

镧系离子与 $\alpha$ -氨基丙酸配合物的 $^{13}\text{C}$  NMR波谱及其的结构研究

姚克敏,陈建设,沈联芳,徐元植

浙江大学化学系;中国科学院武汉物理研究所;浙江大学化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 本文以XL-200型超导核磁共振谱仪对镧系离子与 $\alpha$ -氨基丙酸配合物体系进行了研究,测得微酸性条件下配合物中各 $^{13}\text{C}$ 核的诱导化学位移值,以独立结构法将诱导位移进行分离得到配合物生成位移、接触位移及准接触位移。分析这些不同性质的位移贡献得出镧系离子在磁学性质上同样存在“四分组现象”及“钆断效应”。以准接触位移为依据,对配合物的结构进行计算机模拟,取得了一些有意义的结果。

**关键词** [丙酸 P](#) [分子结构](#) [碳13核磁共振谱法](#) [计算机模拟](#) [化学位移](#) [金属络合物](#) [镧系金属](#) [氨基酸](#)

分类号 [0611.662](#) [0657](#)

## Studies on $^{13}\text{C}$ NMR spectra and structure of lanthanide alaninate complexes

YAO KEMIN, CHEN JIANSHE, SHEN LIANFANG, XU YUANZHI

**Abstract** The  $^{13}\text{C}$  NMR of lanthanide  $\alpha$ -alaninate coordination compounds have been studied by XL-200 NMR spectrometer under weakly acidic condition. The chem. shifts obtained are separated into coordination compound formation shift, contact shift and pseudo-contact shift by using the method of "independent structure". According to the contribution of different shifts, it is revealed that "tetrad phenomenon" and "gadolinium break effect" of lanthanides also appear in its magnetic properties. The structures of coordination compounds are simulated by computer based on the pseudocontact shift. Some interesting results are obtained and discussed.

**Key words** [METHYLACETIC ACID P](#) [MOLECULAR STRUCTURE](#) [C13 NMR SPECTROMETRY](#) [COMPUTERIZED SIMULATION](#) [CHEMICAL SHIFT](#) [METAL COMPLEX](#) [LANTHANIDE SERIES METALS](#) [AMINOCARBOXYLIC ACID](#)

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“丙酸 P”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [姚克敏](#)
- [陈建设](#)
- [沈联芳](#)
- [徐元植](#)