

研究论文

羧酸甲乙酯中羰基¹⁷O-NMR化学位移研究

李临生^{1, 2*}, 李利东², 兰云军¹, 熊静¹

(1.温州大学浙江省皮革重点实验室, 浙江 温州 325027; 2.陕西科技大学应用化学研究所, 陕西 咸阳 712081)

收稿日期 2005-7-15 修回日期 2006-1-19 网络版发布日期 2006-12-5 接受日期

摘要 提出了计算羧酸甲乙酯中羰基¹⁷O-NMR化学位移的公式: $\delta_{\text{cal}}(^{17}\text{O}) = 360.0 + \Delta\alpha + \Delta\beta + \Delta\gamma$, 通过线性回归法确定了22种取代基参数.经回归检验表明该公式计算结果置信度为99.5%, 与实验值的偏差 $\Delta\delta$ 在5.0以内的羰基¹⁷O-NMR化学位移计算值~100%.

关键词 [¹⁷O-NMR](#); [化学位移](#); [取代基效应](#); [酯](#); [羰基](#)

分类号 [O482.53](#)

DOI:

通讯作者:

李临生 llsgg@sina.com.

作者个人主页: 李临生^{1, 2*}; 李利东²; 兰云军¹; 熊静¹

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(335KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [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 [“¹⁷O-NMR; 化学位移; 取代基效应; 酯; 羰基”](#) 的 [相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)