

# 取代基效应对 *N*-(2-羟基苯亚乙基)苯胺碳核磁共振化学位移的影响

刘军兰, 曹朝曦\*

(湖南科技大学 化学化工学院, 理论有机化学与功能分子教育部重点实验室  
分子构效关系湖南省普通高等学校重点实验室, 湖南 湘潭 411201)

**摘要:**合成了一系列 *N*-(2-羟基苯亚乙基)苯胺 2-OH-XAr(Me)=NArY 化合物, 以核磁共振 <sup>1</sup>H 氢谱和 <sup>13</sup>C 碳谱确定其结构, 指出桥基 C(Me)=N 上碳的化学位移  $\delta_c[2\text{-OH}, \text{C}(\text{Me})=\text{N}]$ , 定量研究取代基效应对  $\delta_c[2\text{-OH}, \text{C}(\text{Me})=\text{N}]$  的影响. 得到一个 4 参数定量方程, 相关系数 *R* 为 0.940 1, 较好地表达了  $\delta_c[2\text{-OH}, \text{C}(\text{Me})=\text{N}]$  的变化规律. 结果表明: 该类化合物化学位移  $\delta_c[2\text{-OH}, \text{C}(\text{Me})=\text{N}]$  由取代基基态极性参数  $\sigma(X)$  与  $\sigma(Y)$ , 激发态取代基参数(*Y*), 基团 X 和 Y 之间的特殊交叉作用<sup>2</sup> 等共同表达. 通过  $\delta_c[2\text{-OH}, \text{C}(\text{Me})=\text{N}]$  与二取代-氮(苯亚乙基)苯胺衍生物 XArC(Me)=NArY 桥基 C(Me)=N 上碳化学位移  $\delta_c[\text{C}(\text{Me})=\text{N}]$  的比较发现: 化合物 2-OH-XAr(Me)=NArY 受分子内氢键的影响, 这 2 类化合物桥基上碳的化学位移之间没有良好的线性关系. 因而, 在应用 NMR 谱图解析有机化合物分子结构时, 不能简单地用  $\delta_c[\text{C}(\text{Me})=\text{N}]$  的变化去类比  $\delta_c[2\text{-OH}, \text{C}(\text{Me})=\text{N}]$  的变化.

**关键词:**核磁共振(NMR); <sup>13</sup>C NMR 化学位移; 取代基效应; *N*-(2-羟基苯亚乙基)苯胺; 分子内氢键

**中图分类号:** O621. 1      **文献标志码:** A      **文章编号:** 1672-9102(2018)02-0072-05

## Substituent Effect on the <sup>13</sup>C NMR Chemical Shifts of *N*-(2-hydroxyl-phenyl-ethylene)-anilines

Liu Junlan, Cao Chaotun

(Key Laboratory of Theoretical Organic Chemistry and Function Molecule, Ministry of Education, Key Laboratory of QSAR/QSPR of Hunan Provincial University, School of Chemistry and Chemical Engineering, Hunan University of Science and Technology, Xiangtan 411201, China)

**Abstract:** A series of *N*-(2-hydroxyl-phenyl-ethylene)-anilines 2-OH-XArC(Me)=NArY were synthesized, and their <sup>1</sup>H NMR and <sup>13</sup>C NMR spectra were measured. The <sup>13</sup>C chemical shift values of C(Me)=N bridge groups,  $\delta_c[2\text{-OH}, \text{C}(\text{Me})=\text{N}]$  were determined. The effect of substituents X and Y on the  $\delta_c[2\text{-OH}, \text{C}(\text{Me})=\text{N}]$  were investigated quantitatively. A four-parameter correlation equation with correlation coefficient 0.940 1 was obtained for quantifying the  $\delta_c[2\text{-OH}, \text{C}(\text{Me})=\text{N}]$ . The result indicates that the  $\delta_c[2\text{-OH}, \text{C}(\text{Me})=\text{N}]$  of *N*-(2-hydroxyl-phenyl-ethylene)-anilines is dominated by polar substituent constant of X [ $\sigma(X)$ ] and Y [ $\sigma(Y)$ ], excited-state substituent constant of Y [ $\sigma_{cc}^{ex}(Y)$ ] and substituent specific cross-interaction effect between X and Y [ $\sigma_{cc}^{ex,2}$ ]. Also the  $\delta_c[2\text{-OH}, \text{C}(\text{Me})=\text{N}]$  of *N*-(2-hydroxyl-phenyl-ethylene)-anilines is compared with the  $\delta_c[\text{C}(\text{Me})=\text{N}]$  of C(Me)=N bridge group in *N*-(phenyl-ethylene)-anilines XArC(Me)=NArY. It shows there is no good linear relationship between the  $\delta_c[2\text{-OH}, \text{C}(\text{Me})=\text{N}]$  and  $\delta_c[\text{C}(\text{Me})=\text{N}]$  due to the intramolecular hydrogen bond in 2-OH-HAr(Me)=NArY. Therefore one cannot

收稿日期: 2017-12-05

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(21672058)

\* 通信作者, E-mail: caozchem@163.com

only use the change of  $\delta_c[\text{C}(\text{Me})=\text{N}]$  cannot be used the change of  $\delta_c[\text{C}(\text{Me})=\text{N}]$  to deduce, in confirming the organic molecule structures with NMR spectra.

**Keywords:** nuclear magnetic resonance (NMR);  $^{13}\text{C}$  NMR chemical shift; substituent effect; *N*-(2-hydroxyl-phenyl-ethylene)-aniline; intramolecular hydrogen bond

核磁共振(NMR)中的 $^{13}\text{C}$ 化学位移 $\delta_c$ 对于确定有机分子结构非常重要<sup>[1]</sup>。 $^{13}\text{C}$ 化学位移 $\delta_c$ 值直接反映所观察碳核周围的电子云分布.影响 $\delta_c$ 值的因素包括碳的轨道杂化,取代基效应(电子效应、立体效应),以及其他影响因素(包括溶剂,氢键,温度等)<sup>[2]</sup>.Neuvonen<sup>[3]</sup>曾测定了取代二芳基席夫碱  $\text{XArCH}=\text{NArY}$  (XBAY)的 $^{13}\text{C}$  NMR中  $\text{C}=\text{N}$ 桥基上C的化学位移 $\delta_c$ ,得到了取代基电子效应的影响结论:(1)对于取代基X来说,吸电子基团起屏蔽作用,给电子基团起去屏蔽作用;(2)对于取代基Y,吸电子基团起去屏蔽作用而给电子基团起屏蔽作用.Neuvonen还指出“取代基X和Y之间存在相互作用效应”,但是当时未能找到定量这种相互作用效应的方法.近年来,曹晨忠等<sup>[4]</sup>提出以 $\Delta\sigma^2$ 定量表达取代基X和Y之间的特殊交叉作用,即 $\Delta\sigma^2(\Delta\sigma^2 = \{[\sigma_F(X)+\sigma_R(X)] - [\sigma_F(Y)+\sigma_R(Y)]\}^2)$ .在多种芳基席夫碱  $\text{C}=\text{N}$ 桥基中 $^{13}\text{C}$ 的化学位移 $\delta_c$ 定量相关研究中得到良好应用,结果表明不同分子骨架的席夫碱的 $\delta_c$ 受取代基效应的影响差异较大.对于取代基效应与 $^{13}\text{C}$  NMR化学位移关系的研究,已有不少报道;Daniela等<sup>[5]</sup>综述了环状咪唑卡宾及其衍生物 $^{13}\text{C}$  NMR化学位移的变化规律;易贵元等<sup>[6]</sup>研究了取代基效应对脂肪族链醚 $^{13}\text{C}$  NMR化学位移的影响;方正军等<sup>[7]</sup>系统研究了取代基X和Y对不同共轭链长度的芳基席夫碱 $\delta_c$ 的影响规律,得出在6类不同共轭链长度的席夫碱中(*p*- $\text{XArCH}=\text{NArCH}=\text{CHArY-p}$ , *p*- $\text{XArCH}=\text{CHArCH}=\text{NArY-p}$ , *p*- $\text{XArCH}=\text{CHCH}=\text{NArY-p}$ , *p*- $\text{XArArCH}=\text{NArY-p}$ , *p*- $\text{XArCH}=\text{NArArY-p}$ , *p*- $\text{XArCH}=\text{NArY-p}$ ),取代基X和Y之间的相互作用对 $\delta_c$ 的影响随着共轭链的增长而减弱;曹重仲等<sup>[8]</sup>以61种二取代-氮(苯亚乙基)苯胺衍生物  $\text{XArC}(\text{Me})=\text{NArY}$  (简称XPEAY)为模型化合物,系统研究了  $\text{C}(\text{Me})=\text{N}$ 桥键 $^{13}\text{C}$  NMR化学位移 $\delta_c[\text{C}(\text{Me})=\text{N}]$ 受取代基效应的影响规律.从XPEAY化合物的 $\delta_c[\text{C}(\text{Me})=\text{N}]$ 变化规律,我们想到另一类化合物,即 *N*-(2-羟基苯亚乙基)苯胺 2-OH-XArC(Me)=NArY (简称2-OH-XPEAY),它们的母体分子结构与XPEAY的母体相似,区别在于2-OH-XPEAY化合物中2-OH可与桥键的N形成分子内氢键.这两类化合物桥基上的 $^{13}\text{C}$  NMR化学位移,分别用 $\delta_c[2\text{-OH}, \text{C}(\text{Me})=\text{N}]$ 和 $\delta_c[\text{C}(\text{Me})=\text{N}]$ 表示,比较它们的变化规律,可以探索2-OH如何导致其化学位移的不同.本文研究 *N*-(2-羟基苯亚乙基)苯胺 2-OH-XPEAY的 $\delta_c[2\text{-OH}, \text{C}(\text{Me})=\text{N}]$ 变化规律,以期待得到有意义的结果.

## 1 数据准备

目标化合物 *N*-(2-羟基苯亚乙基)苯胺 2-OH-HPEAY,参照文献[9]合成如图1所示.粗产物采用薄层色谱(TLC)分离纯化.以 $\text{CDCl}_3$ 作溶剂,用Bruker AV500核磁共振仪测定其 $^1\text{H}$ 和 $^{13}\text{C}$  NMR谱,确定其分子结构并确认桥基  $\text{C}(\text{Me})=\text{N}$ 上碳的化学位移值 $\delta_c[2\text{-OH}, \text{C}(\text{Me})=\text{N}]$ .

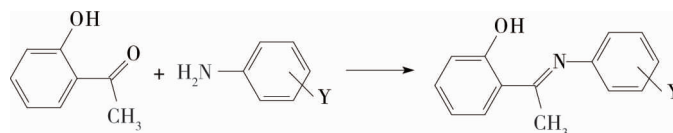


图1 化合物2-OH-HPEAY的合成

将本文合成的15个化合物2-OH-HPEAY和文献中报道的8个2-OH-4-XPEAOMe-4'及2-OH-5-XPEAOMe-4'作为模型化合物(简称2-OH-XPEAY).将所有23个模型化合物桥基  $\text{C}(\text{Me})=\text{N}$ 碳的化学位移值 $\delta_c[2\text{-OH}, \text{C}(\text{Me})=\text{N}]$ 列于表1.

表1 取代基常数以及模型化合物桥基 C(Me)=N 碳化学位移值  $\delta_c[2\text{-OH}, \text{C}(\text{Me})=\text{N}]$ 

No	X	Y	$\sigma_o(2\text{-OH})^a$	$\sigma_m(X)^a$	$\sigma_p(X)^a$	$\sigma(Y)^a$	$\sigma_{cc}^{\text{ex}}(X)^b$	$\sigma_{cc}^{\text{ex}}(Y)^b$	$\delta_c[2\text{-OH}, \text{C}(\text{Me})=\text{N}]_{\text{exp}}^c$
1	2-OH-H	4'-NMe <sub>2</sub>	-0.38	0.00	0.00	-0.83	-0.10	-1.18	170.11
2	2-OH-H	4'-OMe	-0.38	0.00	0.00	-0.27	-0.10	-0.50	171.08
3	2-OH-H	4'-Me	-0.38	0.00	0.00	-0.17	-0.10	-0.17	171.08
4	2-OH-H	H	-0.38	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.00	171.06
5	2-OH-H	4'-F	-0.38	0.00	0.00	0.06	-0.10	0.06	171.83
6	2-OH-H	4'-Cl	-0.38	0.00	0.00	0.23	-0.10	-0.22	171.18
7	2-OH-H	4'-Br	-0.38	0.00	0.00	0.23	-0.10	-0.33	171.69
8	2-OH-H	4'-CF <sub>3</sub>	-0.38	0.00	0.00	0.54	-0.10	-0.12	171.87
9	2-OH-H	4'-CN	-0.38	0.00	0.00	0.66	-0.10	-0.70	171.86
10	2-OH-H	3'-Me	-0.38	0.00	0.00	-0.07	-0.10	-0.03	170.95
11	2-OH-H	3'-F	-0.38	0.00	0.00	0.34	-0.10	0.02	171.80
12	2-OH-H	3'-Cl	-0.38	0.00	0.00	0.37	-0.10	0.02	171.90
13	2-OH-H	3'-CN	-0.38	0.00	0.00	0.56	-0.10	0.56	172.55
14	2-OH-H	3'-NO <sub>2</sub>	-0.38	0.00	0.00	0.71	-0.10	0.66	172.81
15	2-OH-H	2'-OH	-0.38	0.00	0.00	-0.38	-0.10	-0.10	171.20
16	2-OH-4-OMe	4-OMe	-0.38	0.00	-0.27	-0.27	-0.60	-0.50	170.80
17	2-OH-4-F	4-OMe	-0.38	0.00	0.06	-0.27	-0.04	-0.50	170.60
18	2-OH-4-NO <sub>2</sub>	4-OMe	-0.38	0.00	0.78	-0.27	-0.27	-0.50	170.40
19	2-OH-5-OMe	4-OMe	-0.38	0.12	0.00	-0.27	-0.32	-0.50	170.50
20	2-OH-5-Me	4-OMe	-0.38	-0.07	0.00	-0.27	-0.43	-0.50	171.20
21	2-OH-5-Cl	4-OMe	-0.38	0.37	0.00	-0.27	-0.60	-0.50	170.30
22	2-OH-5-Br	4-OMe	-0.38	0.39	0.00	-0.27	-1.27	-0.50	170.20
23	2-OH-5-NO <sub>2</sub>	4-OMe	-0.38	0.71	0.00	-0.27	-1.27	-0.50	171.10

注:a 取代基 Hammett 常数来自文献[10-11];b 取代基激发态常数来自文献[12];c 实验测定值;“化合物 16~23”的碳谱数据来自文献[13]

## 2 结果与讨论

### 2.1 影响 2-OH-XPEAY 和 XPEAY 的 $\delta_c$ 因素对比

曹晨忠等<sup>[14]</sup>采用式(1)表达 61 种化合物 XPEAY 的  $\delta_c[\text{C}(\text{Me})=\text{N}]$  变化规律,标准误差只有 0.12.

$$\delta_c[\text{C}(\text{Me})=\text{N}] = 165.41 - 2.67 \sigma_F(X) + 1.77 \sigma_F(Y) + 0.50 \sigma_{cc}^{\text{ex}}(Y) - 0.29 \Delta \sigma^2 + 0.39 \chi^2; \quad (1)$$

$$R = 0.9922, S = 0.12, n = 61, F = 692.06.$$

式中: $\sigma_F(X)$ 和 $\sigma_F(Y)$ 分别代表取代基 X 和 Y 的诱导效应常数; $\sigma_{cc}^{\text{ex}}(Y)$ 为取代基 Y 的激发态常数; $\Delta \sigma^2 = [\sigma(X) - \sigma(Y)]^2$ 表示基团 X 和 Y 之间的交叉作用; $\chi^2 = [\sigma(\text{Me}) - \sigma(Y)]^2 = [-0.17 - \sigma(Y)]^2$ 表示 C(Me)=N 桥键上甲基与取代基 Y 之间存在的相互作用;R 表示相关系数;S 为标准偏差;F 为 Fisher 检验值;n 为样本个数.

为了定量研究化合物 2-OH-XPEAY 的  $\delta_c[2\text{-OH}, \text{C}(\text{Me})=\text{N}]$ ,我们也尝试用式(1)的参数来对表 1 中 23 个化合物的  $\delta_c[2\text{-OH}, \text{C}(\text{Me})=\text{N}]$  进行回归,但得到的结果并不太好.可见不能沿用式(1)来表达  $\delta_c[2\text{-OH}, \text{C}(\text{Me})=\text{N}]$  的变化规律.

进一步考察 XPEAY 和 2-OH-XPEAY 这 2 类化合物  $\delta_c$  值之间的关系,我们选择含相同基团对 X~Y 的 2-OH-XPEAY 和 XPEAY,以它们相应的桥键 C(Me)=N 碳<sup>13</sup>C NMR 化学位移  $\delta_c$  实验值作图,得图 2.

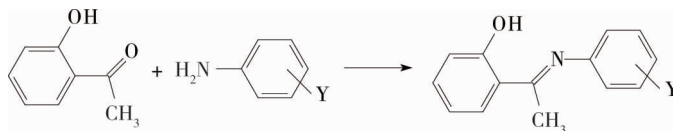


图2 2-OH-XPEAY 的  $\delta_c[2\text{-OH}, \text{C}(\text{Me})=\text{N}]$  对相应 XPEAY 的  $\delta_c[\text{C}(\text{Me})=\text{N}]$

从图2中观察到:2-OH-XPEAY和XPEAY两者桥键  $C(\text{Me})=N$  的  $\delta_c$  没有良好的线性关系,可能是两者受到的影响因素存在差异所致.于是我们对影响因素进行分析,并经过优化后得到回归方程式(2).

$$\delta_c[2\text{-OH}, C(\text{Me})=N] = 171.13 - 0.61\sigma(X) + 1.11\sigma(Y) + 0.68\sigma_{cc}^{\text{ex}}(Y) + 0.53\Delta\sigma_{cc}^{\text{ex}2}; \quad (2)$$

$$R = 0.9401, S = 0.27, n = 23, F = 34.20.$$

式中: $\sigma(X)$ ,  $\sigma(Y)$  分别表示基团 X 和 Y 的基态极性参数; $\Delta\sigma_{cc}^{\text{ex}2} = [\sigma_{cc}^{\text{ex}}(X) - \sigma_{cc}^{\text{ex}}(Y)]^2$  表示基团 X 和 Y 激发态取代基常数之间的特殊交叉作用.式(2)的计算值与实验值之间的平均绝对误差为 0.20,可用于表达化合物 2-OH-XPEAY 的  $\delta_c[2\text{-OH}, C(\text{Me})=N]$  的变化规律.

式(1)和式(2)所用的参数不尽相同,我们在表2中对比了它们之间的异同.

表2 式(1)和式(2)中各参数前的系数

方程	化合物	$\sigma_F(X)$	$\sigma(X)$	$\sigma_F(Y)$	$\sigma(Y)$	$\sigma_{cc}^{\text{ex}}(Y)$	$\Delta\sigma^2$	$\chi^2$	$\Delta\sigma_{cc}^{\text{ex}2}$
(1)	XPEAY	-2.67	0.00	1.77	0.00	0.50	-0.29	0.39	0.00
(2)	2-OH-XPEAY	0.00	-0.61	0.00	1.11	0.68	0.00	0.00	0.53

由表2可以看出:式(2)中有  $\Delta\sigma_{cc}^{\text{ex}2}$  而无  $\Delta\sigma^2$  和  $\chi^2$ ,说明基团 X,桥键甲基(Me)两者和基团 Y 的相互作用发生了变化;化合物 2-OH-XPEAY 与 XPEAY 相比,取代基 X 和 Y 的基态极性参数前面的系数绝对值减小,说明在 2-OH-XPEAY 中,由于分子内氢键的影响,削弱了基团 X 和 Y 基态极性效应对  $\delta_c[2\text{-OH}, C(\text{Me})=N]$  影响;此外,式(2)比式(1)的截距明显增大,截距是 X 和 Y 均为 H 时的碳化学位移,因为 2-OH 与桥键 N 形成分子内氢键强烈吸引  $C=N$  上的电子,降低其 C 上的电子云密度,所以碳化学位移  $\delta_c[2\text{-OH}, C(\text{Me})=N]$  向低场移动.

## 2.2 各个参数对<sup>13</sup>C NMR 化学位移的贡献

式(2)中各参数对 2-OH-XPEAY 的  $\delta_c[2\text{-OH}, C(\text{Me})=N]$  影响大小,可以用式(3)和式(4)来估算<sup>[15-16]</sup>:

$$\Psi_\gamma(i) = m_i \bar{X}_i; \quad (3)$$

$$\Psi_f(i) = \frac{R^2 |\Psi_\gamma(i)|}{\sum_i |\Psi_\gamma(i)|} \times 100\%. \quad (4)$$

式中: $\psi_\gamma$  为相对贡献; $\psi_f$  为百分比贡献; $m_i$  和  $\bar{X}_i$  分别表示式(2)中各参数前面的系数及各参数的平均值; $R$  为相关系数.

式(3)和式(4)中各变量的贡献结果如表3.

表3 参数  $\sigma(X)$ ,  $\sigma(Y)$ ,  $\sigma_{cc}^{\text{ex}}$  和  $\Delta\sigma_{cc}^{\text{ex}2}$  的相对贡献和百分比贡献

	$\sigma(X)$	$\sigma(Y)$	$\sigma_{cc}^{\text{ex}}(Y)$	$\Delta\sigma_{cc}^{\text{ex}2}$
$\Psi_\gamma$	-0.0555	-0.0087	-0.1768	0.1002
$\Psi_f/\%$	14.38	2.24	45.80	25.95

由表3可以看出:对 2-OH-XPEAY 的  $\delta_c[2\text{-OH}, C(\text{Me})=N]$  变化贡献超过 40%,是最主要的影响因素;其次为<sup>2</sup>,贡献超过 25%;虽然  $\sigma(Y)$  的贡献比  $\sigma(X)$  的贡献小,但也不可忽略.

## 3 结论

1) 在 2-OH-XPEAY 中存在分子内氢键,与 XPEAY 相比,影响桥键  $\delta_c$  的因素发生了变化,前者的  $\delta_c$  比后者的  $\delta_c$  明显增大.

2) 对于 2-OH-XPEAY 分子,其基团 X,桥键甲基(Me)分别与基团 Y 基态极性参数之间的相互作用可以忽略,但基团 X, Y 之间激发态取代基参数之间的相互作用对  $\delta_c[2\text{-OH}, C(\text{Me})=N]$  有重要影响.

3) 应用 NMR 谱图解析分子结构时,不能简单地用 XPEAY 桥基  $\delta_c[C(\text{Me})=N]$  去类推 2-OH-

XPEAY 的  $\delta_c[2\text{-OH}, \text{C}(\text{Me})=\text{N}]$  变化, 否则会引起化学位移归属的误判.

本文未能研究 XPEAY-2'-OH 的  $\delta_c$  变化规律, 它与 XPEAY 及 2-OH-XPEAY 的  $\delta_c$  变化规律有何异同, 值得深入研究.

#### 参考文献:

- [1] 沈其丰. 核磁共振碳谱[M]. 北京: 北京大学出版社, 1988: 86.
- [2] 孟令芝, 龚淑玲, 何永炳. 有机波谱分析[M]. 武汉: 武汉大学出版社, 2009: 171-175.
- [3] Neuvonen H, Neuvonen K, Fülöp F. Substituent cross-interaction effects on the electronic character of the C=N bridging group in substituted benzylidene anilines models for molecular cores of mesogenic compounds. A  $^{13}\text{C}$  NMR study and comparison with theoretical results[J]. *Journal of Organic Chemistry*, 2006, 71(8): 3141-3148.
- [4] Cao C Z, Lu B T, Chen G F. Investigation of the substituent specific cross-interaction effects on  $^{13}\text{C}$  NMR of the C=N bridging group in substituted benzylidene anilines [J]. *Journal of Physical Organic Chemistry*, 2011, 24(4): 335-341.
- [5] Tapu D, Dixon D A, Roe C.  $^{13}\text{C}$  NMR spectroscopy of "arduengo-type" carbenes and their derivatives [J]. *Chemical Reviews*, 2009, 40(48): 3385-3407.
- [6] 易贵元, 曹晨忠. 取代基效应对脂肪族链醚 $^{13}\text{C}$ NMR 化学位移的影响[J]. *波谱学杂志*, 2010, 27(2): 172-184.
- [7] Fang Z J, Chen G F, Cao C Z. Substituent effects on the  $^{13}\text{C}$  NMR chemical shifts of the imine carbon in *N*-(4-X-benzylidene)-4-(4-Y-styryl) anilines[J]. *Journal of Physical Organic Chemistry*, 2012, 25(12): 1343-1350.
- [8] 曹重仲. 取代基效应对二取代氮-(苯亚乙基)苯胺的核磁共振化学位移和紫外吸收光谱性能的影响[D]. 湘潭: 湖南科技大学, 2015.
- [9] Li W, Hou G, Chang M, et al. Highly Efficient and Enantioselective Iridium-Catalyzed Asymmetric Hydrogenation of *N*-Arylimines[J]. *Advanced Synthesis & Catalysis*, 2009, 351(18): 3123-3127.
- [10] Cao C T, Zhou W, Cao C Z. Abnormal effect of hydroxyl on the longest wavelength maximum in ultraviolet absorption spectra for bis-aryl Schiff bases[J]. *Journal of Physical Organic Chemistry*, 2017, 30(10): e3672.
- [11] Hansch C, Leo A, Taft R W A. Survey of Hammett Substituent Constants and Resonance and Field Parameters[J]. *Chemical Reviews*, 1991, 91(2): 165-169.
- [12] Cao C Z, Chen G F, Yin Z Q. Excited-state substituent constants from substituted benzenes[J]. *Journal of Physical Organic Chemistry*, 2008, 21(9): 808-815.
- [13] Nguyen T B, Wang Q, Guéritte F. Practical Synthesis of *N*-Aryl-ohydroxyaryl Ketimines[J]. *Synthetic Communications*, 2012, 42(18): 2648-2663.
- [14] Cao Z Z, Cao C T, Cao C Z. Comparison of the  $^{13}\text{C}(\text{C}=\text{N})$  chemical shifts of substituted *N*-(phenyl-ethylene)-anilines and substituted *N*-(benzylidene)-anilines[J]. *Journal of Physical Organic Chemistry*, 2015, 28(8): 564-569.
- [15] Needham D E, Wei I C, Seybold P G. Molecular Modeling of the Physical Properties of the Alkanes[J]. *Journal of American Chemical Society*, 1988, 110(13): 4186-4194.
- [16] Liu F P, Liang Y Z, Cao C Z, et al. QSPR study of GC retention indices for saturated esters on seven stationary phases based on novel topological indices[J]. *Talanta*, 2007, 72(4): 1307-1315.