

研究论文

取代苯甲酸甲酯羰基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 提出了计算取代苯甲酸甲酯类化合物羰基¹⁷O-NMR化学位移的公式: $\delta_{ca}|(^{17}O) = 337.3 + \Delta\sigma + \Delta m + \Delta p$, 根据52种取代苯甲酸甲酯类化合物的52个羰基¹⁷O-NMR化学位移数据, 通过线性回归法结合最小二乘法求得22个用于该公式的取代基参数, 回归检验表明采用该公式计算结果的置信度为99.5%, 计算值与实验值的偏差 $\Delta\delta$ 在5.0以内的~100%.

关键词 [¹⁷O-NMR](#) [化学位移](#) [取代基效应](#) [苯甲酸甲酯](#) [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\(385KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [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”的相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章
- ▶ [李临生1, 2*; 李利东2; 兰云军1; 熊静1](#)