

Влияние растворителя на изотопные свойства комплексов SiF_4 и BF_3 в процессах разделения изотопов кремния и бора методом химобменной ректификации

© Бочкарев Андрей Владимирович, Белопухов Сергей Леонидович*⁺
и Жевнеров Алексей Валерьевич

Российский государственный аграрный университет – МСХА им. К.А. Тимирязева. Ул. Тимирязевская, 49. г. Москва, 127550. Россия. Тел.: (499) 976-32-16. E-mail: andrewvbochkarev@tochka.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: изотопы, изотопы кремния, изотопы бора, разделение изотопов, ректификация.

Аннотация

Проведены неэмпирические квантово-химические расчеты отношений приведенных статистических сумм по состояниям изотопных форм (β -факторов) и коэффициентов разделения изотопов для соединений кремния и бора в системах фторид элемента – его комплекс с органическим растворителем, применяемых для разделения изотопов бора и кремния методом химобменной ректификации (химического изотопного обмена с термическим способом обращения потоков).

Показано, что обычный квантово-химический расчет этих систем для молекул исходного фторида и его комплекса с растворителем не объясняют наблюдаемую величину изотопного эффекта, а для корректного описания необходимо учесть поляризующее влияние растворителя на образующийся комплекс. Это влияние учитывалось с помощью модели поляризуемого континуума (PCM). Во всех случаях для систем, исследованных ранее экспериментально, достигнуто хорошее согласие расчетных данных с экспериментальными. Это открывает возможности направленного поиска систем, пригодных для разделения изотопов методом химобменной ректификации.