、HR3上 C₂ 相连接时受到相邻碳上氢原子的作用, 推 吸电子



- 1: X=N,Y=C(HR1),A-(24)-D
2: X=N,Y=C(HR1),A-(2/5)-D
3: X=N,Y=C(HR1),D-(2/4)-A
4: X=N,Y=C(HR1),D-(2/5)-A
5: X=N,Y=N(HR2),A-(2/4)-D
6: X=N,Y=N(HR2),A-(2/5)-D
7: X=N,Y=N(HR2),D-(2/4)-A
8: X=N,Y=N(HR2),D-(2/5)-A
9: X=B,Y=C(HR3),A-(2/4)-D
10: X=B,Y=C(HR3),A-(2/5)-D
11: X=B,Y=C(HR3),D-(2/4)-A
12: X=B,Y=C(HR3),D-(2/5)-A
- 13: X=B,Y=B(HR4),A-(2/4)-D
14: X=B,Y=B(HR4),A-(2/5)-D
15: X=B,Y=B(HR4),D-(2/4)-A
16: X=B,Y=B(HR4),D-(2/5)-A
17: X=N,Y=B(HR5),A-(2/4)-D
18: X=N,Y=B(HR5),A-(2/5)-D
19: X=N,Y=B(HR5),A-(2/6)-D
20: X=N,Y=B(HR5),D-(2/4)-A
21: X=N,Y=B(HR5),D-(2/5)-A
22: X=N,Y=B(HR5),D-(2/6)-A

图 1 设计的分子结构

Fig.1 The sturctures of designed molecules

表 1 设计分子的物理性质

Table 1 Physical properties of the designed m olecules

	Heterocycles	Bonding pattern	E	μ	α	β	D ₁ (°)	D ₂ (°)
1	X= N, Y= C	A- (2- 4) - D	9. 17	9. 39	0. 80	46. 95	27. 7	40. 0
2	X= N, Y= C	A- (2- 5) - D	8. 89	9. 73	0. 83	75. 77	26. 4	42. 6
3	X= N, Y= C	D- (2- 4) - A	8. 71	5. 40	0. 80	51. 68	23. 3	45. 3
4	X= N, Y= C	D- (2- 5) - A	8. 74	7. 58	0. 84	107. 70	21. 3	42. 9
5	X= N, Y= N	A- (2- 4) - D	9. 04	9. 72	0. 81	58. 55	4. 2	19. 8
6	X= N, Y= N	A- (2- 5) - D	8. 91	10. 64	0. 83	65. 97	0. 5	44. 1
7	X= N, Y= N	D- (2- 4) - A	8. 61	5. 69	0. 81	59. 91	3. 0	28. 9
8	X= N, Y= N	D- (2- 5) - A	8. 70	6. 65	0. 85	129. 05	0. 6	41. 9
9	X= B, Y= C	A- (2- 4) - D	8. 60	6. 47	0. 83	50. 43	32. 5	49. 7
10	X= B, Y= C	A- (2- 5) - D	8. 79	8. 57	0. 88	112. 55	30. 0	41. 7
11	X= B, Y= C	D- (2- 4) - A	9. 20	7. 32	0. 83	44. 85	36. 9	44. 6
12	X= B, Y= C	D- (2- 5) - A	8. 63	8. 56	0. 87	75. 94	34. 1	45. 6
13	X= B, Y= B	A- (2- 4) - D	7. 60	6. 22	0. 88	54. 18	0. 2	42. 6
14	X= B, Y= B	A- (2- 5) - D	8. 01	8. 32	0. 92	133. 02	4. 8	40. 0
15	X= B, Y= B	D- (2- 4) - A	7. 85	9. 19	0. 89	84. 47	6. 9	28. 2
16	X= B, Y= B	D- (2- 5) - A	7. 90	9. 11	0. 90	77. 29	5. 1	45. 4
17	X= N, Y= B	A- (2- 4) - D	9. 00	9. 12	0. 87	61. 91	0. 6	32. 3
18	X= N, Y= B	A- (2- 5) - D	8. 67	10. 29	0. 91	118. 92	0. 9	42. 0
19	X= N, Y= B	A- (2- 6) - D	8. 34	7. 40	0. 86	61. 31	5. 3	35. 9
20	X= N, Y= B	D- (2- 4) - A	8. 32	5. 96	0. 88	79. 39	1. 0	34. 6
21	X= N, Y= B	D- (2- 5) - A	8. 38	8. 23	0. 91	116. 62	0. 9	44. 1
22	X= N, Y= B	D- (2- 6) - A	8. 78	9. 27	0. 87	67. 82	4. 6	33. 3

注: ΔE 的单位为 eV, μ 的单位为 Debye, α 的单位为 $\text{\AA}^3/\text{atm}$, β 的单位为 10^{-30} esu, D₁ (°) 为吸电子基团中的苯环与中心杂环之间的二面角, D₂ (°) 为推电子基团中的苯环与中心杂环之间的二面角.

基团与 HR1、HR3 形成了较大的二面角,但推吸电子基团在与 HR2、HR4、HR5 上的 C₂ 相连接时,与 C₂ 相邻的都为杂原子,杂原子上没有氢原子,因此 HR2、HR4、HR5 上的 C₂ 周围与 HR1、HR3 上 C₂ 周围相比少了 1 个氢原子.从计算结果我们可以发现,推吸电子基团与 HR2、HR4、HR5 上 C₂ 相连接时二面角非常小. HR1、HR2、HR3、HR4、HR5 上 C₅ 相邻的 C₄ 与 C₆ 上各有一氢原子,因此 HR1、HR2、HR3、HR4、HR5 上 C₅ 与推吸电子基团相连接时受到 C₄ 与 C₆ 上氢原子的作用形成了较大的二面角.中心杂环上碳碳、碳氮与碳硼键的键长都介于单键和双键之间(碳碳单键为 0.153~0.155 nm,碳碳双键为 0.133~0.136 nm,碳氮单键为 0.147 nm,碳氮双键 0.128 nm,碳硼单键为 0.155 nm,碳硼双键为 0.138 nm^[18]),并且键长都变化不大,反映了中心杂环的共轭性较好.

从表 1 可以看出,对含一个氮和 2 个氮的中心杂环来说,推吸电子基团与中心杂环采取 D-(2-5)-A 方式连接,体系的 β 较大.对含硼的中心杂环来说,推吸电子基团与中心环采取 A-(2-5)-D 方式连接,体系的 β 较大.对氮硼混合掺杂的中心杂环来说,推吸电子基团与中心环采取 D-(2-5)-A 和 A-(2-5)-D 两种方式连接,体系的 β 都较大.这显然与中心环上的杂原子的电负性大小有关.

在设计的分子中,推电子基团上的 C_d 吸电子基团上的 C_a 与中心杂环上 C₃、C₄ 及 C₅ 相连,这些原子上的电荷值列在表 2 中.由表 2 可以发现,在中心杂环上所含杂原子电负性不同及推吸电子基团的取代位置不同,使中心杂环上碳原子上的电荷分布发生了明显的变化.通过分析数据我们可以发现,在含有氮原子的杂环中,由于氮原子的电负性较高,与氮原子相邻碳原子都显正电性,含有硼原子的杂环中,硼原子带有正电荷,与硼原子相邻的碳原子则都带负电荷.由于杂环上氮原子和硼原子的电负性差别较大,对中心杂环上电荷分布产生了较大影响,并且随推吸电子基团在中心杂环上取代位置的不同,中心杂环上碳原子的电荷也会发生较大的变化.由于中心杂环上原子电荷的差异对各个分子的第一超极化率也产生了一定的影响.表 1 中的数据表明,分子 4(X=N, Y=C, D-(2/5)-A) 的 β 较大.从表 2 中分子 4 各原子上的电荷分布来看,推电子基团上的 C_a 带负电荷,中间杂环上的 C₂ 带正电荷, C₅ 上带负电荷,吸电子基团苯环上 C_d 带正电荷,即 D- π -A 三部分相连的原子上的电荷呈现(+ - + -)正负交替的现象.从表 1 和表 2 的数据可以看出,分子 8、10、14 和 21 上 D- π -A 三部分相连的原子上的电荷也呈现正负交替的

表 2 设计的分子中原子的 Mulliken 电荷

Table 2 The Mulliken atomic charges of designed molecules										
H heterocycles	Bonding pattern	X	C ₂	Y	C ₄	C ₅	C ₆	C _a	C _d	
1	X=N, Y=C	A-(2-4)-D	-0.578 6	0.291 3	-0.273 7	0.083 2	-0.281 6	0.076 7	0.016 3	-0.029 2
2	X=N, Y=C	A-(2-5)-D	-0.572 7	0.285 3	-0.245 6	-0.158 7	-0.046 6	0.060 7	0.017 0	-0.017 4
3	X=N, Y=C	D-(2-4)-A	-0.581 4	0.312 6	-0.271 3	0.063 4	-0.284 9	0.081 5	0.026 5	-0.051 5
4	X=N, Y=C	D-(2-5)-A	-0.589 3	0.319 0	-0.256 5	-0.146 7	-0.080 6	0.075 6	0.046 8	-0.055 0
5	X=N, Y=N	A-(2-4)-D	-0.599 3	0.608 0	-0.674 8	0.369 0	-0.308 9	0.109 2	-0.067 7	-0.072 8
6	X=N, Y=N	A-(2-5)-D	-0.588 4	0.591 9	-0.588 5	0.105 3	-0.115 2	0.105 4	-0.062 7	-0.012 4
7	X=N, Y=N	D-(2-4)-A	-0.594 5	0.610 8	-0.662 3	0.344 0	-0.319 8	0.116 1	0.005 2	-0.130 7
8	X=N, Y=N	D-(2-5)-A	-0.599 1	0.607 8	-0.599 1	0.121 3	-0.152 3	0.121 3	0.054 5	-0.130 1
9	X=B, Y=C	A-(2-4)-D	0.280 1	-0.118 8	-0.203 3	-0.061 9	-0.178 4	-0.333 9	0.077 3	-0.017 6
10	X=B, Y=C	A-(2-5)-D	0.285 6	-0.128 3	-0.192 0	-0.289 3	0.041 0	-0.337 8	0.082 1	-0.035 3
11	X=B, Y=C	D-(2-4)-A	0.280 2	-0.097 2	-0.209 3	-0.070 7	-0.181 7	-0.335 0	0.044 8	0.025 2
12	X=B, Y=C	D-(2-5)-A	0.270 0	-0.087 4	-0.207 4	-0.278 0	0.011 8	-0.332 1	0.025 3	0.012 6
13	X=B, Y=B	A-(2-4)-D	0.305 1	-0.283 8	0.292 1	-0.167 0	-0.169 9	-0.397 5	0.124 4	0.018 9
14	X=B, Y=B	A-(2-5)-D	0.309 9	-0.299 1	0.310 0	-0.399 5	0.051 6	-0.399 4	0.127 1	-0.043 2
15	X=B, Y=B	D-(2-4)-A	0.295 4	-0.239 5	0.280 6	-0.192 0	-0.166 9	-0.397 2	0.097 3	0.057 1
16	X=B, Y=B	D-(2-5)-A	0.290 2	-0.245 4	0.290 0	-0.395 6	0.022 0	-0.395 6	0.018 4	0.058 2
17	X=N, Y=B	A-(2-4)-D	-0.533 8	0.194 8	0.193 7	-0.047 0	-0.254 1	0.010 6	0.025 1	0.012 1
18	X=N, Y=B	A-(2-5)-D	-0.531 1	0.184 7	0.228 1	-0.300 7	-0.014 9	-0.003 0	0.029 8	-0.031 9
19	X=N, Y=B	A-(2-6)-D	-0.598 8	0.206 6	0.218 4	-0.297 8	-0.211 6	0.243 0	0.025 0	-0.014 8
20	X=N, Y=B	D-(2-4)-A	-0.546 4	0.224 4	0.189 6	-0.071 2	-0.247 8	0.005 5	0.061 0	-0.040 5
21	X=N, Y=B	D-(2-5)-A	-0.552 3	0.225 4	0.211 8	-0.291 9	-0.044 4	0.003 8	0.031 9	-0.040 6
22	X=N, Y=B	D-(2-6)-A	-0.613 0	0.230 6	0.218 0	-0.298 4	-0.215 0	0.232 3	0.041 0	-0.039 3

注: X、C₂、Y、C₃、C₄、C₅、C₆ 为中心杂环上各原子, C_a 为吸电子基团上与中心杂环相连的碳原子, C_d 为推电子基团上与中心杂环相连的碳原子.

现象. 它们的 β 也相对较大. 显然, 这种电荷分布有利于体系 β 的增加, 这与 Park^[8] 等人发现的规律一致.

另一方面, 我们计算了体系 1-8 的中心杂环上基态与第一激发态的电荷转移的总和 $\left(\sum \Delta q\right)$. 通过分析发现, 体系 1-4 和体系 5-8 的分子第一超极化率与 $\sum \Delta q$ 有较好的相关 (如图 2 所示), 即对体系 1-4 和体系 5-8 来说, 中心杂环上基态与第一激发态的电荷转移的总和较小有利于体系 β 的提高. 图 3 显示了体系的第一超极化率与极化率的相关. 另一方面, 从图 3 不难看出, 含氮的杂环体系 (1-8) 的极化率相对较小, 含硼的杂环的体系 (9-22) 的极化率相对较大. 更重要的是, 图 3 说明了体系极化率的增加有利于体系 β 的提高, 而且, 两者之间的相关系数大于 0.9

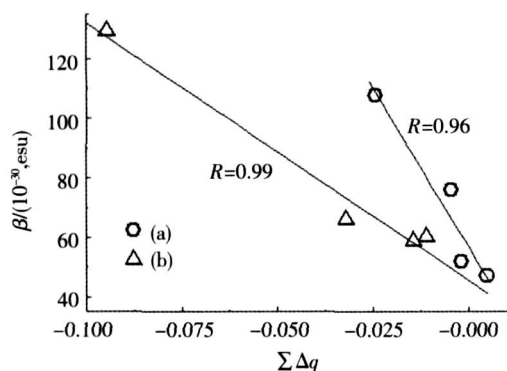


图 2 分子第一超极化率与体系中心杂环上原子的电荷转移总和的相关.(a) X=N, Y=C, 体系 1-4; (b) X=N, Y=N, 体系 5-8

Fig.2 Correlation of β with the total atomic charge transfer of heterocyclic rings of systems

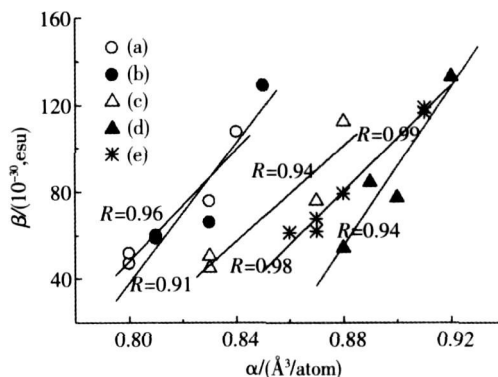


图 3 分子第一超极化率与极化率的关系.(a) X=N, Y=C, 体系 1-4; (b) X=N, Y=N, 体系 5-8; (c) X=B, Y=C, 体系 9-12; (d) X=B, Y=B, 体系 13-16; (e) X=N, Y=B, 体系 17-22

Fig.3 The relationship between β and α

3 结论

本文设计了一些含有氮、硼中心六元杂环的非线性光学化合物. 这些化合物具有 D- π -A 结构. 我们利用 HF/6-31G(d)//CPHF/6-31G(d) 方法获得了这些化合物的优化结构、分子第一超极化率和其它物理性质. 研究表明, 体系的极化率的增加有利于体系 β 的提高. 另一方面, 对含 1 个氮和 2 个氮的中心杂环来说, 推/吸电子基团与中心环采取 D-(2-5)-A 方式连接, 有利于体系的 β 的提高. 对含硼的中心杂环来说, 推/吸电子基团与中心环采取 A-(2-5)-D 方式连接, 有利于体系的 β 的提高. 对氮硼混合掺杂的中心杂环来说, 推/吸电子基团与中心环采取 D-(2-5)-A 和 A-(2-5)-D 两种方式连接, 体系的 β 值都较大. 这些结果与设计分子的 D- π -A 三部分相连的原子的电荷呈现正负交替的现象密切相关.

[参考文献]

- [1] Dik CW, Katz H E, Schilling M L. Use of thiazole rings to enhance molecular second order nonlinear optical susceptibilities [J]. Chem Mater, 1990, 2(6): 700-705
- [2] Cheng Lap Tak, Tam Wilson, Marder Seth R, et al. Experimental investigations of organic molecular nonlinear optical polarizabilities: a study of conjugation dependences [J]. J Phys Chem, 1991, 95(26): 10 643-10 652
- [3] Miller R D, Lee V Y, Morylan C R. Substituted azole derivatives as nonlinear optical chromophores [J]. Chem Mater, 1994, 6(7), 1 023-1 032
- [4] Meyers F, Bédas J L, Zyss J. Electronic structure and nonlinear optical properties of push-pull polyenes: theoretical investigation of benzodithia polyenals and dithiobenzene polyenals [J]. J Am Chem Soc, 1992, 114(8): 2 914-2 921.
- [5] Groenendaal L, Buning M J, Hendrickx E H J, et al. Synthesis and nonlinear optical properties of a series of donor-oligopyrrole-acceptor molecules [J]. Chem Mater, 1998, 10(1): 226-234
- [6] Manuela M, Raposo A M, Kirsch G. Formylation, dicyanovinyl and tricyanovinyl of 5-alkoxy- and 5-amino-substituted 2,2'-bithiophenes [J]. Tetrahedron, 2003, 59(26): 4 891-4 899.
- [7] Batista R M F, Costa S P G. Synthesis of new fluorescent 2-(2',2''-bithienyl)-1,3-benzothiazoles [J]. Tetrahedron Lett, 2004, 45(13): 2 825-2 828

- [8] Choon Sup Raa, Seok Chan K in. π -Bridging 1, 3-Heterocyclic aromatic rings and the first hyperpolarizability of nonlinear optical compounds[J]. J Mol Struct(Theochim), 2004, 677(1/3): 173-178
- [9] Janczarek I, Fuks Luc J, Sahraoui B, et al. Third-order nonlinear optical figure of merits for conjugated TTF-quinone molecules[J]. J Phys Chem B, 2005, 109(20): 10 179-10 183
- [10] Nandi Prasanta Kumar, Mandal K. Theoretical study of static second-order nonlinear optical properties of push-pull heteroquinonoid dimers[J]. J Mol Struct(Theochim), 2006, 760(1/3): 235-244
- [11] Brasselet S, Cherioux F, Audebert P, et al. New octupolar star-shaped structures for quadratic nonlinear optics[J]. Chem Mater, 1999, 11(7): 1915-1920
- [12] Shu Y C, Gong Z H, Shu C F. Synthesis and characterization of nonlinear optical chromophores with conformationally locked polyenes possessing enhanced thermal stability[J]. Chem Mater, 1999, 11(6): 1628-1632
- [13] Galli S, Masciocchi N, Cariati E, et al. Quest for second-harmonic-generation-active coordination polymers: synthesis and properties of silver(I) pyrimidinates[J]. Chem Mater, 2005, 17(19): 4815-4824
- [14] Zhu X L, You X Z, Zhang Y. A novel approach to calculation of the second-order nonlinear optical susceptibilities of organic crystals based on energy-band theory[J]. Chem Phys, 2000, 254(2/3): 287-296
- [15] Li Zhong'an, Dong Shoucheng, Yu Gui, et al. Novel second-order nonlinear optical main-chain polyurethanes: adjustable subtle structure, improved thermal stability and enhanced nonlinear optical property[J]. Polymer, 2007, 48(19): 5520-5529
- [16] Ugurlu G, Kasap E, Kantarci Z, et al. A theoretical study of the linear, nonlinear optical properties and conformational analysis of 3-phenylthiophene and its fluoro derivatives with torsional dependence[J]. J Mol Struct, 2007, 834-836, 508-515
- [17] 王娟娟, 朱小蕾, 陈凯. 1, 2, 3, 4-四氢喹啉衍生物的第一超极化率的理论研究[J]. 南京师大学报: 自然科学版, 2006, 29(2): 66-72
- [18] Exner K, Schleyer P von R. Planar hexacoordinate carbon: a viable possibility[J]. Science, 2000, 290: 1937-1940

[责任编辑: 顾晓天]

(上接第 71 页)

[参考文献]

- [1] 徐镜波, 景体淞. 鲤鱼组织 ATPase 活性抑制和构效分析[J]. 高等学校化学学报, 1998, 19(12): 1920-1924
- [2] 徐满, 张爱茜, 韩朔暎, 等. 取代硝基苯类化合物的 3D-QSAR 研究[J]. 科学通报, 2001, 46(19): 1614-1617
- [3] Cronin M T D, Gregory B W, Schultz T W. Quantitative structure-activity analyses of nitrobenzene toxicity to tetrahymena pyrifomis[J]. Chem Res Toxicol, 1998, 11(8): 902-908
- [4] Kier L B, Hall L H. An electrotopological state index for atoms in molecules[J]. Pharmaceutical Research, 1990, 7(8): 801-807
- [5] Hall L H, Mohny B K, Kier L B. The electrotopological state: Structure information at the atomic level from molecular graphs[J]. J Chem Inf Comput Sci, 1991, 31(1): 76-82
- [6] Hall L H, Mohny B K, Kier L B. The electrotopological state: An atom index for QSAR[J]. Quant Struct-Act Relat, 1991, 10(1): 43-51
- [7] Kier L B, Hall L H. An index of electrotopological state of atoms in molecules[J]. J Math Chem, 1991, 7(1): 229-241
- [8] Hall L H, Kier L B, Brown B B. Molecular similarity based on novel atom type electrotopological state indices[J]. J Chem Inf Comput Sci, 1995, 35(6): 1074-1080
- [9] 王连生. 有机污染化学[M]. 北京: 高等教育出版社, 2004, 437-438

[责任编辑: 顾晓天]