

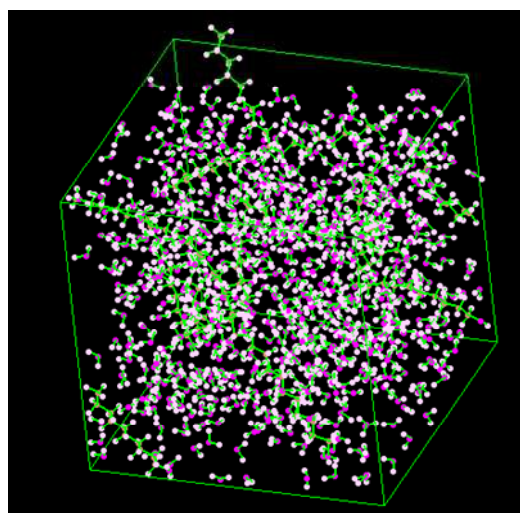


名前 岩本 仁志  
 役職 准教授  
 学位 博士(工学)

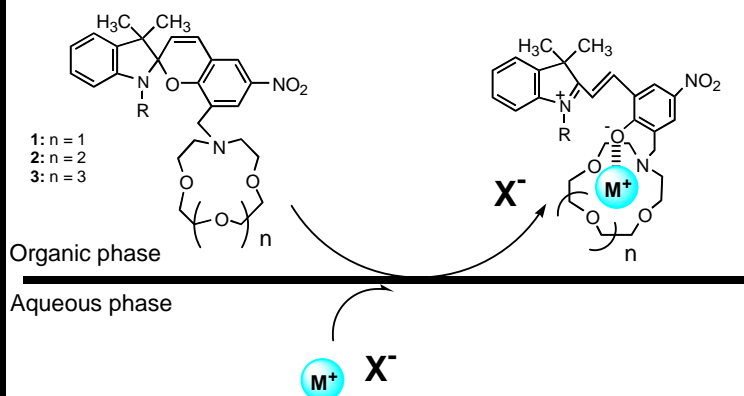
# MD (分子動力学) を用いた 溶媒抽出能の評価

分子動力学法という計算を用いて、液-液溶媒抽出における抽出剤(クラウン化スピロベンゾピラン)のアルカリ金属イオンに対する抽出能を算出した。

分子動力学法 (Molecular Dynamics)  
 分子の動きを時系列にシミュレーション

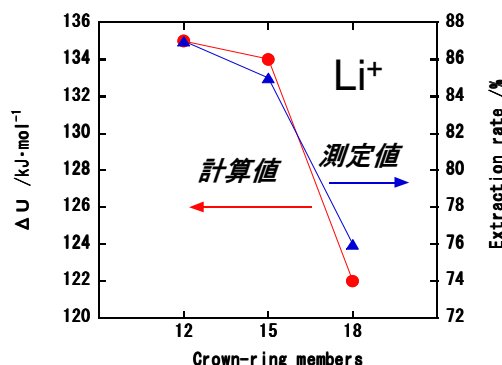
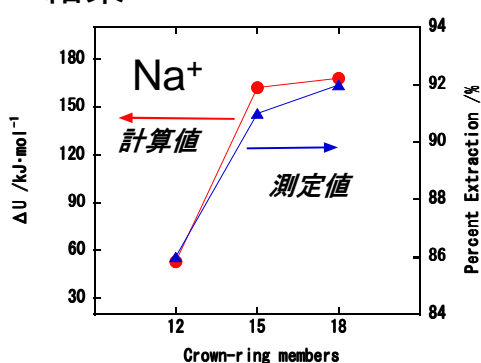


## 溶媒抽出モデル



Postulated mechanism for liquid-liquid extraction of metal ion with crowned spirobenzopyran derivative

## 結果



実験値と計算値  
 は同様の傾向を  
 示している。

計算により抽  
 出率の予測が  
 可能

専門分野: 計算化学、分析化学、溶媒抽出

技術協力・相談分野: 金属イオンの溶媒抽出および回収、計算化学によらず、化学全般ご相談下さい。可能な限り協力します。

連絡先 tel:0738-29-8302 e-mail:iwamoto@wakayama-nct.ac.jp