

研究简报

原小檗属类生物碱¹³C核磁共振化学位移的模拟

邓婕; 梅虎; 周鹏; 孙家英; 吴世容; 李志良

重庆大学化学化工学院, 重庆 400044

收稿日期 2006-7-31 修回日期 2006-10-10 网络版发布日期 接受日期

摘要 将表征分子局部化学微环境的原子电性作用矢量(AEIV)和原子所处状态的原子杂化状态指数(AHSI)用于原小檗属类生物碱¹³C核磁共振(NMR)波谱模拟中, 所得5参数回归模型的 r , q , RMSEE和RMSCV分别为0.982 9, 0.982 1, 7.732 9和7.884 3. 采用留分法(LMO)和交叉测试(cross test, CT)相结合的方式对模型稳定性和预测能力的检验结果较为满意, LMO及CT对样本原子化学位移预测值与实验值的相关系数 r_{pred} 分别为0.982 9, 0.986 5和0.982 1. 进一步采用该模型对¹³C NMR未知的4个小檗碱类化合物共计58个等价共振碳原子进行预测, 所得结果与谱学模拟软件gNMR计算值较为接近.

关键词 [原子电性作用矢量\(AEIV\)](#); [原子杂化状态指数\(AHSI\)](#); [¹³C NMR化学位移模拟](#); [原小檗属类生物碱](#); [定量构谱关系](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

李志良 zlli-cqe@163.com

作者个人主页: [邓婕](#); [梅虎](#); [周鹏](#); [孙家英](#); [吴世容](#); [李志良](#)

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(411KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(OKB\)](#)
- ▶ [参考文献\[PDF\]](#)
- ▶ [参考文献](#)

服务与反馈

- ▶ [把本文推荐给朋友](#)
- ▶ [加入我的书架](#)
- ▶ [加入引用管理器](#)
- ▶ [引用本文](#)
- ▶ [Email Alert](#)

相关信息

- ▶ [本刊中 包含“原子电性作用矢量\(AEIV\); 原子杂化状态指数\(AHSI\); ¹³C NMR化学位移模拟; 原小檗属类生物碱; 定量构谱关系”的相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)
- ▶ [邓婕; 梅虎; 周鹏; 孙家英; 吴世容; 李志良](#)