

## 基于SAFT理论关联醇与DMF体系的<sup>1</sup>H NMR

许波;李浩然;王从敏;韩世钧

浙江大学化学系,杭州 310027

### 摘要:

混合物核磁共振化学位移可以用不同的化学缔合理论研究,但当形成的缔合体种类很多时,需要很多优化参数.作者从统计缔合流体理论(SAFT)出发,提出了一个能关联混合物核磁共振化学位移,但又不需要假设缔合平衡常数的模型.对于醇与N,N-二甲基甲酰胺(DMF)体系,关联的均方根偏差小于1.01%.讨论了醇与DMF体系和醇与正己烷体系核磁共振化学位移随醇的浓度变化趋势的差异,认为醇与DMF形成比醇的自缔更强的交叉缔合是造成这种变化趋势不同的主要原因.

关键词: 统计缔合流体理论(SAFT) 缔合模型 核磁共振 化学位移 醇 N,N-二甲基甲酰胺(DMF)

收稿日期 2003-05-22 修回日期 2003-07-16 网络版发布日期 2003-11-15

通讯作者: 李浩然 Email: lihr@zju.edu.cn

### 本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(1551KB)

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

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 统计缔合流体理论(SAFT)

▶ 缔合模型

▶ 核磁共振

▶ 化学位移

▶ 醇

▶ N,N-二甲基甲酰胺(DMF)

本文作者相关文章

▶ 许波

▶ 李浩然

▶ 王从敏

▶ 韩世钧