

基于LFHB理论模型关联和预测醇+惰性溶剂的 ^1H NMR化学位移

蓝蓉; 李浩然; 韩世钧

浙江大学化学系, 杭州 310027

摘要:

运用含氢键缔合的格子流体状态方程(LFHB), 仅用一个参数关联了一元醇-惰性溶剂共17个体系29套 ^1H NMR化学位移数据. 并且用关联参数成功预测了不同温度下丁醇+环己烷的化学位移. 所得结果与化学缔合理论的结果进行了比较. 对于某些体系在稀浓度范围LFHB的计算氢键缔合度要低于化学缔合理论的结果. 并且分析了LFHB理论中的物理参数和化学参数对于缔合度计算的不同影响.

关键词: ^1H NMR化学位移 氢键 格子流体理论 醇

收稿日期 2005-03-22 修回日期 2005-05-10 网络版发布日期 2005-11-15

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(169KB)

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

▶ ^1H NMR化学位移

▶ 氢键

▶ 格子流体理论

▶ 醇

本文作者相关文章

▶ 蓝蓉

▶ 李浩然

▶ 韩世钧