

# 应用拓扑指数预测化学性质

王化云 江元生

(吉林大学理论化学研究所, 长春 130023)

**摘要** 拓扑指数能够提炼出分子中很有价值的结构信息, 它已成功地用于模拟一系列的化学现象。拓扑指数的理论和应用的研究已引起国际学术界的广泛关注。在国内, 有关的研究刚刚起步。本文综述了常见拓扑指数的计算过程及其在结构/性质相关研究中的应用状况。

**关键词** 拓扑指数, 图论, 结构与性质相关

有机分子的拓扑指数应用研究是现代计算化学, 结构化学与量子化学相互交叉和结合的产物, 已成为当前信息化学的重要分支。

实验表明, 分子的许多性质首先受制于分子的拓扑结构-原子的连接性<sup>[1]</sup>。这些性质包括分子的宏观热力学性质, 如沸点、分子体积、折光率等, 也包括分子的微观特性<sup>[2-4]</sup>。除此之外, 生物活性也可以从分子拓扑加以解释<sup>[5]</sup>。这就启发化学家从一个侧面去总结结构与性质的定量相关关系。应用拓扑指数提炼分子信息要经过分子结构的图形化, 矩阵化和数值化三个步骤。

## 一、分子结构的图形化

### 1. 图论与化学的早期渗透

数学家 Cayley 第一个将图论中“树”的概念用于饱和链烃的异构体计数中。后来 Polya 提出有名的计数定理, 为异构体研究和寻找提供了理论工具。图用于表征分子, 称为分子图<sup>[6]</sup>。它的出现推动了分子结构表征的发展进程。

### 2. 图的基本概念和术语

图是描述给定分子拓扑性的一个数学结构, 它与数学上用于记录和显示数据的图不同。图由一组点和一组连结点的边组成。图中顶点表示原子, 边表示分子中的化学键, 每个分子都有相应的图。图 1 给出了丙烷和苯的分子图。利用图反映分子拓扑结构时, 重点在于强调原子间的互连方式, 它决定分子的最终构造<sup>[6]</sup>。在

分子图中, 分子的实际三维形状, 连结原子的化学键的类别、长度、键角等都不重要。关键是分子中有多少个原子, 每个原子连接多少个其它原子, 原子是连接成单一的直链还是带有支链, 是否成环等。化学图中通常省略氢原子, 因为它对分析问题及最后结果不起原则作用。

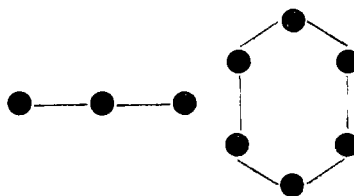


图 1 丙烷和苯的分子图

分子图是分子中原子键合的抽象, 它提供了用图论来研究具体化学问题的基本数学模型。图论中所用到的许多术语与化学词汇可以做到一一对应(见表 1)。

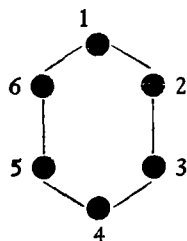
表 1 用于描述图论概念的相当的数学名称和化学名称

数学名称	化学名称	数学名称	化学名称
顶点	原子	圈数	环数
边	化学键	本征多项式	特征多项式
化学图	结构式	邻接矩阵	拓扑矩阵
树图	无环分子	本征值	能级
二分图	交替分子	零本征值	非键能级
顶点度数	原子的化合价	正本征值	成键能级
* 顶点链	n-多烯	负本征值	反键能级
* 顶点回路	n-轮烯	谱理论	Hückel 理论

## 二、拓扑结构的矩阵描述

数学家 Sylvester 将分子图转化为矩阵的形式来表示分子的拓扑结构。矩阵是以数字的形式提供分子拓扑性的科学表达。这里仅讨论在表征化学结构时最有用的两种矩阵。

### 1. 邻接矩阵



$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

图 2 苯的分子图及其邻接矩阵

苯的分子图、原子编号及邻接矩阵。

### 2. 距离矩阵

Wiener<sup>[2]</sup> 在研究分子的加和性质时,以隐含的形式使用距离矩阵。对任一有  $n$  个顶点的图构成一个  $n \times n$  阶矩阵  $D$ , 矩阵元  $d_{ij}$  为:

$$d_{ij} = \begin{cases} d & d \text{ 为连接顶点 } i \text{ 和 } j \text{ 的最小边数} \\ \infty & \text{当顶点 } i \text{ 和 } j \text{ 不连通} \end{cases}$$

苯的距离矩阵见图 3,  $D$  也是对称的。

$$D = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 0 & 1 & 2 & 3 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 2 & 3 & 2 \\ 2 & 1 & 0 & 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 & 0 & 1 & 2 \\ 4 & 3 & 2 & 1 & 0 & 1 \\ 5 & 2 & 3 & 2 & 1 & 0 \\ 6 & 1 & 2 & 3 & 2 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

图 3 苯的距离矩阵

## 三、分子结构的数值化

化学结构本身是抽象的,难以定量描述,而它们的各种物理化学性质则表现为一定的数值。抽象的结构与用数值表达的性质间无法进行定量的关联。因此,对结构的数值表征的研究十分必要。通过对分子图的矩阵实施某种数

1936 年,邻接矩阵  $A$  开始被引入化学<sup>[7]</sup>。任一有  $n$  个顶点的图,可构成一个  $n \times n$  阶矩阵。矩阵元为:

$$a_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{当顶点 } i \text{ 与顶点 } j \text{ 相邻} \\ 0 & \text{当顶点 } i \text{ 与顶点 } j \text{ 相隔} \end{cases}$$

即当图中有一边相连,则在矩阵的相应位置记为 1,其它位置记为零,矩阵是对称的。图 2 为

字运算而获得的拓扑指数,建立了结构和一个无量纲数据间的一一对应,实现了结构的数字形式的表达。

自 1947 年第一个能表征分子的“支链性”的拓扑指数 Wiener 指数  $W$ <sup>[2]</sup> 提出后,又出现了 120 多个拓扑指数,但只有很小一部分与分子的性质有较好的相关性能<sup>[8]</sup>。本文就较为常用的几种拓扑指数的计算及应用进行总结。象大多数拓扑指数一样,它们都是建立在距离矩阵或邻接矩阵及其不变量的基础上。

### 1. 距离矩阵指数

(1) Wiener 指数  $W$  Wiener<sup>[2]</sup> 首先将分子结构绘成隐氢图(化学图),由图得到表示分子拓扑结构的距离矩阵,加和此矩阵的上三角矩阵元便得到 Wiener 指数  $W$ 。利用图 3,苯的 Wiener 指数为 27。

$$W = 1 + 2 + 3 + 2 + 1 + 1 + 2 + 3 + 2 + 1 + 2 + 3 + 1 + 2 + 1 = 27$$

Wiener 指数有较高的简并度。对于有较多碳原子的分子来说,  $W$  通常较大。Mekengan<sup>[9]</sup> 提出了一个改进方法,使得  $W$  对无穷大体系也能给出一个有限值,只要这类系统是由许多相同的有限基本单位构成。另外,采用 Hückel 加

权图<sup>[10]</sup>, Wiener 指数还可用于含杂原子体系。

Wiener 提出  $W$  指数后, 研究人员作了大量应用工作, 发现该指数与某些类型烃分子的性质如沸点<sup>[2]</sup>、临界常数、沾滞性、表面张力<sup>[11]</sup>、色谱保留时间<sup>[12]</sup>具有良好的相关性。Bonchev<sup>[10]</sup> 利用 Wiener 指数与单取代和双取代苯系列的色谱保留时间相关, 得到的回归方程为:

$$RI = (244 \pm 4)W^{(0.297 \pm 0.003)}$$

相关系数超过 0.999。近几年来, Mekenyan<sup>[13]</sup> 将此指数用于聚合物的熔点、沸点的预测, 这些聚合物包括聚四氟乙烯、聚己酰胺、聚乙烯对苯二酸等, 也取得满意的结果。

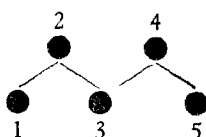
(2) Balaban 建立的指数 1983 年 Balaban 建立了两个以距离矩阵为基础的拓扑指数<sup>[13]</sup>, 平均距离矩阵指数  $D$  与平均距离总和连通性指数  $J$ , 分别定义为:

$$D = \left[ \sum_{d_i=1}^{d_i(\max)} g_i d_i^2 / \sum_{d_i=1}^{d_i(\max)} g_i \right]^{\frac{1}{2}} \quad (1)$$

$$J = q/u + 1 \sum_{i,j} (s_i s_j)^{-\frac{1}{2}} \quad (2)$$

其中  $d_i$  为边长,  $q_i$  为边长是  $d_i$  的边出现的次数,  $q$  为邻接边的数目,  $u = q - n + 1$  是环数,  $s_i$  为顶点  $i$  到所有顶点拓扑距离的和。

对正戊烷, 分子图为



距离矩阵

	1	2	3	4	5	$s_i$
1	0	1	2	3	4	10
2	1	0	1	2	3	7
3	2	1	0	1	2	6
4	3	2	1	0	1	7
5	4	3	2	1	0	10

边长 $d_i$	1	2	3	4
出现次数 $g_i$	4	3	2	1

$$D = \sqrt{\frac{4 \times 1^2 + 3 \times 2^2 + 2 \times 3^2 + 1 \times 4^2}{4 + 3 + 2 + 1}}$$

$$= 2.2361$$

$$J = 4 \times [(10 \times 7)^{-\frac{1}{2}} + (7 \times 6)^{-\frac{1}{2}} + (6 \times 7)^{-\frac{1}{2}} + (7 \times 10)^{-\frac{1}{2}}]$$

$$= 2.1908$$

$D$  具有较高的简并度。  $J$  是目前提出的拓扑指数中简并度最低的一个指数。对庚烷和辛烷异构系列的马达法辛烷值进行单变量相关, 采用  $D$  时, 相关系数分别为  $-0.949$  和  $-0.951$ 。利用  $J$  时, 相关系数分别为  $0.914$  和  $0.932$ <sup>[13]</sup>。 Hansen<sup>[14]</sup> 研究了  $J$  和分子图中独立环数之积与 93 种烃分子的煤烟量间的线性关系, 相关系数  $0.974$ 。

## 2. 邻接矩阵指数

建立在邻接矩阵基础上的最常用的拓扑指数是由 Randic<sup>[4]</sup> 提出的, 经量子化学家 Kier<sup>[5]</sup> 扩展的由一组指数组成的分子联接性指数。此指数可用于处理含环, 多重键和含杂原子的分子。自 1975 年以来, Kier 和 Hall 单独或合作共发表了近 40 篇关于分子联接性指数在定量结构与活性相关方面的研究论文<sup>[6]</sup>, 并有两本专著问世<sup>[15]</sup>。此指数是应用最广泛的一个拓扑指数。

Randic 指数  $\chi$  是分子联接性指数中最简单的指数, 定义为:

$$\chi = \sum (P_i P_j)^{-\frac{1}{2}} \quad (3)$$

$P_i, P_j$  为相邻点  $i$  和  $j$  的度数。这里仅就  $\chi$  在物化性质方面具有代表性的应用简单介绍于表 1 中。

实验表明<sup>[8]</sup>, Randic 指数能较好地反映取决于分子体积的性质, 而与分子形状决定的性质相关较差。分子联接性指数在生物学, 环境科学等领域均有很好的应用<sup>[15,16]</sup>。

## 3. 多项式指数

(1) Hosoya 指数 第一个建立在本征多项式基础上的拓扑指数是 1971 年 Hosoya<sup>[3]</sup> 提出的  $Z$  指数。

表 2 Randic 指数与不同物化性质相关结果举例<sup>[4]</sup>

性 质	回归方程	回归点数	体 系	相关系数
沸点	$t_B = 57.85X - 97.90$	51	烷烃	0.985
辛醇/水分配系数	$\lg P = 1.48 - 0.950X$	138	不同类有机物	0.986
水溶性	$\lg S = 6.702 - 2.666X$	51	链醇	0.987
色谱保留时间	$T_R = 482.12X - 559.60$	51	粗砂	0.991
土壤吸附	$\lg k = 0.550X - 0.450$	37	不同类有机物	0.973

$$Z = \sum_{K=0}^m P(G, K) \quad (4)$$

其中  $P(G, K)$  为化学图  $G$  中,  $K$  个边以不相邻状态出现的次数。当化学图为树形图时,  $Z$  可定义为本征多项式系数绝对值之和。Hosoya 指数象其它指数一样可用于多种物性数据的研究<sup>[8]</sup>, 包括碳氢化合物和取代烷烃的沸点, 烷烃熵的绝对值, 此外, 它还可以用于不饱和碳氢化合物  $\pi$  电子结构的研究。实验还表明, Hosoya 指数随其取代位置呈明显的交替变化(见图4), 因此, 此指数的显著特点是能反映取代烷烃沸点随取代位置变化的规律。

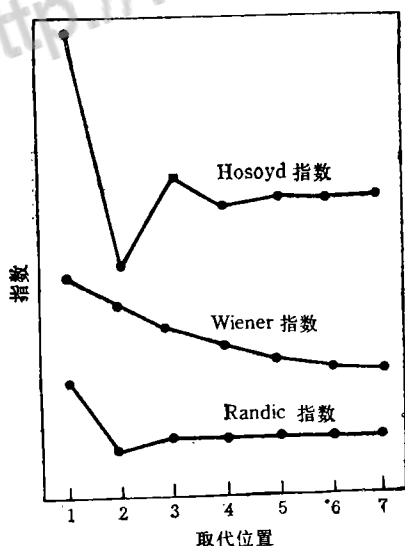


图 4 单取代十三烷的 Randic 指数, Wiener 指数, Hosoya 指数随其取代位置的变化

(2)  $a_N$  指数  $a_N$  是由分子图所确定的本征多项式的常数项。在 HMO 理论中,  $a_N$  构成一组环共轭异构体的相对稳定性的一种判据。但是, 对链状体系  $a_N$  只取两种数值, 0 或 1。

为使  $a_N$  值能够反映链状图的支化状况<sup>[11]</sup>, 针对饱和链烃相邻碳原子上的  $sp^3$  轨道, 并考虑了它们间的轴向定域成键作用(b)及一种非轴向次级微扰作用(c), 提出了饱和烃碳骨架衍



生图模型: 每个  $sp^3$  轨道对应一个顶点, 紧邻碳

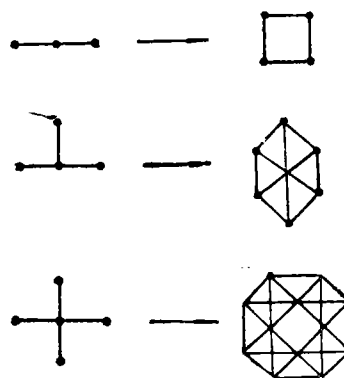


图 5 基本碳骨架和衍生图

原子的  $sp^3$  轨道的两种定域轨道作用对应两种不同权的边。由此每一个二, 三, 四度顶点分别衍生一个四、六、八元环。在图 5 中, 粗线代表轴向定域作用, 细线代表非轴向次级作用。复杂的树图是由这些基本片断构成的, 它们的衍生图则由上述四、六、八元环组成。图 4 显示了 2, 4, 4-三甲基己烷的衍生图。

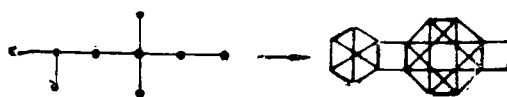


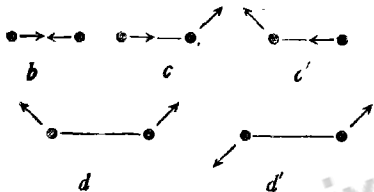
图 6 2, 4, 4-三甲基己烷的衍生图

定义衍生图本征多项式的常数项为  $a_N$  指数。此指数对 C<sub>1</sub> 以下饱和烃的沸点、密度、生成热、原子生成热、折光率和色谱指数等相关, 得到了形式统一的计算式,

$$R = A \lg a_N + B n_3 + C n_4 + D N + E \quad (5)$$

$R$  为某一热力学量,  $A, B, C, D, E$  相对每个  $R$  为一组常数,  $n_3, n_4$  代表顶点支化数,  $N$  为碳原子数, 对各热力学量的计算值和实验值相关系数均在 0.98 以上。

(3) 广义  $a_N$  指数 GAI 在  $a_N$  指数的基础上<sup>[18]</sup>, 提出了适合一般有机化合物的广义  $a_N$  指数, 在计算时考虑了轨道间轴向定域作用 (b) 和轨道的两种非轴向次级微扰作用 ( $c, d$ )。



这样, 对每个分子可以得到相邻原子轨道作用图 GOILA 和相邻原子间轨道作用矩阵 MOILA。以丁烷为例, 图 7 显示了丁烷 GOILA 和 MOILA 的获得。

对含有  $n$  个轨道的 GOILA, 将有一个  $n \times n$  阶的 MOILA 相对应。在 MOILA 中, 忽略非相邻原子的轨道作用, 矩阵的相应矩阵元位

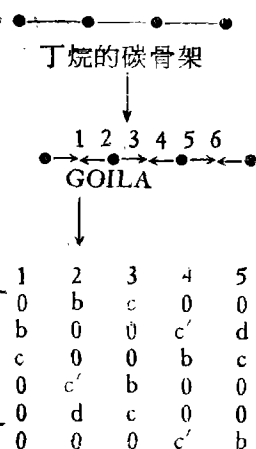


图 7 丁烷的碳骨架, GOILA 和 MOILA

置为零元素; 对相邻原子轨道, 根据轨道作用形式不同, 利用重迭积分的相对值估算轨道相互作用能的大小, 得到相应矩阵元  $b, c, c', d$  或  $d'$ 。显然此矩阵是关于对角线对称的, 对角线上的元素为相应轨道的相对能量。定义 MOILA 本征多项式常数项的绝对值为广义  $a_N$  指数 GAI。

GAI 的提出不仅解决了以往拓扑指数不能区分顺反异构体的困难, 而且能定量地反映顺反异构体的密度、折光率、沸点和分子折射度 (分别见表 2 和表 3)。将 GAI 应用于庚烷、辛烷系列马达法辛烷值, 有机磷萃取剂的密度、折光率、分子折射度、纸上层析比移值、泳动值、色

表 3 几种烯烃顺反异构体的 GAI 和物理性质<sup>[20]</sup>

化合物	GAI	B P	$n_D^{20}$	$d_4^{20}$	$n_D^{25}$	$d_4^{25}$	M R <sub>D</sub>
顺-5-癸烯	1.50028	169.5	1.4252	0.7445	1.4230	0.7406	48.22
反-5-癸烯	1.47495	170.2	1.4235	.7401	1.4213	.7363	48.34
顺-4-辛烯	1.68656	121.7	1.4136	.7205	1.4113	.7163	38.92
反-4-辛烯	1.65613	121.4	1.4116	.7147	1.4091	.7104	39.05
顺-3-辛烯	1.68611	122.3	1.4125	.7189	1.4101	.7147	38.91
反-3-辛烯	1.65627	122.4	1.4124	.7163	1.4100	.7121	39.04
顺-2-辛烯	1.69367	124.6	1.4139	—	—	—	—
反-2-辛烯	1.66414	123.4	1.4128	—	—	—	—
顺-3-己烯	1.89278	66.85	1.3934	.6796	1.3908	.6749	29.61
反-3-己烯	1.85864	67.5	1.3938	.6779	1.3912	.6730	29.72
顺-2-戊烯	2.01327	—	1.3828	.6554	—	—	—
反-2-戊烯	1.97818	—	1.3792	.6475	—	—	—
顺-2-丁烯	2.14145	3.7	—	—	—	—	—
反-2-丁烯	2.10539	0.88	—	—	—	—	—

表 4 烯烃的 GAI 与物理性质的相关分析结果<sup>[20]</sup>

物理性质	n	a	b	R	S
B.P.	12	-264.21	563.98	-0.997	4.671
$n_D^{20}$	12	-0.09	1.56	-0.981	0.003
$d_4^{20}$	10	-0.18	1.01	-0.981	0.007
$n_D^{25}$	8	-0.08	1.54	-0.981	0.003
$d_4^{25}$	8	-0.16	0.98	0.975	0.006
MR <sub>D</sub>	8	-47.46	118.56	-0.994	0.827

谱保留指数、萃取分配比等多种性质的研究,发现它们之间具有良好的单变量相关关系<sup>[18-20]</sup>。

拓扑指数在化学上应用的价值只是在最近几年才得以广泛承认,在其它方面的应用还有待进一步研究。如从分子拓扑结构出发寻找有效的描述分子体系的参量,改善物质的性能,以及进行可靠的常规预测都具有重要的研究价值。

## 参 考 文 献

- [1] D. H. Rouvray, *Chem. Britain*, 10, 11(1974).
- [2] H. Wiener, *J. Am. Chem. Soc.*, 69, 17(1947).
- [3] H. Hosoya, K. Kawasaki, *Bull. Chem. Soc. Jap.*, 45, 3415(1972).
- [4] M. Randic, *J. Am. Chem. Soc.*, 97, 6609(1975).
- [5] L. B. Kier, *J. Med. Chem.*, 18, 1272(1975).
- [6] D. H. Rouvray, *J. Chem. Educ.*, 768(1975).
- [7] A. T. Balaban, "Chem. Appl. Graph Theory", 1976.
- [8] D. H. Rouvray, *J. Comput. Chem.*, 8, 470(1987).
- [9] D. Mekenyan, *Eur. Polym. J.*, 19, 1135(1983).
- [10] R. S. Lall, V. K. Srivastava, *Math. Chem.*, 106, 602(1982).
- [11] D. H. Rouvray, *South Afr. J. Sci.*, 72, 74(1976).
- [12] D. Papazova, *J. Chromatogr.*, 188, 297(1980).
- [13] A. T. Balaban, *Pure Appl. Chem.*, 55, 199(1983).
- [14] M. P. Hanson, D. H. Rouvray, *J. Phys. Chem.*, 91, 2981(1987).
- [15] L. B. Kier, L. H. Hall, "Molecular Connectivity in Chemistry and Drug Research", New York: Academic Press, 1976; "Molecular Connectivity Structure Activity Analysis", New York, Wiley, 1986.
- [16] P. J. Hansen, P. C. Jurs, *J. Chem. Educ.*, 574(1983).
- [17] 杨家安、江元生, *化学学报*, 41, 884(1983).
- [18] 王化云、吕天雄、许禄等, *化学学报*, 48, 1159(1990).
- [19] 王化云、许禄、苏锵, *化学学报*, 49, 424(1991).
- [20] 王化云、许禄、苏锵, *化学学报*, 50, 22(1992).

## • 中国化学会通讯 •

## 第 24 届国际化学奥林匹克竞赛在美国举行

中国化学奥林匹克队,由领队程铁明教授、副领队段连运副教授,观察员范景玮高级工程师及四名中学生,应第 24 届国际化学奥林匹克组委会邀请,于 1992 年 7 月 11 日至 22 日赴美国匹兹堡、华盛顿参加了以“地球化学日”为题的化学竞赛活动。

在美国国家科学院的礼堂里,举行了隆重地颁奖仪式,我国选手接受了三名诺贝尔奖金获得者授予的奖牌和奖状。中国队员郑页(北京四中)获金牌第一名,沈珺(女,上海华东师大二附中)获金牌第六名,汤志浩(安徽合肥六中)获金牌第九名,林熹晨(山东省实验中学)获银牌第一名。当他们走上领奖台时,全场掌声雷动。在欢快的乐曲声中全体起立,各国师生向中国队员致以热烈地祝贺。本届竞赛由 33 个国家的 131 名中学生选手参加。中国选手在激烈地角逐中,沉着冷

静、发挥自如,顺利地完成了 5 个小时的化学实验考试和 4.5 小时的化学理论答卷,以团体总分第一、金牌得数第一(金牌总数设 16 枚)的优秀成绩,为祖国赢得了荣誉。台湾队首次参加化学竞赛,喜获一金、一银、一铜的好成绩。海峡两岸师生相互勉励,共同祝贺。

自 1987 年以来我国共组织参赛六届,派出参赛队员 24 名、共获奖牌 24 枚,其中金牌 16 枚、银牌 5 枚和铜牌 3 枚。国际化学奥林匹克竞赛活动,为早期发现和培养人才、为智力超群、热爱化学的中学生提供了一个展示才华的舞台。我国各省、市近年来已从几千人发展到几十万人参加到化学竞赛活动中来,同时对促进化学教育方法、教育内容、教育结构和教育体制的改革起到了促进作用。

(范景玮)



论文写作，论文降重，  
论文格式排版，论文发表，  
专业硕博团队，十年论文服务经验



SCI期刊发表，论文润色，  
英文翻译，提供全流程发表支持  
全程美籍资深编辑顾问贴心服务

免费论文查重：<http://free.paperyy.com>

3亿免费文献下载：<http://www.ixueshu.com>

超值论文自动降重：[http://www.paperyy.com/reduce\\_repetition](http://www.paperyy.com/reduce_repetition)

PPT免费模版下载：<http://ppt.ixueshu.com>

---

阅读此文的还阅读了：

- [1. 用ARMA模型预测深沪股市](#)
- [2. 浅谈增塑剂的应用拓展及发展趋势](#)
- [3. 后过渡金属催化剂催化乙烯制备超支化聚乙烯新进展](#)
- [4. 例谈同位素标记法在生物学中的应用](#)
- [5. 2014年中考化学大预测（1）](#)
- [6. 世界制药生产中应对药用辅料变异性挑战的方法开发应用新进展](#)
- [7. RNA简约提取和无标记转化技术创新及应用](#)
- [8. 用ARMA模型预测深沪股市](#)
- [9. 乙二醇单甲醚的应用](#)
- [10. 地层无机结垢预测技术研究与应用](#)
- [11. 不动点定理及其应用](#)
- [12. 指数递减法在凝析油气藏中的应用](#)
- [13. EHF疫区带病毒鼠指数的时间分布理论拟合与趋势预测](#)
- [14. R.Kooistra不等式的新推广](#)
- [15. 高吸水树脂的新用途:灭火与防火](#)
- [16. 拓扑递减方法预测周期注水开发动态](#)

17. Characteristics of Hercynite and Its Application in Refractories

18. 运用时间序列对上证综合指数进行预测分析

19. 基于SCADA/EMS的系统拓扑“五防”技术应用

20. 成长性不如主板创业板风险显现

21. 拓扑指数与对饱和脂肪酯物理化学性质的预测

22. 甲壳质化学及应用

23. 不动点定理及其应用

24. 异麦芽酮糖醇的性质和用途

25. 叔碳酸在农药行业的市场发展现状及应用前景

26. 加入WTO后四川价格指数的预测

27. 新型表面活性剂双季铵盐的特性及应用

28. 拓扑指数与对饱和脂肪酯物理化学性质的预测

29. 应用拓扑指数预测化学性质

30. 运用SAS软件系统对上证综合指数的预测分析

31. 纳米技术在木制品工业中的新应用

32. BL67在催化剂厂PCS7系统中的应用

33. 利用水驱特征曲线确定活塞式驱程度指数的方法

34. 硅藻土在涂料油漆等行业中的应用

35. 一个不等式的指数推广及应用

36. 金属活动性顺序的应用

37. 叔碳酸在涂料市场应用前景看好

38. 拓扑和变分方法及其在非线性边值问题的应用

39. 平均值不等式的推广及应用

40. 六氟化硫断路器的应用及六氟化硫环保问题

41. 稀土元素的化学性质与稀土应用

42. 注水井效益动态评价图

43. 指数平滑法及其应用

44. 稀土在花木生产上的应用

45. 金属活动性顺序在中考中的应用

46. 例谈建构思维与拓扑思维在数学教学中的应用

47. 新型缓蚀杀菌剂双季铵盐在油田中的应用

48. 应用拓扑指数预测LAS的EACN值

49. 纳米材料的物理、化学性质及其应用

50. 甘油硬脂酸脂的化学性质和应用