

研究论文

取代基效应对脂肪醇<sup>13</sup>C NMR化学位移的影响

易贵元, 曹晨忠\*

(湖南科技大学 化学化工学院, 湖南 湘潭 411201)

收稿日期 2008-7-17 修回日期 2008-8-22 网络版发布日期 2009-3-5 接受日期

摘要 用原子电负性、静电作用、极化度作为基本参数, 并结合表征原子空间连接方式的立体效应参数, 对醇分子中不同环境碳原子的化学位移进行关联, 将120个模型化合物(91个脂肪一元醇, 29个二元醇)中747个碳原子相关参数值和化学位移值带入模型中得到如下估算方程:

$$\delta_C = 42.9479 + 63.0640Q_i - 3.6286F + 5.1213\Sigma\alpha_x - 6.5848Q_i\Sigma\alpha_x - 4.8427N_H^a - 0.5855N_H^Y - 4.1046N_{OH}^Y$$

( $R=0.9981$   $R^2=0.9961$   $S=1.14$   $F=27$   $125.2$   $n=747$ )

方程中各参数物理意义比较明确. 通过用“留一法”(LOO)检验( $R_{cv}=0.9980$ ,  $R^2_{cv}=0.9960$ ,  $S_{cv}=1.16$ )及对样本外5个化合物69个碳原子化学位移的预测值和实验值比较, 结果表明模型方程具有很好的稳定性和预测精度, 该模型的提出为以后计算更加复杂化合物的<sup>13</sup>C NMR化学位移奠定了良好的基础.

关键词 [核磁共振\(NMR\)](#); [<sup>13</sup>C化学位移](#); [电负性](#); [静电场](#); [原子极化度](#); [立体效应](#); [脂肪醇](#)

分类号 [O482.53](#)

DOI:

通讯作者:

曹晨忠 [czcao@hnust.edu.cn](mailto:czcao@hnust.edu.cn)

作者个人主页: 易贵元; 曹晨忠\*

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(487KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [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“核磁共振\(NMR\); <sup>13</sup>C化学位移; 电负性; 静电场; 原子极化度; 立体效应; 脂肪醇”的相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章
- [易贵元](#)
- [曹晨忠\\*](#)