

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ОБРАЗОВАНИЯ ДВУХАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ ПРИ ЭЛЕКТРОТЕРМИЧЕСКОМ МОЛЕКУЛЯРНО-АБСОРБЦИОННОМ ОПРЕДЕЛЕНИИ ГАЛОГЕНОВ И СЕРЫЗайцева П.В.^{1,2}, Пупышев А.А.^{1,2}¹ФГБУН Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия²ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»,

Екатеринбург, Россия

zaitcevapolina@gmail.com

DOI: 10.26902/ASFE-11_23

Определение галогенов и серы методом атомной абсорбции было практически невозможным до создания атомно-абсорбционных спектрометров высокого разрешения с непрерывным источником спектра, позволившим уверенно регистрировать спектры поглощения их двухатомных молекул в традиционных атомизаторах. Экспериментальное аналитическое применение молекулярно-абсорбционного анализа требует в этом случае знания механизма образования таких молекул и возможности управления ими с целью повышения чувствительности и точности анализа.

Для решения этих задач нами разработан алгоритм термодинамического моделирования (ТДМ) термохимических процессов, протекающих в графитовой печи при образовании двухатомных молекул галогенов [1]. Разработанный алгоритм ТДМ позволяет рассчитывать полный химический состав термодинамических подсистем на каждой стадии температурно-временной программы нагрева графитовой печи (высушивание пробы, пиролиз, испарение и образования молекулярного соединения), находить расчетные оценки оптимальных условий их реализации (температуры стадий, исходный химический состав), определять возможные виды матричных неспектральных помех и др.

С помощью программного комплекса HSC 6.1 с собственным банком термодинамических данных и в соответствии с разработанным алгоритмом ТДМ изучены термохимические процессы образования двухатомных фтор- (CaF, BaF, AlF, GaF), хлор- (InCl, SrCl и др.), йод- (SrI, BaI, CaI и др.) и серосодержащих (SnS, GeS, CS и др.) молекул в графитовой печи. Правильность моделирования подтверждена совпадением экспериментальных и теоретических кривых пиролиза и образования двухатомных галогенсодержащих молекул в аналитической зоне графитовой печи.

Результаты моделирования полезны для выбора химического агента, температурно-временной программы, химического модификатора, повышения чувствительности и точности электротермического молекулярно-абсорбционного определения галогенов и серы.

Список литературы

1. Зайцева П.В. Изучение термохимических процессов атомизации элементов и образования молекул в традиционных атомизаторах (на примере рения, фтора и хлора): дис. ... канд. хим. наук: 02.00.02 / Зайцева Полина Владимировна. – Екатеринбург, 2016. – 180 с.

Работа выполнена по Государственному заданию ИМЕТ УрО РАН в рамках Программы фундаментальных исследований государственных академий.