

Кинетические и термодинамические причины фракционирования изотопов хлора в процессе осаждения галита

© Бочкарев¹ Андрей Владимирович, Белопухов^{2*†} Сергей Леонидович,
Жевнеров¹ Алексей Валерьевич и Овод³ Артем Артурович

Российский государственный аграрный университет – МСХА имени К.А.Тимирязева.

¹Кафедра «Неорганической и аналитической химии». ²Кафедра «Физической и органической химии».

³Лаборатории агроэкологического мониторинга, моделирования и прогнозирования экосистем (ЛАМП). Ул. Тимирязевская, 49. г. Москва, 127550. Россия.

Тел.: ¹⁾ (499) 976-16-28, ²⁾ (499) 976-32-16, ³⁾ (499) 977-04-86. E-mail: belopuhov@mail.ru

*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *изотопы хлора, разделение изотопов, каменная соль, галит.*

Аннотация

Полученные ранее с использованием неэмпирических квантово-химических методов данные по отношению приведенных статсумм по состояниям изотопных форм (β -факторам) для гидратированного хлорид-иона и кристаллического галита использованы для теоретического моделирования разделения изотопов хлора в процессе осаждения NaCl из насыщенного раствора. Было показано, что при осаждении галита в процессе испарения водоема может происходить заметное разделение изотопов, причем доминирует термодинамическая составляющая изотопного эффекта.