

研究简报

卤代甲烷核磁共振谱化学位移的QSSR研究

戴益民, 邓小清, 杨道武, 周宏明

1. 长沙理工大学化学与环境工程学院, 湖南长沙 410076;
2. 长沙理工大学物理与电子科学学院, 湖南长沙 410076;
3. 中南大学材料科学与工程学院, 湖南长沙 410083

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 利用描述电子效应的诱导效应指数 ( $\Sigma I$ )、原子的平衡电负性 ( $X_E$ ) 和反映核外电子云变形程度的总电子数 ( $\Sigma_e$ )、各取代基到中心原子的化学键键长总和 ( $\Sigma_d$ ) 以及各取代基电负性的和差值 ( $\Delta X$ ) 等参数对45个卤代甲烷化合物中的碳原子结构进行表征, 并与其 $^{13}\text{C}$  NMR谱化学位移建立了优良的定量结构-波谱关系模型:  $\delta_{\text{C}} = -7403.8022 - 47.1765\Sigma I + 4290.0270X_E - 3.3067\Delta X - 163.4672\Sigma d - 4.5153\Sigma e + 22.9851\Sigma e / \Sigma d + 15.2597\Sigma e / X_E - 890.2521\Sigma d / X_E$ . 所建多元线性回归方程复相关系数 $R^2$ 及留一法 (leave-one-out, LOO) 交互验证 (cross validation, CV) 的复相关系数 $R^2_{\text{CV}}$ 分别为0.09951和0.9950. 结果表明所建模型不仅能比现有文献更好地揭示卤代甲烷 $^{13}\text{C}$  NMR谱化学位移与其分子结构信息之间的关系, 同时也提供一种计算卤代甲烷 $^{13}\text{C}$  NMR谱化学位移的新方法.

**关键词** [卤代甲烷; 化学位移; 分子结构参数; 定量结构-波谱关系](#)

分类号

**DOI:**

通讯作者:

戴益民 [yimindai@163.com](mailto:yimindai@163.com)

作者个人主页: [戴益民](#); [邓小清](#); [杨道武](#); [周宏明](#)

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF \(406KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\] \(0KB\)](#)
- ▶ [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“卤代甲烷; 化学位移; 分子结构参数; 定量结构-波谱关系”的相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)
- ▶ [戴益民, 邓小清, 杨道武, 周宏明](#)