

РАСЧЕТ ИЗОТОПНЫХ ЭФФЕКТОВ МАГНИЯ В ЭКСТРАКЦИОННЫХ СИСТЕМАХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КРАУН ЭФИРОВ

С. Л. Белопухов, Р. Ф. Байбеков, А. В. Бочкарев, А. В. Жевнеров, С. В. Демин

Кафедра химии, Российский государственный аграрный университет — МСХА имени К.А.Тимирязева, ул. Тимирязевская, 49. г.Москва, 127550. Россия;

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки, Институт физической химии и электрохимии имени А.Н. Фрумкина РАН,

119071 Москва, Ленинский проспект, 31 корп. 4; E-mail: beloruhov@mail.ru

Поступила в редакцию 20 октября 2021 г., принята к печати 29 ноября 2021 г.

С учетом рассчитанной нами ранее величины b -фактора аквакомплекса иона магния при различных концентрациях магниевых солей рассчитан однократный коэффициент экстракционного разделения изотопов (α) изотопной пары для ^{24}Mg – ^{26}Mg для экстракционной системы, содержащей в органической фазе комплексы катиона магния с краун-эфирами. Более высокий заряд катиона магния по сравнению с литием и тем самым более прочные связи магний – кислород в кольце макроцикла может объяснить причину отсутствия влияния молекул воды в координационной сфере.

Квантово-химические расчеты частот колебаний изотопных форм комплекса с краун-эфиром проводили с помощью программы Firefly. Для расчета всех комплексов применялся базис RHF/6-311++G**. Показано, что наиболее эффективным макроциклическим лигандом для практического разделения изотопов магния является бензо-15-краун-5.

Ключевые слова: неэмпирические квантово-химические методы, магний, аквакомплексы, изотопные эффекты, коэффициенты разделения изотопов, краун-эфиры.