

研究论文

酸性磷化合物萃取金属反应中取代基空间效应的分子力学研究

李树森; 袁承业

中国科学院上海有机化学研究所

摘要:

本文利用分子力学计算从理论上估算了酸性有机磷化合物萃取金属离子反应中取代基的空间效应。二烷基磷(膦)酸叔丁酯(II)作为萃合物分子的近似模型结构。计算结果表明, 羟基氧在自由萃取剂 I 和 II 中的局部空间张力能之差与烷基的结构有密切的关系, 可近似地用来作为烷基空间效应的量度($E_{(s,ex)}$)。并用于一系列有机磷(膦)酸萃取 Ni、Co 为稀土的多元回归分析。结果表明, $E_{(s,ex)}$ 基本上反映了该萃取过程中的空间效应。

关键词:

收稿日期 1987-06-17 修回日期 1988-02-22 网络版发布日期 1989-02-15

通讯作者: 李树森 Email:

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

[PDF\(4883KB\)](#)

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](#)

[本文作者相关文章](#)

▶ [李树森](#)

▶ [袁承业](#)