

Тематическое направление: Квантово-химическое исследование электрохимических процессов. Часть I.

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА ЭЛЕКТРОВОССТАНОВЛЕНИЯ КОМПЛЕКСОВ Zn(II) ИЗ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ ЩЕЛОЧНЫХ ЭЛЕКТРОЛИТОВ.

© Маслий Алексей Николаевич,⁺ Шапник Михаил Самойлович
и Кузнецов Андрей Михайлович*

Кафедра неорганической химии. Казанский государственный технологический университет. Ул. К. Маркса, 68.
г. Казань 420015. Россия. E-mail: masliy@kfti.knc.ru или antsoft@kfti.knc.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: перенос заряда, разряд, Zn(II) гидроксокомплексы, эффекты растворителя, квантово-химические расчеты.

Резюме

На основе квантово-механической теории переноса заряда в полярных средах показано, что, несмотря на преобладание в объеме электролита высококоординированных гидроксокомплексов цинка(II), их разряду предшествует стадия отщепления лиганда с образованием нейтральной частицы [Zn(OH)₂]. Тем самым дано теоретическое обоснование экспериментально установленных механизмов.