

## РАСЧЕТ БЕТТА-ФАКТОРА СОЕДИНЕНИЙ, НАХОДЯЩИХСЯ ВО ВНЕШНЕМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Нейман В.А., Семченко И.С.

Научный руководитель: Мышкин В.Ф., д.ф.-м.н., профессор  
Томский политехнический университет, 634050, Россия, г. Томск, пр.  
Ленина, 30  
E-mail: gos100@list.ru

Специально формируемые смеси изотопов имеют значительно лучшие характеристики, чем их смеси природного состава. Широкому использованию изотопов препятствует высокая себестоимость технологии. Обменные методы разделения изотопов широко используются при промышленном получении многих изотопов. В связи с перспективами расширения сферы применения изотопов является актуальным поиск методов увеличения эффективности метода.

При теоретическом описании процесса изотопного обмена можно использовать несколько подходов. В первом порядке термодинамической теории возмущений к перераспределению стабильных изотопов  $\beta$ -фактор можно выразить через кинетическую энергию колебательного движения и разность масс рассматриваемых изотопов [1]

$$\ln \beta = \frac{M^* - M}{M^*} \left( \frac{E_K}{zRT} - \frac{3}{2} \right),$$

где  $E_K$  - кинетическая энергия (на один моль) колебаний;  $M$  - масса изотопа.

Выражение для расчета  $\beta$ -фактора может быть записано через спектр колебательных частот исходного и замещенного по изотопам соединения [2]

$$\ln \beta = \frac{1}{n} \sum_i^n d_i \ln \left\{ \frac{u'_i \exp(-0,5u'_i)}{u_i \exp(-0,5u_i)} \cdot \frac{1 - \exp(-0,5u'_i)}{1 - \exp(-0,5u_i)} \right\},$$

где  $u_i = \nu_i hc/kT$  - приведенная частота колебания  $\nu_i$ ,  $\text{см}^{-1}$ ,  $d_i$  - кратность вырождения Зеемановских уровней.

Здесь частоты с верхними штрихами относятся к изотопным формам, содержащим большее количество тяжелых изотопов замещаемого атома, а символы без штриха — формам, имеющим большее число легких изотопов.

Известно, что во внешнем магнитном поле происходит расщепление вырожденных электронных уровней на Зеемановские состояния и, соответственно, перераспределение Больцмановского распределения по возбужденным электронным состояниям. Каждому возбужденному

состоянию соответствуют свой колебательный спектр. Во внешнем постоянном магнитном поле происходит изменение  $\beta$ -факторов взаимодействующих фаз вещества, а формула для расчета  $\beta$ -фактора приобретает вид

$$\ln \beta = \left( n + \sum_{i,j} (d_{ij} - 1) \right)^{-1} \sum_i^{n+\sum d_{ij}} \ln \left\{ \frac{u'_i \exp(-0,5u'_i)}{u_i \exp(-0,5u_i)} \cdot \frac{1 - \exp(-0,5u'_i)}{1 - \exp(-0,5u_i)} \right\}$$

Очевидно, что изменение  $\beta$ -факторов соединений, обменивающихся изотопами, тем значительнее, чем больше величина магнитного поля, приводящего к более значительной перестройке электронного, а поэтому и колебательного спектра. При этом должно наблюдаться изменение однократного коэффициента разделения.

Анализировали пары обменивающихся изотопами молекул: NO и  $\text{HNO}_{3\text{ж}}$ ,  $\text{H}_2\text{O}_{(\text{г})}$  и  $\text{HD}_{(\text{г})}$ . Спектр колебательных частот, без магнитного поля, и вычисляли с помощью программ HYPERCHEM и GAUSSIAN, по которому рассчитывали  $\beta$ -факторы. Для расчета  $\beta$ -факторов в магнитном поле учитывали расщепление вырожденных линий изотопных модификаций.

В докладе приводятся результаты анализа рассчитанных значений коэффициента однократного разделения при изотопном обмене во внешнем магнитном поле.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Polyakov V.B., Kharlashina N.N. The use of heat capacity data to calculate carbon isotope fractionation between graphite, diamond, and carbon dioxide: A new approach // *Geochim. Cosmochim. Acta*, 1995. - 59, 2561–2572.
2. Жаворонков Н.М., Князев Д.А., Ивлев А.А. и др. Термодинамика реакций изотопного обмена // *Успехи химии*, 1980. – Т.XLIX. – Вып. 3. – С. 385-419.