



Квантовохимический расчет структуры фосфорнокислого катионообменника

Резников А.А., Шапошник В.А., Козадерова О.А.

Воронежский государственный университет

Аннотация

Квантово-химическим методом *ab initio* рассчитано строение фосфорнокислого катионообменника с противоионами натрия, магния, кальция и стронция. Полученные данные позволяют сделать вывод о взаимодействии двухзарядных ионов с одной фосфоновой группой. Анализ оптимизированной структуры позволил сделать вывод об образовании координационной связи между атомом кислорода фосфоновой группы, имеющим неподеленную пару электронов, с катионами магния, кальция и стронция. Найдено, что между атомами водорода гидратной оболочки катиона и атомами кислорода ионогенной группы образуется водородная связь, дающая значительную вклад в энергию активации транспорта ионов в фосфорнокислом катионообменнике.
