

研究论文

Benesi-Hildebrand方程的正确性与可靠性

王睿; 尉志武

清华大学化学系, 生命有机磷化学与化学生物学教育部重点实验室, 北京 100084

摘要:

Benesi-Hildebrand(B-H)方程现被广泛地应用于各种非键作用体系, 特别是作用比为1:1型和1:2型的体系. 该方程可以用来确定作用体系的平衡常数以及作用比. 通过计算机模拟, 发现在某些情况下, 对于1:2型的作用体系, B-H方程会给出错误的作用比信息. 无论是弱的作用体系还是强的作用体系, 都可能会出现1:1的B-H方程曲线呈现出线性, 同时(或者)1:2的B-H方程曲线呈现出非线性的情况. 此外, 本文还研究了体系中两种作用物质的初态浓度比对于1:1型作用的平衡常数计算的影响, 发现最小的初态浓度比(r_0)等于100是可以确保B-H方程近似条件 $C_{OB} \approx C_B$ 成立的安全阈值. 当作用很弱的时候, 比如说作用的平衡常数 K 小于 $25 \text{ L} \cdot \text{mol}^{-1}$ ($C_{OP} = 4 \times 10^{-4} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$)时, 则不需要对最小初态浓度比值 r_0 进行限制, 就可以满足B-H方程的近似条件. 通过计算机模拟还分析了文献中提出的两个边界条件. 研究表明 $1/(KC_{OP}) \geq 10$ 可以保证处于平衡状态时的 $C_B/C_{OB} \geq 0.91$. 而另一个条件 $KC_{OB} > 0.1$ 并不是确保B-H方程近似条件成立的充分条件.

关键词: Benesi-Hildebrand方程 分子间相互作用 平衡常数 作用比

收稿日期 2007-05-28 修回日期 2007-06-15 网络版发布日期 2007-07-19

通讯作者: 尉志武 Email: yuzhw@tsinghua.edu.cn

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

PDF(287KB)

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

▶ Benesi-Hildebrand方程

▶ 分子间相互作用

▶ 平衡常数

▶ 作用比

本文作者相关文章

▶ 王睿

▶ 尉志武