

文章编号:1000-582X(2004)06-0106-04

分子电距矢量对醇类气相色谱保留指数的预测*

傅世平¹,王远强²

(1.重庆师范大学化学系,重庆 400047;2.重庆大学化学化工学院,重庆 400030)

摘要:用MEDV描述子对55个醇的分子结构进行表征,对MEDV矢量和其气相色谱保留指数之间建立了定量结构-色谱保留值关系。借助多元线性回归、逐步回归和交互检验建立了分子电距矢量和55个化合物的气相色谱保留值之间的定量结构-色谱保留值相关模型(QSRR),线性回归十参数模型的复相关系数达到了0.995 0,逐步回归七参数模型复相关系数为0.989 6,交互检验的 R_{CV} 值为0.970 0,表明模型对样本具有一定的稳定性和预测能力。

关键词:分子电距矢量;醇类;定量结构-色谱保留值关系

中图分类号:O622.3

文献标识码:A

QSRR (Quantitative structure-retention relationship)是对色谱保留值与定量结构关系进行研究,它的研究对预测保留值、选择分离条件及探索色谱保留机理都具有重要意义^[1-3]。在气相色谱分析中,常利用文献保留数据进行定性,而最有参考价值的是相对保留和保留指数^[4],它们是分子微观结构的宏观反映。故QSRR的研究越来越受到分析化学、物理化学以及药物化学家的关注,已成为色谱科学的一个新的研究分支领域,据此可以对一个新溶质的保留进行预测,甚至可以对溶质的相对生物活性进行预测^[5]。笔者利用刘树深等最早提出的分子电距矢量对文献^[6-8]中的55个醇类化合物进行了结构表征,对其气相色谱保留指数进行了预测,相关系数 R 在0.98以上,结果令人满意。

1 QSRR研究方法和化合物分子结构表征

1.1 MEDV方法原理

分子由各种不同属性的原子按不同连接方式(化学键)构成。而原子之间的相互作用与原子电性及相隔距离密切相关^[9-12]。一般而言,依据库仑定律,电性越大,距离越小,相互作用就越大。另一方面,不同原子类型之间的相互作用方式也不同。原子间相互作用取决于各原子的电负性和它们之间的距离。

1.2 原子类型和原子属性

综观大多数有机物和生物分子,主要是由C、H、O、N、P、S、F、Cl、Br、I等少数几种元素通过共价键以各种不同的连接方式结合而成的,而在醇分子中,则主要是由C、H、O等几种元素。这些生物分子主要是以碳原子构成其基本的骨架,在具体研究这些化合物时,由于H原子的特殊性,常常被忽略而不考察,故仅考虑由各非氢原子或称重原子所构成的分子骨架。简而言之,这些分子可以简单地以非氢原子骨架结构来表示。通过这个骨架即能方便而简洁地得到完整的分子结构。

在研究中,原子类型可以定义为:分子中任意一个非氢原子与其他非氢原子相互连接的共价键的总和,也即是原子的化学价。如果某非氢原子所连接的共价键总和为 k ,则该非氢原子就属于第 k 类型原子。需要说明的是,连接两个非氢原子的共价键可以是共价单键、共价双键(以两个单键计算)甚至共价三键(以3个单键计算;也可以是其他类型化学键,如共轭/多烯的共轭 π 键与苯环上芳香键(以3个单键计算)及叠积二烯烃的叠积双键(以2个单化学键计算)。在这里指定原子类型用小写斜体 k 或 l 表示($k, l = 1-7$)。比如某非氢原子属于第一种原子类型,就称它为 $k = 1$ 或 $l = 1$ 。

* 收稿日期:2004-01-06

基金项目:国家“春晖计划”教育部启动基金[99]与重庆市应用基础项目[01]资助课题。

作者简介:傅世平(1963-),男,重庆人,重庆师范大学讲师,研究方向:分子模拟,有机合成。

原子属性反映分子中的非氢原子是通过怎样的共价键与其他的非氢原子连接,它是一个表征处于化学环中的非氢原子所属元素的原子特征以及在分子中所属化学键的连接特性。在生物分子中,原子以不同的共价键相接(单键、双键、三键、芳香键等),当某个原子与其他非氢原子形成多个共价键时,以共价键的键级高低为优先次序,比如以三键 > 双键 > 芳香键 > 单键的次序定义原子属性。通过非氢原子所连接的共价键,可以非常方便的定义该非氢原子的原子属性,在简单而不影响定义的前提下,也可以借用原子的杂化形式(共价单键: sp^3 、共价双键: sp^2 、共价三键 sp 、芳香键: sp^*)来定义原子属性,根据原子所连接的价键(共价单键、共价双键、共价三键、芳香键等)以确定原子属性(sp^3 、 sp^2 、 sp 、 sp^*)。具体计算时,由输入的原子和共价键类型(用自定义符号代表共价键:“—”代表单键、“=”代表双键、“%”代表三键、“*”代表芳香键)通过计算机自动识别。

1.3 相对电负性和相对键长

一个化学键的“相对键长” d (relative bond-length)定义为该共价键的键长与碳-碳单键键长的比值。例如,碳-碳单键的相对键长 $d = 0.154 \text{ nm} / 0.154 \text{ nm} = 1.000 0$;而碳-碳双键的相对键长 $d = 0.134 \text{ nm} / 0.154 \text{ nm} = 0.870 1$ 。

非氢原子的“相对电负性” q (relative electronegativity)定义为该原子 Pauling 电负性与碳原子 Pauling 电负性的比值,如 N 原子的相对电负性 $q_N = 3.04 / 2.55 = 1.192 2$ 。生物分子中常见的非氢原子 Pauling 电负性以及相对电负性 q 见文献[13]。

1.4 MEDV-B 中矢量元素的划分

由原子类型的定义可以知道,第 VII 主族的卤素原子理论上最多可以连接 7 个共价键,也就是说,理论上最多的原子类型为 7 类;但实际在研究工作中,对于醇类结构表达而言,卤素原子仅为 1 类。非氢原子所连接的共价键一般最多为第 IV 主族,共 4 个共价键,因此实际的原子类型一般最多为 4 类。按照各类原子之间的相互作用,共有 $(4 + 1) * 4 / 2 = 10$ 个 MEDV 元素;如果用 m 代表矢量元素可能的组合,则可以用下面的公式计算: $m = kl (k = 1 \sim 4, k \leq l \leq 4)$

式中 k 和 l 分别为第 i 和第 j 个原子的类型。以分子中原子的原子类型只有 4 类计算,则 m 可能的组合为 $m = 11, 12, 13, 14, 22, 23, 24, 33, 34, 44$, 相应的 $k, l = 1, 2, 3, 4$, 共为 10 个 MEDV 元素,也即 10 个矢量描述子。

1.5 MEDV 矢量的计算方法

在定义原子属性,并规定了有两个原子构成的共价键及相对键长与相对电负性,结合矢量描述子的划分方案,就可以用 MEDV-B 非常简便的计算表征分子结构的各个矢量描述子。MEDV 具体计算方法可以由下式表示:

$$V_m = \sum_{i \in k, j \in l} \frac{q_i q_j}{d_{ij}^2}$$

式中字母所代表的意义在前面已经定义。 d_{ij}^2 为原子 i 与 j 之间的相对距离(以相对键长表示),是其间各个化学键的相对键长的加和,当有多条化学键构成的链时,取最短的一条,“ Σ ”表示对所有属于原子类型 k 的非氢原子 i 和属于原子类型 l 的非氢原子 j 的相互作用的值进行加和计算。

现以香茅醇为例来具体说明 MEDV 的计算过程。香茅醇的分子结构如图 1。分子中各个原子的原子类型、原子属性以及原子之间的连接关系列于表 1。

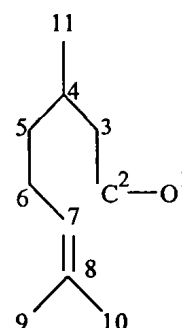


图 1 香茅醇的分子结构

表 1 香茅醇分子中的原子类型、原子属性、原子间连接关系

原子编号	O1	C2	C3	C4	C5	C6	C7	C8	C9	C10	C11
连接关系		2-1	3-2	4-3	5-4	6-5	7-6	8=7		10-9	11-4
原子类型	1	2	2	3	2	2	3	4	1	1	1
原子属性	sp^3	sp^3	sp^3	sp^3	sp^3	sp^3	sp^2	sp^2	sp^3	sp^3	sp^3

在得到了分子中原子的类型、电负性、最短距离,就可以非常简单的计算分子电性距离矢量中的每一个元素。例如矢量的第 8 个元素,也就是第 3 类型的原子相互作用的加和值,在香茅醇中只有第 4 和第 7 两个原子属于第 3 类。其中两原子之间的最短路径为: $C^4 C^7$

$$d = 0.154 / 0.154 + 0.154 / 0.154 + 0.144 / 0.154 = 2.935 1$$

且已知 $q_c = 1.000 0$

所以矢量的第 8 个元素可以计算为: $V_8 = \frac{1.000 0 \times 1.000 0}{2.935 1^2} = 0.116 1$ 同理,可求出另外 9 个

MEDV 元素的 $V_1 = 0.480 0$, $V_2 = 3.306 4$, $V_3 = 1.963 9$, $V_4 = 2.360 5$, $V_5 = 2.534 7$, $V_6 = 4.016 4$,

$V_7 = 0.5069, V_9 = 1.3900, V_{10} = 0.0000$

2 线性回归模型的建立

2.1 多元线性回归模型的建立

对表 2 中的矢量数据与其活性数据进行多元线性回归建模,然后选用交互效验对模型的稳定性进行了

$$Y(1) = 248.35938 + 82.70290V_1 + 79.23170V_2 + 41.81737V_3 + 13.06273V_4 + 63.55897V_5 + 38.44094V_6 + 52.21413V_7 + 68.18085V_8 + 91.88535V_9 - 176.28925V_{10}$$

$$N = 51 \quad R = 0.9950 \quad SD = 23.6050 \quad F = 396.5163 \quad U = 2209364.2500 \quad Q = 22287.75000$$

$$N = 51 \quad R = 0.1669 \quad SD = 215.5940 \quad F = 0.8012 \quad U = 372420.6250 \quad Q = 1859231.3750(CV)$$

检验。括号中 CV 代表交互效验值,Exp 代表实验观测值,Cal. 代表计算值,,Er% 代表相对误差。在给出的量中,R 代表相关系数,SD 代表标准方差,F 代表 F 统计值,U 代表回归平方和,Q 代表残差平方和。

利用保留值第一组数据,用矢量 V 建立它的 MLR 回归方程以及交互效验的相关统计结果为:

表 2 优化后的保留指数估计值与实验观测值的对比

样本名称	V_1	V_2	V_3	V_4	V_5	V_6	V_7	V_8	V_9	V_{10}	Exp.	Cal.	Err%
甲醇	1.5645	0	0	0	0	0	0	0	0	0	373.0	377.7514	1.27
乙醇	0.3627	2.5645	0	0	0	0	0	0	0	0	439.0	481.5485	9.69
正丙醇	0.1573	3.1772	0	0	1.0000	0	0	0	0	0	544.0	576.6650	6.00
正丁醇	0.0874	3.4457	0	0	2.2500	0	0	0	0	0	650.0	671.6007	3.32
正戊醇	0.0555	3.5956	0	0	3.6111	0	0	0	0	0	751.0	767.3524	2.18
正己醇	0.0384	3.6911	0	0	5.0347	0	0	0	0	0	856.0	863.9866	0.93
正庚醇	0.0281	3.7573	0	0	6.4983	0	0	0	0	0	960.0	961.4039	0.15
正辛醇	0.0215	3.8058	0	0	7.9897	0	0	0	0	0	1064.0	1059.4894	-0.42
正壬醇	0.0169	3.8428	0	0	9.5015	0	0	0	0	0	1166.0	1158.1404	-0.67
正癸醇	0.0137	3.8721	0	0	11.0289	0	0	0	0	0	1264.0	1257.2705	-0.53
2-丙醇	0.9754	0	3.5645	0	0	0	0	0	0	0	477.0	478.0874	0.23
2-丁醇	0.6311	1.6127	2.8145	0	0	1.0000	0	0	0	0	586.0	584.4679	-0.26
2-戊醇	0.5126	2.1311	2.6757	0	1.0000	1.2500	0	0	0	0	689.0	683.1029	-0.86
2-己醇	0.4582	2.3921	2.6270	0	2.2500	1.3611	0	0	0	0	787.0	780.9745	-0.77
2-庚醇	0.4289	2.5502	2.6045	0	3.6111	1.4236	0	0	0	0	889.0	879.0391	-1.12
2-壬醇	0.3998	2.7326	2.5850	0	6.4983	1.4914	0	0	0	0	1091.0	1076.3846	-1.34
3-戊醇	0.3771	2.9476	2.0645	0	0.2500	2.0000	0	0	0	0	689.0	692.1955	0.46
3-己醇	0.2847	3.3688	1.9257	0	1.3611	2.2500	0	0	0	0	785.0	792.3491	0.94
3-庚醇	0.2406	3.5848	1.8770	0	2.6736	2.3611	0	0	0	0	886.0	891.4777	0.62
4-庚醇	0.2026	3.7450	1.7868	0	2.5347	2.5000	0	0	0	0	880.0	893.7601	1.56
4-辛醇	0.1634	3.9366	1.7382	0	3.8872	2.6111	0	0	0	0	982.0	993.8955	1.21
2-甲基-1-丙醇	0.5647	2.0645	2.3627	0	0	1.0000	0	0	0	0	612.0	595.8720	-2.64
2-甲基-1-丁醇	0.3558	3.3330	1.6127	0	0.2500	2.0000	0	0	0	0	727.0	702.0718	-3.43
2-甲基-1-戊醇	0.2753	3.7329	1.4738	0	1.3611	2.2500	0	0	0	0	824.0	801.5236	-2.73
2-甲基-2-丁醇	1.3549	1.8627	0	3.8145	0	0	1.0000	0	0	0	628.0	610.0418	-2.86
2-甲基-2-戊醇	1.1878	2.4922	0	3.6757	1.0000	0	1.2500	0	0	0	726.0	720.8974	-0.70
2-甲基-2-己醇	1.1109	2.8157	0	3.6270	2.2500	0	1.3611	0	0	0	822.0	824.7875	0.34
2-甲基-2-庚醇	1.0693	3.0138	0	3.6045	3.6111	0	1.4236	0	0	0	920.0	926.5192	0.71
2-甲基-3-己醇	0.7320	2.1172	4.6009	0	1.0000	1.6111	0	1.0000	0	0	858.0	862.7152	0.55
3-甲基-1-丁醇	0.4248	2.6495	2.1573	0	1.0000	1.2500	0	0	0	0	725.0	695.2372	-4.11
4-甲基-1-戊醇	0.3611	2.9318	2.0874	0	2.2500	1.3611	0	0	0	0	827.0	793.1295	-4.10
2-乙基-1-丁醇	0.2373	4.3236	0.8627	0	0.7500	3.0000	0	0	0	0	834.0	809.6177	-2.92
2-乙基-1-己醇	0.1536	4.7879	0.6752	0	3.3472	3.3611	0	0	0	0	1019.0	1010.5983	-0.82
3-乙基-3-戊醇	0.1736	4.6715	0.6573	0	1.9722	3.2500	0	0	0	0	853.0	910.6168	6.75
2,2-二甲基-3-戊醇	1.5667	1.6960	2.5645	3.4738	0	1.0000	0.2500	0	1.0000	0	814.0	808.3065	-0.70
2,2-二甲基-3-己醇	1.4293	2.2908	2.4257	3.4252	1.0000	1.2500	0.3611	0	1.0000	0	906.0	916.5979	1.17
1-戊烯-3-醇	0.1573	1.6123	2.3190	0	0.1271	2.8947	0	1.1437	0	0	675.0	683.4185	1.25
1-己烯-3-醇	0.0874	1.9938	2.1287	0	1.1961	3.2608	0	1.1437	0	0	771.0	781.9282	1.42
1-庚烯-3-醇	0.0555	2.1787	2.0565	0	2.4895	3.4365	0	1.1437	0	0	872.0	879.8799	0.90
1-辛烯-3-醇	0.0384	2.2887	2.0214	0	3.8802	3.5400	0	1.1437	0	0	972.0	978.0804	0.63
2-丁烯-1-醇	0.1002	1.6977	2.0195	0	0	1.4506	0	1.3208	0	0	664.0	621.4251	-6.41
3-己烯-1-醇	0.0420	3.1051	0.6554	40	1.2047	3.2953	0	1.3208	0	0	850.0	818.5560	-3.70
3-庚烯-1-醇	0.0303	3.3560	0.4464	0	2.3206	3.6894	0	1.3208	0	0	941.0	914.8095	-2.78
2-甲基-3-丁烯-2-醇	0.9754	0.4347	0.9225	3.5645	0	1.3208	0.3069	0	1.1437	0	606.0	620.4928	2.39
3-甲基-3-丁烯-1-醇	0.0935	2.7382	0	1.3082	1.4340	0	2.7316	0	0	0	730.0	723.8986	-0.84
2-甲基-1-庚烯-3-醇	0.2568	2.7159	1.9130	1.5732	2.4895	1.6680	1.7685	0	1.1437	0	960.0	1005.1025	4.70
里哪醇(芳樟醇)	0.7933	1.6447	1.4863	5.0445	1.1961	3.1592	2.0226	0.0668	2.6251	0.0691	1090.0	1108.9823	1.74

续表2

样本名称	V_1	V_2	V_3	V_4	V_5	V_6	V_7	V_8	V_9	V_{10}	Exp.	Cal.	Err%
异蒲勒醇	0.567 8	1.690 7	6.257 7	0	1.361 1	5.583 3	0	2.673 6	0	0	1 141.0	1 174.382 8	2.93
萜烯醇 a	1.078 1	1.511 9	1.460 6	4.899 6	1.383 2	3.827 7	2.328 8	0.267 1	2.564 0	0.069 1	1 181.0	1 180.659 3	-0.03
香茅醇	0.480 0	3.306 4	1.963 9	2.360 5	2.534 7	4.016 0	4.506 9	0.116 1	1.390 0	0		1 140.570 6	
橙花醇	0.498 8	2.724 1	1.486 1	3.781 1	1.204 7	3.034 2	2.184 1	0.071 5	2.810 0	0.071 5	1221.0	1 174.699 0	-3.79
牻牛儿醇	0.733 5	0.687 4	4.419 5	2.343 0	1.000 0	3.460 2	0.433 9	3.001 0	1.471 8	0		1 138.596 7	
丁子香醇	0.106 5	2.001 5	1.154 6	2.873 2	0.456 8	4.182 1	3.998 0	2.004 9	6.681 4	1.670 7	1 355.0	1 356.210 5	0.09
萜烯醇 b	0.431 8	2.516 1	0.435 9	3.848 5	3.114 5	2.806 9	4.630 4	0	1.254 8	0.064 6		1 203.466 1	
萜烯醇 c	0.793 3	2.580 8	0	5.813 2	2.778 7	0	6.189 4	0	0	1.506 0		828.695 1	

2.2 逐步回归模型

在上述的多元回归分析中 10 个自变量全部是同

时进入方程的。运用逐步回归方法对 MEDV 矢量与化合物保留时间进行建模。逐步回归的结果见表 3。

表3 逐步回归 V 中所选元素的 MLR 建模与交互效验结果

00	01	02	03	04	05	06	07	08	09	10	R	SD	F	U	Q	R_{cv}	SD _{cv}	F _{cv}	U _{cv}	Q _{cv}
24.8	36.82	70.79	23.18	13.06	63.56	38.44	52.21	68.18	91.89	-176.29	1.00	23.61	396.52	220 936 4.25	222 87.75	0.17	215.59	0.80	372 420.63	1859231.38
195.51	0.00	0.00	0.00	0.00	49.26	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.57	193.90	1.94	727 809.00	150 384 3.00	0.29	180.37	19.59	637 451.25	159 420 0.75
-590.15	0.00	0.00	0.00	0.00	62.05	91.59	0.00	0.00	0.00	0.00	0.84	129.85	9.24	155 718 4.38	674 467.63	0.66	125.73	46.59	147 292 3.00	758 728.94
-490.01	0.00	0.00	0.00	0.00	67.58	85.30	108.89	0.00	0.00	0.00	0.95	75.64	35.00	200 278 4.00	228 868.00	0.88	76.19	112.47	195 879 1.50	272 860.50
-577.40	0.00	0.00	0.00	28.12	70.20	89.26	72.42	0.00	0.00	0.00	0.96	67.73	44.65	204 817 2.25	183 479.75	0.88	74.72	88.43	197 483 8.25	256 813.70
-716.40	0.00	0.00	27.36	28.95	73.98	78.09	83.13	0.00	0.00	0.00	0.97	59.32	59.42	209 090 1.13	140 750.88	0.90	68.83	85.21	201 846 7.63	213 184.34
-1182.30	0.00	43.30	45.06	36.91	66.92	66.66	86.81	0.00	0.00	0.00	0.98	47.45	95.11	214 158 4.50	900 67.50	0.92	62.11	89.09	206 193 2.13	169 719.83
-174.57	0.00	52.19	47.03	36.29	64.86	54.81	42.74	0.00	48.59	0.00	0.99	33.96	189.48	218 551 4.00	461 38.00	0.97	39.43	198.92	216 480 1.25	668 50.65
-215.25	0.00	62.43	48.23	41.92	63.24	43.57	35.38	37.11	50.08	0.00	0.99	29.76	248.06	219 623 7.25	354 14.75	0.97	42.51	149.15	215 576 8.00	758 84.10
-287.65	49.43	68.17	44.84	30.49	64.71	46.53	43.23	41.99	52.14	0.00	0.99	27.70	286.82	220 095 7.25	306 94.75	0.94	55.99	74.54	210 311 4.25	128 537.71

4 结论

用 MEDV 矢量对 55 个醇的分子进行了结构表征,编码方法简便易行,借助多元线性回归分析和逐步回归分析,对其气相色谱保留时间建立了定量结构-色谱保留值关系。线性回归 10 参数模型的复相关系数达到了 0.995 0,逐步回归 7 参数模型复相关系数为 0.989 6,交互检验的 R_{cv} 值为 0.970 0,表明模型对样本具有一定的稳定性和预测能力。但模型的交互检验预测的复相关系数为 0.166 9,说明该模型可能存在明显的过拟合现象。

参考文献:

- [1] MIYASHITA Y, LI Z, SASAKI S. Chemical pattern recognition and multivariate analysis for QSAR studies[J]. *Trend Anal Chem*, (TrAC), 1993, 12 (2): 50-60.
- [2] 李志良. 定量构效关系与研究进展[J]. *化学通报*, 1995, (9): 5-10.
- [3] KANG J, CAO C, LI Z. Quantitative structure-retention relationship for predicting the gas chromatography retention indices of polycyclic aromatic hydrocarbons. quasi-length of carbon chain and pseudo-conjugated system surface[J]. *Chromatogr*, 1998, 799(2): 361-367.
- [4] 孙传经. 气相色谱分析原理与技术[M]. 北京: 化学工业

出版社, 1979.

- [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. 272-276.
- [6] LIU S S, CAO C, LI Z L. Approach to estimation and prediction for normal boiling point (NBP) of alkanes based on a novel molecular distance-edge (MDEV) vector[J]. *Chem Inf Comput Sci*, 1998, 38(3): 387-394.
- [7] 刘树深, 刘堰, 李志良, 等. 一个新的分子电性距离矢量 (MEDV) [J]. *化学学报*, 2000, 11: 1 353-1 357.
- [8] 成都科学技术大学分析化学教研室编. 分析化学手册, 第四分册 (上册) [M]. 北京: 化学工业出版社, 1984. 445-460.
- [9] 周丽平, 李伯玉, 何梅, 等. 多环芳烃分子结构的矩边矢量表达及其气相色谱保留指数预测[J]. *色谱*, 2001, 19(1): 25-31.
- [10] 李志良, 林治华, 刘树深. 多环芳烃气相色谱保留指数预测与估算[J]. *分析化学*, 2001, 29(8): 885-889.
- [11] 李志良, 林治华, 刘树深. 多氯代二苯并呋喃在不同色谱柱上的气相色谱保留行为[J]. *色谱*, 2001, 19(2): 116-123.
- [12] 李志良, 林治华, 刘树深. 寡肽结构参数化及定量构效关系研究[J]. *化学学报*, 2001, 59(7): 1 001-1 008.
- [13] 尹敬执, 申泮文. 基础无机化学[M]. 北京: 人民教育出版社, 1980. 46-54.

(下转第 123 页)

Capacity Design Measure in Seismic Design of RC Mega-Frame Structures

DUAN Hong-xia, LI Zheng-liang

(College of Civil Engineering, Chongqing University, Chongqing 400030, China)

Abstract: It provides several typical mega plane frame designs on condition that the variables are the combination of varying amplification factors of moment at bottom sections of ground floor columns of the minor frame on the major beams. The elastic-plastic dynamic analysis program Drain-2d+ of the plane structure is used to get elastic-plastic time-history analysis for each typical mega frame under the action of seism. The authors obtain the information of the mechanical transmutation characteristics, the emergency of the plastic hinge and the weak point of the whole structure under the action of seism, from which the correct thinking of how to obtain the design value of amplification factors of moments at bottom sections of ground floor columns of the minor frame on the major beams is found. The reasonable design values are recommended in order to provide some suggestions for the design of the reinforced concrete mega-frame structure.

Key words: reinforced concrete mega-frame structure; elastic-plastic time-history analysis; capacity design; amplification factor of moments at bottom section of column

(编辑 姚 飞)

(上接第 109 页)

Estimation and Prediction of Chromatography Retention Indices of Alcohol Gas by Molecular Electronegativity-distance Vector

FU Shi-ping¹, WANG Yuan-qiang²

(1. Department of Chemistry, Chongqing Normal University, Chongqing 400047, China;

2. College of Chemistry and Chemical Engineering College of Chongqing University, Chongqing 400030, China)

Abstract: The MEDV descriptor used to characterize the 55 alcohols is employed to establish the quantitative structure-retention relationship between the vector and its chromatography retention indices. By means of alternative tests of MLR and SMR, establish the Quatitative structure-retention relationship (QSRR) within the vector of molecular electronegativity distance and the gas chromatography of 55 compounds. The correlation coefficient of the ten-variable models obtained from MLR is 0.995 0, and that of the 7-variable model obtained from SMR is 0.989 6, The value of R_{CV} in LOO is 0.970 0. The results show the constructed models are provided with estimation stability and favorable predictive ability.

Key words: vector of molecular electronegativity distance; alcohol; quantitative structure-retention relationship

(编辑 吕赛英)