

研究论文

取代亚胺中亚胺基¹⁵N NMR化学位移规律的研究

李临生^{1,2*}, 张丽娜^{1,2}, 兰云军¹, 张昌辉²

(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 2008-1-2 修回日期 2008-3-3 网络版发布日期 2008-9-5 接受日期

摘要 提出了计算苯甲醛亚胺、N-苯基亚胺、N-甲基亚胺、N-异丙基亚胺中亚胺基氮原子¹⁵N NMR化学位移的经验公式: $\delta_{\text{cal}} = \delta_{0\text{n}} + \Delta\alpha + \Delta\beta + \Delta\gamma + c$. 按亚胺基氮原子和碳原子上两类取代基的不同分别结合最小二乘法通过线性回归各得到5种取代基参数, 计算结果分别以其化学位移数据为样本点作回归检验, 置信度为99.5%, 最大误差 $\Delta\delta \leq 3.1$, 大约有95%的¹⁵N NMR化学位移计算值的计算误差小于3.0 (相对误差小于0.3%). 初步分析了芳香族亚胺苯环上对位取代基对亚胺基氮原子化学位移的影响.

关键词 [¹⁵N NMR](#); [化学位移](#); [取代基效应](#); [亚胺](#); [芳香族亚胺](#)

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*}; 张丽娜^{1,2}; 兰云军¹; 张昌辉²

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDE\(351KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [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 "[¹⁵N NMR; 化学位移; 取代基效应; 亚胺; 芳香族亚胺](#)" 的相关文章
- ▶ 本文作者相关文章

- [李临生^{1,2*}](#)
- [张丽娜^{1,2}](#)
- [兰云军¹](#)
- [张昌辉²](#)