

离子性指数、极化效应指数烷烃¹³C NMR化学位移的关系研究

聂长明,李忠海,文松年

南华大学化学化工系;中南林学院.株州(412006)

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 定义了烷烃分子中碳原子的离子性指数(INI),用离子性指数(INI)、极化效应指数(PEI)及 $N^{\alpha}\text{-H}(i=\alpha\beta\gamma)$ 结构信息参数研究了烷烃的¹³C NMR化学位移模型,结果表明,烷烃¹³C NMR化学位移(CS)可用下式来定量描述: $CS=194.6156-37.7394(INI)+98.6505(\Sigma PEI)+27.1630(INI/\Sigma PEI)-652.9106(\Sigma PEI/INI)+0.7735N^{\alpha}\text{-H}+2.2468N^{\beta}\text{-H}-0.1742N^{\gamma}\text{-H}$ 。用上式估算了304个碳原子的化学位移,平均绝对误差仅为0.77 δ ,标准差0.9860 δ ,预测值与实验值非常吻合。

关键词 [离子性指数](#) [极化效应](#) [烷烃](#) [定量公式](#) [碳13核磁共振](#) [化学位移](#)

分类号 [0657](#)

Relationship between ¹³C NMR chemical shifts of alkanes and ionicity index and polarizability effect index

Nie Changming, Li Zhonghai, Wen Songnian

Ctr-South Forestry Coll. Zhuzhou(412006)

Abstract The atomic ionicity index in a molecule has been defined and the model of ¹³C NMR chemical shifts of alkanes has been studied with the atomic ionicity index (INI), polarizability effect index (PEI) and the structural information parameters $N^{\alpha}\text{-H}(i=\alpha\beta\gamma)$. The results indicate that the ¹³C NMR chemical shifts of alkanes can be described as follows: $CS=194.6156-37.7394(INI)+98.6505(\Sigma PEI)+27.1630(INI/\Sigma PEI)-652.9106(\Sigma PEI/INI)+0.7735N^{\alpha}\text{-H}+2.2468N^{\beta}\text{-H}-0.1742N^{\gamma}\text{-H}$. The chemical shifts of 304 carbon atoms are predicted with the standard error being only 0.9860 δ and the average absolute error 0.77 δ . The calculated values are well consistent with the observed ones.

Key words [POLARIZATION EFFECT](#) [ALKANE](#) [QUANTITATIVE EQUATION](#) [CARBON-13 NMR SPECTROMETRY](#) [CHEMICAL SHIFT](#)

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“离子性指数”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [聂长明](#)
- [李忠海](#)
- [文松年](#)