

عنوان مقاله:

سومین کنفرانس بین المللی دستاوردهای نوین پژوهشی در شیمی مهندسی شیمی پیشگویی ظرفیت گرمایی ویژه اترهای الیفاتیک با استفاده از شاخصهای توپولوژیکی

محل انتشار:

سومین کنفرانس بین المللی دستاوردهای نوین پژوهشی در شیمی و مهندسی شیمی (سال: 1395)

تعداد صفحات اصل مقاله: 10

نویسندگان:

شیوا مشیدی - دانشکده علوم پایه دانشگاه آزاد اسلامی اراک

فاطمه شفیعی - علوم پایه دانشگاه آزاد اسلامی اراک

خلاصه مقاله:

امروزه با استفاده از روش تئوری گراف به مطالعه کمی ساختار خاصیت پرداخت می شود. در این تحقیق ارتباط بین شاخص های راندیک اتصال یک X بالا بان H وینرپولاریتی Wp وینر w و هایپر وینر WW به روش نظریه گراف برای اترهای آلیفاتیک بدست آمده است سپس به منظور مطالعه رابطه کمی ساختار خاصیت از نرم افزارهای اماری SPSS روش برگشتی رگرسیون خطی چند متغیره MLR و نرم افزار گرومین استفاده شده است بدین طریق معین گردید برای پیشگویی ظرفی گرمایی ویژه اترهای آلیفاتیک مورد مطالعه شاخص راندیک بالا بان، هایپر وینر پلاویتی و وینر مناسب تر می باشد ضریب همبستگی مدل انتخابی 0.992 ضریب بیشتر $E3\ 2/940$ ارزش دوربین واتسون 1/849 و خطای استاندارد 0/91023 بدست آمده است.

کلمات کلیدی:

اترها ب آلیفاتیک، شاخص توپولوژیک، ارتباط کمی ساختار - خاصیت

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/531057>

