

一个用于含C, H, O的有机化合物结构解析专家系统

胡昌玉, 许禄

中国科学院长春应用化学研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 本文以1,3,3-三甲基-2-氧二环[2,2,2]辛烷为例,介绍了结构解析专家系统ESESOC.I.综合利用IR、 $^{13}\text{C}$  NMR进行结构解析的过程,特别是对结构解析专家系统的核心部分,即整体结构对接作了详细地描述。

**关键词** [红外分光光度法](#) [计算机应用](#) [核磁共振谱法](#) [结构分析](#) [人工智能](#) [二环辛烷](#) [P](#) [专家系统](#)

分类号 [0621.16](#) [0657](#)

## An expert system for the elucidation of the structures of organic compounds containing C, H, O elements

HU CHANGYU, XU LU

**Abstract** Taking 1,3,3-Trimethyl-2-oxabicyclo[2,2,2]octane as an example, the principle and process to interpret the structure of organic compounds with ESESOC.I (Expert System for the Elucidation of the Structures of Organic Compounds. I.) are described in this paper.

**Key words** [INFRARED SPECTROPHOTOMETRY](#) [COMPUTER APPLICATIONS](#) [NMR SPECTROMETRY](#) [STRUCTURAL ANALYSIS](#) [ARTIFICIAL INTELLIGENCE](#) [BICYCLOOCTANE](#) [P](#) [EXPERT SYSTEM](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(0KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“红外分光光度法”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [胡昌玉](#)

· [许禄](#)