

Квантово-механическое исследование электровосстановления комплексов висмута(III) из водных растворов, содержащих тиоцианат-ионы

© Кузнецов Андрей Михайлович*⁺ и Шапник Александр Михайлович

Кафедра неорганической химии. Казанский государственный технологический университет.

Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия.

Тел.: (843) 231-41-22. E-mail: am_kuznetsov@kstu.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: тиоцианат-ион, комплексообразование, Bi(III) , электровосстановление, диссоциативный электронный перенос, энергии активации, квантово-химические расчеты, метод функционала плотности, *B3LYP*, модель РСМ.

Аннотация

На основе квантово-химических расчетов методом функционала плотности и квантово-механической теории переноса заряда в полярных средах проведены модельные оценки энергии активации элементарного акта первой стадии электровосстановления аквакомплекса $[\text{Bi}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$, моноизоотиоцианатного комплекса $[\text{Bi}(\text{H}_2\text{O})_4\text{NCS}]^{2+}$, а также гексаизоотиоцианатного комплекса $[\text{Bi}(\text{NCS})_6]^{3-}$. Сделан вывод об ускоряющем влиянии тиоцианат-иона на электровосстановление за счет его комплексообразования с ионом Bi(III) , что позволило объяснить экспериментально наблюдаемые закономерности.