

价电子能级连接性指数及其应用

冯长君*

(徐州教育学院化学系, 徐州 221006)

0691

价电子能级连接性指数(1E)被定义为: ${}^1E = \Sigma(m_1 \cdot m_2 \cdots)^{-0.5}$, m 为价电子能级值。其中 0, 1 阶指数公式分别为: ${}^0E = \Sigma(m_i)^{-0.5}$, ${}^1E = \Sigma(m_i \cdot m_j)^{-0.5}$ 。 0E 、 1E 与化合物的总键能(ΔE)、晶格能(U)、标准生成焓($\Delta_f H_m^\ominus$)以及非金属氢化物的 pK_a 呈现高度相关性。它们的线性回归方程为: $\Delta E = -48.0095 + 1402.9463{}^1E$, $r = 0.9474$, $U = -328.0770 + 1541.9351{}^1E$, $r = 0.9801$, $-\Delta_f H_m^\ominus = -266.9299 + 1324.6461{}^1E$, $r = 0.9509$, $pK_a = -20.9723 + 28.1756{}^1E$, $r = 0.98884$, $pK_a = -14.6102 - 7.835{}^0E + 40.6461{}^1E$, $R = 0.9933$ 。 m 、 1E 具有物理意义明确、计算方法简单等优点, 而且预测结果令人满意。

关键词:	价电子能级连接性指数	总键能	晶格能	标准生成焓
	pK_a			
分类号:	Q614.2			

拓扑指数法在分子结构与其性质的关系的研究领域中发挥着重要作用^[1,2]。所谓拓扑指数, 是用来表征分子拓扑图某种特征的不变量, 由此实现分子结构信息的数值化。自 1947 年 Wiener^[3] 指数以来, 迄今已报道的拓扑指数已逾百种^[4~6]。其中最著名的是 Randić^[7] 连接性指数。它们多以有机物(主要是碳氢化合物)为研究对象, 而适用于无机物的定量结构与性质相关性(QSPR)研究的很少^[8,9]。我们将 Randić 指数的核心概念 δ_i (称为点价) 发展为成键原子的价电子能级值(m), 在保留 Randić 指数的计算形式的基础上, 提出一种新的拓扑指数——价电子能级拓扑指数(1E)。它不仅物理意义明确、计算方法简单, 而且与无机物的多种理化性质呈现高度相关性, 所建立的回归方程, 都在 $\alpha = 0.01$ 水平下, 通过 F 检验。

1 价电子能级连接性指数

Randić 指数的 0 阶指数(0X)、1 阶指数(1X)的计算公式为:

$${}^0X = \Sigma(\delta_i)^{-0.5} \tag{1}$$

$${}^1X = \Sigma(\delta_i \cdot \delta_j)^{-0.5} \tag{2}$$

它只适用于碳氢化合物性质的预测。

作者认为, 成键原子在无机物分子中的特性主要取决于其价电子能级(m_i) 高低, 因此将 Randić 的 δ_i 修正为 m_i , 并按照 Randić 指数的计算形式建构价电子能级连接性指数, 以“ 1E ”表示, 定义为若干个成键原子的价电子能级值乘积的平方根倒数之和:

收稿日期: 1998-08-24, 收修改稿日期: 1998-01-06。

* 通讯联系人。

第一作者: 冯长君, 男, 44 岁, 副教授; 研究方向: 拓扑指数与无机物、有机物理化学性质的相关回归分析(属化学计量学)。

$$E = \sum (m_1 \cdot m_2 \cdot m_3 \cdot \dots)^{1/f} \quad (3)$$

它是一个系列,由 0、1、…、 f 阶指数组成。其中 0 阶指数(0E)、1 阶指数(1E)的公式为:

$${}^0E = \sum (m_i)^{-1} \quad (4)$$

$${}^1E = \sum (m_i \cdot m_j)^{-1/2} \quad (5)$$

式(4)中“ \sum ”是对分子中所有的成键原子求和,式(5)中“ \sum ”是对分子中全部的化学单键求和,式中“ m ”为成键原子 i 的价电子能级值,按徐光宪^[10]的 nl 规则确定,即:

$$m_i = n - 0.7l \quad (6)$$

若成键原子的价电子为多种类型,应以各类价电子能级值的加权算术平均数 \bar{m}_i 代入计算。

例如 SiCl_4 : Si 原子的价电子为 $3s^2 3p^2$, s 与 p 电子能级值为 3.0 和 3.7, 其加权平均数为 3.35, Cl 原子的价电子为 $3s^2 3p^5$, 其能级值平均数为 3.50。 SiCl_4 的 0E 、 1E 值为:

$${}^0E = (3.35)^{-4} + 4 \times (3.50)^{-6.5} = 2.6844$$

$${}^1E = 4 \times (3.35 \times 3.50)^{-6.5} = 1.1682$$

由于 $m_i \geq 1$, 根据(3)、(4)、(5)式可知对同一分子的 1E 值,随 f 值增大而迅速减小。对于同类型分子,其 m 越大, 1E 值越小。

我们主要讨论 0E 、 1E 的含义及应用。 0E 或 1E 蕴含分子结构的以下信息:

(1) 反映分子尺寸: 原子的成键电子能级越高,其 n 越大,具有的电子层越多,原子半径越大,形成的分子的体积越大,而 0E 或 1E 越小。即对于同类型分子, 0E 或 1E 与分子大小负相关,如 SiF_4 的 ${}^1E = 1.3822$, 其分子体积小于 SiCl_4 。

(2) 反映键或分子的极性: 根据文献^[11]给出元素的 Pauling 电负性与有效主量子数 n^* 呈高度负相关,而 n^* 与主量子数 n 的关系^[12]为:

$n =$	1	2	3	4	5	6	7
$n^* =$	0.85	1.99	2.89	3.45	3.85	4.36	4.99

故可推论 m 与 Pauling 电负性也是负相关。对于 A—B 键,若 m_A 或 m_B 不同,形成极性键两者差值越大或越小(不含零),键的极性越大。如 BrCl 和 ICl 或 NaCl 与 NaBr 。对于同类型的极性分子, 0E 或 1E 值越大,其分子极性越强。但是,如果 AB_x 型分子的结构对称为非极性分子, 1E 或 0E 值只反映 A—B 键的极性。

(3) 反映分子的形状: 对于 AB_x 型分子, x 值不同,分子的形状不同。如 PCl_2 与 PCl_3 。显然,它们的 0E 或 1E 值也不同。

(4) 反映键能大小及分子稳定性: 根据原子轨道线性组合的能量近似原则, m_A 与 m_B 愈相近,组成的分子轨道愈有效,其键能通常较大。又因为 m 越大,原子半径越大,形成 A—B 键的键长越长,键能越小。因此, 0E 或 1E 与键能正相关。 0E 或 1E 越大的分子,其总键能(1E)越大,相应分子的稳定性越高。

2 0E 、 1E 与化合物总键能的相关分析

按(4)、(5)式计算文献^[11]中 56 种化合物及单质的 0E 、 1E 值,将 0E 、 1E 分别与这 56 种化合物及单质的总键能(1E)作图,均近似为直线。用最小二乘法拟合其直线回归方程为:

$${}^1E = -446.3968 + 745.7110 {}^0E \quad (7)$$

$$n = 56, r = 0.9317, F = 355.08$$

$$\Delta E = -48.0095 + 1402.9463^1 E \quad (8)$$

$$n = 56, r = 0.9474(0.9444), F = 472.83$$

括号中为文献^[11]的相关系数值, 笔者按其 X 计算约为 0.9441。可见, $^1 E$ 与 ΔE 的相关性优于 λ , $^1 E$ 对 ΔE 的估算值与其实验值基本吻合(见表 1)。

表 1 主族元素 AB_n 型化合物的 $^0 E$ 、 $^1 E$ 与总键能(ΔE)

Table 1 $^0 E$ 、 $^1 E$ and ΔE of Some AB_n Molecules in Main Group Elements

AB_n	$^0 E$	$^1 E$	$\Delta E / (\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1})$		AB_n	$^0 E$	$^1 E$	$\Delta E / (\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1})$	
			Exp.	Cal.				Exp.	Cal.
LiCl	1.2416	0.3780	486.16	482.30	I ₂	0.8528	0.1818	150.48	207.05
LiBr	1.1785	0.3333	418.00	419.59	NaF	1.2098	0.3651	476.52	464.21
LiI	1.1335	0.3015	355.30	374.98	MgF	1.2098	0.3651	447.26	464.21
BeF	1.3396	0.4472	518.32	579.39	AlF	1.1886	0.3517	664.62	445.11
BI	1.0956	0.2853	434.72	352.25	SIF	1.1809	0.3455	543.40	436.71
BO	1.3059	0.4261	723.14	549.79	BN	1.3120	0.4301	635.36	555.40
CF	1.2848	0.4126	530.68	530.85	NaCl	1.1119	0.3086	409.64	384.94
CSi	1.1987	0.3564	434.72	452.00	NaBr	1.0488	0.2722	363.66	333.87
CP	1.1931	0.3527	585.20	446.81	NaI	1.0038	0.2462	305.14	297.40
CS	1.1894	0.3504	731.50	443.58	MgCl	1.1119	0.3086	263.34	384.94
CBr	1.1237	0.3075	401.28	383.40	MgBr	1.0488	0.2722	246.62	333.87
NBr	1.1142	0.3030	280.06	377.08	AlCl	1.0907	0.2973	493.24	369.09
MgO	1.2141	0.4502	392.92	583.60	AlBr	1.0275	0.2622	447.26	319.84
AlO	1.1928	0.3541	501.60	448.77	AlI	0.9825	0.2371	367.84	284.63
SiCl	1.0809	0.2920	321.86	361.65	BrCl	1.0059	0.2520	221.54	305.53
SiBr	1.0178	0.2576	292.60	313.39	ICl	0.9609	0.2279	213.18	271.72
PS	1.0778	0.2904	292.60	359.41	IBr	0.8978	0.2010	179.74	233.98
BF ₃	2.5665	1.2696	2018.90	1733.17	AsBr ₃	1.8899	0.6727	764.94	895.75
AlF ₃	2.4535	1.0552	1843.40	1432.38	InBr ₃	1.8513	0.6182	865.26	819.29
BCl ₃	2.2727	1.0730	1454.60	1457.35	SbBr ₃	1.8438	0.6075	790.02	804.28
PCl ₃	2.1443	0.8671	953.04	1168.49	SiF ₄	3.0762	1.3822	2340.80	1891.14
GaCl ₃	2.0896	0.7794	840.18	1045.45	SiCl ₄	2.6844	1.1682	1605.10	1590.91
AsCl ₃	2.0792	0.7627	927.96	1022.02	GeCl ₄	2.6176	1.0251	1354.30	1390.15
SbCl ₃	2.0331	0.6888	940.50	918.34	SnCl ₄	2.5704	0.9244	1254.00	1248.87
BBr ₃	2.0834	0.9463	1103.50	1279.60	CBr ₄	2.5379	1.1926	1086.80	1625.14
AlBr ₃	1.9703	0.7865	1091.00	1055.41	SiBr ₄	2.4320	1.0302	1320.90	1397.31
PBr ₃	1.9550	0.7647	790.02	1024.82	GeBr ₄	2.3651	0.9041	1120.20	1220.39
GaBr ₃	1.9002	0.6873	902.88	916.24	SnBr ₄	2.3180	0.8152	1086.80	1095.67

3 $^0 E$ 、 $^1 E$ 与卤化物晶格能的相关分析

将文献^[11]中的 20 种碱金属卤化物晶格能(U)与其 $^0 E$ 、 $^1 E$ 关联, 建立的线性回归方程如下:

$$U = -83.3143 + 796.4387^0 E \quad (9)$$

$$n=20, r=0.9661, F=252.39$$

$$U=328.0770+1541.9315^1E \quad (10)$$

$$n=20, r=0.9801, F=438.85$$

$$U=539.8010=401.2300^0E+2302.3131^1E \quad (11)$$

$$n=20, R=0.9818, F=227.69$$

按(11)式的计算值见表 2。由于引入 0E 而使相关性得到改善。

表 2 碱金属卤化物晶格能的实验值与计算值

Table 2 Experimental and Calculated Values of Lattice Energies (U) of Alkali halogenides

MX	0E	1E	$U/(kJ \cdot mol^{-1})$		MX	0E	1E	$U/(kJ \cdot mol^{-1})$	
			Exp.	Cal.				Exp.	Cal.
LiF	1.3396	0.4472	1049.0	1031.9	LiBr	1.1795	0.3333	818.5	834.3
NaF	1.2098	0.3651	927.7	895.0	NaBr	1.0488	0.2722	751.8	745.7
KF	1.1325	0.3162	825.9	813.4	KBr	0.9714	0.2357	688.6	692.7
RbF	1.0797	0.2828	788.9	757.7	RbBr	0.9186	0.2108	661	656.6
CsF	1.0407	0.2582	758.5	716.7	CsBr	0.8797	0.1925	635	630.0
LiCl	1.2416	0.3780	862.0	911.9	LiI	1.1335	0.3015	762.7	779.2
NaCl	1.1119	0.3086	786.8	804.2	NaI	1.0038	0.2462	703	703.9
KCl	1.0345	0.2673	716.8	740.1	KI	0.9264	0.2132	646.9	659.0
RbCl	0.9817	0.2390	687.9	696.2	RbI	0.8736	0.1907	625	628.3
CsCl	0.9428	0.2182	668.2	663.9	CsI	0.8346	0.1741	602	605.8

4 0E 、 1E 对 P 区氢化物 pK_a 的估算

无机氢化物在水溶液中的酸性强度以 pK_a 表示。将文献^[4]中的 13 种 P 区氢化物(AH_n)的 pK_a 与其 0E 、 1E 相关,拟合的线性方程为:

$$pK_a = -32.9451 + 16.8367^0E \quad (12)$$

$$n=13, r=0.9543, F=112.27$$

$$pK_a = -20.9723 + 28.1756^1E \quad (13)$$

$$n=13, r=0.98884(0.9365), F=484.61$$

$$pK_a = -14.6102 - 7.8358^0E + 40.6461^1E \quad (14)$$

$$n=13, R=0.9933, F=371.08$$

括号中为笔者按文献^[4]的 Y 值计算的相关系数值。 1E 与 pK_a 的相关性明显优于 X ,按^[4]式给出 pK_a 的计算值与其实验值非常吻合(见表 3)。在表 3 中还列入他人的研究成果,以便比较。

表 3 非金属氢化物酸性强度 pKa 的计算方法比较
Table 3 Comparison of Calculated Methods for Acidity Strength pKa of Nonmetal Hydrides

AH _n	⁰ E	¹ E	pKa Exp.	pKa Cal.				
				art.	doc. [14]	doc. [14]	doc. [15]	doc. [16]
HF	1.6325	0.6325	3.46	-1.69	-5.76	3.48	3.22	0.623
HCl	1.5345	0.5345	-6.10	-4.91	-5.76	-6.11	-4.27	-6.085
HBr	1.4714	0.4714	-9.00	-6.88	-5.76	-8.77	-6.92	-7.713
HJ	1.4264	0.4264	-11.00	-8.46	-5.76	-11.31	-8.14	-9.630
H ₂ O	2.6367	1.2734	16.00	16.49	8.28	16.67	15.74	20.41
H ₂ S	2.5371	1.0742	7.20	9.17	8.28	7.71	6.97	8.624
H ₂ Se	2.4732	0.9463	3.77	4.47	8.28	4.39	3.90	6.039
H ₂ Te	2.4277	0.8554	2.46	1.14	8.28	2.61	2.48	2.012
NH ₃	3.6438	1.9285	35.00	35.23	25.10	34.00	29.73	35.55
PH ₃	3.5407	1.6222	27.00	23.58	25.10	24.93	19.21	20.745
AsH ₃	3.4757	1.4270	>19.00	16.16	25.10	22.61	15.53	18.49
CH ₄	4.6523	2.6093	55.00	54.99	46.19	54.86	45.85	44.46
SiH ₄	4.5464	2.1854	>35.00	38.59	46.19	45.97	32.74	26.93
Σ pKa. Cal. - pKa. Exp. ÷ 13				1.9669	5.7746	1.5623	2.7377	3.0758

Annotation: 1. The "doc." is an abbreviation of document.

2. The "doc. [14]" is the calculated values with Y of doc. [14]

5 ⁰E、¹E 与卤化物标准生成焓的相关分析

将文献^[11]中 20 种过渡元素卤化物的标准生成焓(Δ_fH_m⁰)分别与其⁰E、¹E 关联, 建立的回归方程为:

$$-\Delta_f H_m^0 = -108.7360 + 216.0920^0 E^2 \quad (15)$$

$$n=20, R=0.9560, F=191.15$$

$$-\Delta_f H_m^0 = -266.9299 + 1324.6461^1 E^2 \quad (16)$$

$$n=20, R=0.9509(0.9530), F=170.04$$

括号中为文献^[11]的相关系数值, 笔者按其 X 计算为 0.9496。因此, ¹E 与 Δ_fH_m⁰ 的相关程度高于 X(见表 4)。

表 4 过渡元素卤化物标准生成焓与⁰E、¹E 的相关性
Table 4 Correlativity Between Δ_fH_m⁰ and ⁰E, ¹E of Transitional Element Halides

A _n X _n	⁰ E	¹ E	Δ _f H _m ⁰ / (kJ · mol ⁻¹)		A _n X _n	⁰ E	¹ E	Δ _f H _m ⁰ / (kJ · mol ⁻¹)	
			Exp.	16. Cal				Exp.	16. Cal
CrCl ₂	1.5494	0.5136	396	413	MnI ₂	0.9094	0.4119	248	279
CrCl ₃	2.0840	0.7703	563	753	AgBr	0.9069	0.2053	99.5	5
CoF ₂	1.7465	0.6092	665	540	AgI	0.8619	0.1857	62.4	-21
CoCl ₂	1.5507	0.5149	326	415	UF ₄	2.9047	1.4994	1850	1719
CuF ₂	1.7436	0.6055	531	535	HgI ₂	1.2502	0.3389	105	182
CuCl	1.0132	0.2559	135	72	CuBr	0.9501	0.3257	105	32
FeBr ₂	1.4251	0.4547	251	335	CuCl ₂	1.5478	0.5118	206	411
Hg ₂ Br ₂	1.3402	0.5325	207	438	CdF ₂	1.6979	0.5477	690	459
HgBr ₂	0.9428	0.3746	170	229	CdCl ₂	1.5021	0.4629	389	346
AgF	1.0680	0.2754	203	98	CdBr ₂	1.3758	0.4082	314	274

6 1E 对晶格能的预测

式(10)是根据 $Z_+ : Z_-$ 为 1 : 1 型碱金属卤化物推导而得的。对于非 1 : 1 型主族元素化合物的晶格能, 应引入正、负离子电荷数(绝对值)予以修正, 则 U 的计算通式为:

$$U = Z_+ \cdot \sqrt{Z_-} (328.0770 + 1541.9315 {}^1E) \quad (17)$$

如 Al_2O_3 的 $Z_+ = 3$, $Z_- = 2$, ${}^1E = 2.1246$, 代入(17)式得:

$$\begin{aligned} U &= 3 \times \sqrt{2} \times (328.0770 + 1541.9315 \times 2.1246) \\ &= 15291 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1} \end{aligned}$$

与其实验值 $15111 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ 基本吻合, 相对误差为 1.2%。对于 2 : 1, 2 : 2 型主族元素化合物晶格能的实验值^[17]与计算值见表 5, 两者较为吻合。

表 5 一些化合物晶格能的预测值

Table 5 Predicting Values of Lattice Energy for Some Compounds

A_nB_m	1E	$U / (\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1})$		U
		Exp.	Cal.	
MgF_2	0.7303	2939	2908	31
MgBr_2	0.5443	2399	2335	64
MgI_2	0.4924	2290	2175	115
CaF_2	0.6325	2609	2607	2
CaCl_2	0.5345	2227	2305	78
CaBr_2	0.4714	2131	2110	21
CaI_2	0.4264	2039	1971	68
MgO	0.7352	3923	4134	211
CaO	0.6367	3479	3705	226
Al_2O_3	2.1246	15111	15291	180

7 结果讨论

7.1 1E 揭示了影响键能大小的主要因素

由于 $m = n + 0.7l$, 使 m 蕴含成键原子的原子半径、电负性、价电子能级等信息。化学键的键长、键的极性以及成键电子的能级差等, 都是影响键能大小的重要因素。显然, 由 m 键构的 1E , 已蕴含了这些因素。由于能量通常具有线性加和性, 所以 1E 与化合物总键能呈现出良好的线性相关性。对键能的经验估算方法较多^[18], 但估算误差较大, 有的为实验值的 3~7 倍, 并且需要借助许多化学数据, 如元素电负性、化学键的离子性百分数、原子轨道重叠积分等, 而且计算公式很复杂。相比较, 本法则不需要查找任何化学数据, 1E 与估算公式的计算非常简单, 并且预测准确程度相对较高。

7.2 1E 揭示了影响晶格能的本质因素

从表 2、表 5 中的 U 值可见, 它正比于阴阳离子电荷数的乘积, 反比于离子的大小。在 1E 中蕴含离子大小和电荷数乘积为 1 (从式(10)的 r 很大可推出) 的因素。对于电荷数乘积不为 1 的而适应(17)式, 这就与离子电荷数乘积基本对应, 因此, 它的计算值能与实验值很好地吻合, 其

平均相对误差仅为 2.97%。

7.3 1E 揭示影响氢化物 pKa 的本质因素

考察 P 区氢化物在水溶液中酸性递变规律时发现,影响 pKa 的主要因素有三:一是分子构型;二是分子大小;三是分子所带的电荷数^[11]。这些因素在 1E 中均已蕴含;同样原子构成的分子,其 1E 值不同,则分子的构型必不同; 1E 与分子体积负相关;对于结构不对称的同类分子, 1E 与分子极性正相关,显然 1E 值越大,中心原子 A 上的部分负电荷越多, H 原子上部分正电荷也越多。笔者认为,影响 AH_n酸性的本质因素应是 A—H 键的键能,键能越小,键越易断裂,其水溶液酸性越强, pKa 值越小。前已述及 1E 与键能正相关,故 1E 与 pKa 正相关。事实正是如此:式(13)的 $b=28.18>0$, $r=0.98884$, 为高度正相关。由于 1E 揭示了影响 pKa 的本质因素,所以(13)式的估算优于其他方法(见表 3)。

7.4 1E 揭示了影响标准生成焓的主要因素

化合物的 $\Delta_f H_m^\ominus$ 与其成键数、键能正相关。如 AgBr 键能大于 AgI, 其 $-\Delta_f H_m^\ominus$ 也大于之。因此, 1E 与 $-\Delta_f H_m^\ominus$ 也呈高度正相关。

8 结 论

m 是表征成键原子在分子中行为的特征参数,其科学性源于徐光宪的 nl 规则——量子力学应用于多电子原子的结果。由 m 建构的价电子能级连接性指数 1E 是一种结构选择性、性质相关性俱佳的新的拓扑指数;涉及 100 余种分子,其 0E 、 1E 存在简并的很少; 1E 与化合物理化性质的相关性优于文献方法。 1E 具有 Randic 指数适用范围广的特点, 1E 与化合物的多种性质呈现优良的相关性便说明此点。 1E 反映分子结构信息程度随阶数(f)增大而提高。 1E 与化合物性质的相关程度高于 0E 。

此方法还具有不需查找任何化学数据、公式简洁、计算简单、使用方便等优点。

参 考 文 献

- [1] Dennis H. R. *J. Comput. Chem.*, 1987, 8, 470.
- [2] Hansen P. J., Jurs P. C. *J. Chem. Edu.*, 1988, 65, 574.
- [3] Wiener H. *J. Amer. Chem. Soc.*, 1947, 69, 17.
- [4] WANG Fu-An(王福安) *Introduction of Chemical Engineering Data*(化工数据导引), Beijing: Chemical Industry Press, 1995, p297.
- [5] YANG Jia-An(杨家安), JIANG Yuan-Sheng(江元生) *Huaxue Xuebao (Acta Chemical Sinica)*, 1983, 41, 884.
- [6] Kier L. B., Hall H. *Molecular Connectivity in Chemistry and Drug Research*, Academic Press, New York, 1976, 82.
- [7] Randic M. *J. Amer. Chem. Soc.*, 1975, 97, 6609.
- [8] LI Lin-Feng(李林峰), YOU Xiao-Zeng(游效曾) *Herue Tongliao (Chinese Science Bulletin)*, 1993, 38(5), 421.
- [9] ZHANG Hong-Guang(张宏光), XIN Hou-Wen(辛厚文) *Huaxue Wuli Xuebao (Chinese J. of Chem. Phys.)*, 1989, 2(6), 413.
- [10] X Guang-Xian(徐光宪) *Huaxue Tongliao (Chinese Chemistry)*, 1956, 22, 80.
- [11] YANG Feng(杨 锋), WANG Li-Ya(王利亚), YAN Xiao-Ci(颜肖慈) et al *Wuji Huaxue Xuebao (Chinese J. Inorg. Chem.)*, 1998, 14(2), 199.
- [12] Zhang Y. H. *Inorg. Chem.*, 1982, 21, 3886.

- [13] ZHENG Neng-Wu(郑能武), LIU Qing-Liang(刘清亮), LIU Shuang-Huai(刘双怀) *Inorganic Chemistry Principles* (无机化学原理), Hefei: China University of Science and Technology Press, 1988, p369.
- [14] YU Xun-Min(余训民), HANG Yi-Ping(杭义萍), MAO Ming-Xian(毛明现) et al *Huaxue Tongbao* (*Chinese Chemistry*), 1988, 1, 36.
- [15] Philip L. B. *J. Chem. Edu.*, 1983, 80, 546.
- [16] YANG Pin(杨 频) *Kexue Tongbao* (*Chinese Science Bulletin*), 1977, 22(9), 398.
- [17] ZHONG Gong-Du(周公度) *Inorganic Structure Chemistry* (无机结构化学), Beijing: Science Press, 1982, p282.
- [18] YANG Pin(杨 频), GAO Xiao-Hui(高孝恢) *Chemical Bonding and Structure-Property Relations* (性能—结构—化学键), Beijing: Higher Education Press, 1987, p121~124.

A MOLECULAR CONNECTIVITY INDEX OF VALENCE ENERGY LEVEL AND ITS APPLICATIONS

FENG Chang-Jun

(Department of Chemistry, Xuzhou Education College, Xuzhou 221006)

In this paper the molecular connectivity index of valence energy level is defined as ${}^1E = \sum(m_i \cdot m_j \cdots)^{-0.5}$, and m is an energy level value of valence electron in atom. Among them the formulas of zero, first topological index are ${}^0E = \sum(m_i)^{-0.5}$, ${}^1E = \sum(m_i \cdot m_j)^{-0.5}$ respectively. 0E and 1E have highly correlativity for total bond energies, lattice energies, standard enthalpies of formation of the compounds and pKa of the non-metal hydrides. Their linear regression equations are proposed as follow: ${}^1E = -48.0095 + 1402.9463{}^0E$, $r = 0.9474$, $U = -328.0770 + 1541.9351{}^1E$, $r = 0.9801$, $-\Delta_f H_m^\ominus = -266.9299 + 1324.6461{}^1E$, $r = 0.9509$, $\text{pKa} = -20.9723 + 28.1756{}^1E$, $r = 0.98884$, $\text{pKa} = -14.6102 - 7.835{}^0E + 40.6461{}^1E$, $R = 0.9933$. m and 1E have been demonstrated that the method possesses the advantage of easy computation and clear physical significance. The predicting results by 0E and 1E are also satisfactory.

Keywords: **molecular connectivity index of valence energy level** **total bond energy**
 lattice energy **standard enthalpy of formation** **pKa**