

研究论文

吡啶酮生物碱的核磁共振碳谱模拟研究

何留, 梅虎, 李志良

重庆大学 化学化工学院, 重庆 400044

收稿日期 2007-5-21 修回日期 2007-6-26 网络版发布日期 接受日期

摘要 采用表征分子内部化学微环境及原子所处杂化状态的结构描述子: 原子电性作用矢量(AEIV)和原子杂化状态指数(AHSI), 对42个吡啶酮生物碱分子792个共振碳原子进行结构表征, 以多元线性回归技术建立 ^{13}C 核磁共振化学位移定量结构波谱关系模型, 所得回归模型的复相关系数为 $R=0.957$, 标准偏差为 $SD=12.247$. 采用留一法交互检验的结果为 $R_{\text{cv}}=0.956$, 标准偏差 $SD_{\text{cv}}=12.331$. 对外部样本集预测结果表明, AEIV和AHSI具有表征能力强、物化意义明确等优点, 所建模型具有良好的稳定性和估计能力.

关键词 [\$^{13}\text{C}\$ 核磁共振波谱模拟](#); [原子电性作用矢量](#); [原子杂化状态指数](#); [吡啶酮](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

李志良 zlli-cqu@163.com

作者个人主页: [何留](#); [梅虎](#); [李志良](#)

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(373KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [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 “ \$^{13}\text{C}\$ 核磁共振波谱模拟; 原子电性作用矢量; 原子杂化状态指数; 吡啶酮” 的相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)

- [何留](#)
- [梅虎](#)
- [李志良](#)