

НЕЭМПИРИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ИК-СПЕКТРА СУЛЬФОКАТИОНООБМЕННИКА

*Е.В. Бутырская, В.А. Шапошник, А.М. Бутырский,
С.И. Карпов, Л.С. Нечаева*

С использованием программы Gaussian03 выполнен расчет частот валентных колебаний сульфогруппы репрезентативного фрагмента сульфокатионообменника в формах ионов щелочных металлов для различных предполагаемых окружений сульфогруппы. Сравнение рассчитанных и экспериментальных величин смещения частот валентных колебаний сульфогруппы, обусловленных влиянием поля катиона, приводит к выводу о диссоциации ионной пары в указанной системе.