

研究论文

取代苯甲酸羧基中的 ^{17}O NMR 化学位移研究

李临生, 李利东, 兰云军, 熊静

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 2005-7-15 修回日期 2006-1-19 网络版发布日期 接受日期

摘要 提出了计算取代苯甲酸羧基 ^{17}O NMR化学位移的公式: $\delta_{\text{cal}}(^{17}\text{O}) = 250.0 + \Delta o + \Delta m + \Delta p$, 通过线性回归法确定了8种取代基参数.经回归检验表明该公式计算结果置信度为99.5%, 羧基 ^{17}O NMR化学位移计算值与实验值的偏差 $\Delta\delta$ 全部在2.0以内.

关键词 [\$^{17}\text{O}\$ NMR](#); [化学位移](#); [取代基效应](#); [回归分析](#); [苯甲酸](#); [羧基](#); [羰基](#); [羟基](#)

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; 李利东; 兰云军; 熊静

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(323KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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 " [\$^{17}\text{O}\$ NMR](#); [化学位移](#); [取代基效应](#); [回归分析](#); [苯甲酸](#); [羧基](#); [羰基](#); [羟基](#)" 的 [相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [李临生, 李利东, 兰云军, 熊静](#)