

4. Dorosheva, I.B., Valeeva, A.A., et. al., AIP Conference Proceedings, 1886, 020006 (2017).
5. Park, A.R., Son, D.Y. et al., ACS Appl. Mater. Interfaces 7, 18483-18490 (2015).

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ ЭЛЕКТРОТЕРМИЧЕСКОГО МОЛЕКУЛЯРНО-АБСОРБЦИОННОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЙОДА

Ельцов Д.А.¹, Зайцева П.В.^{1, 2}, Пупышев А.А.^{1, 2}

¹) Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия

²) Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия

E-mail: dimaelcov2013@gmail.com

THEORETICAL STUDY OF THE POSSIBILITY OF ELECTROTHERMAL MOLECULAR ABSORPTION DETERMINATION OF IODINE

Eltsov D.A.¹, Zaitceva P.V.^{1, 2}, Pupyshev A.A.^{1, 2}

¹) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²) Institute of Metallurgy UB RAS, Yekaterinburg, Russia

Thermochemical processes of gaseous molecules SrI and BaI formation, which are used in the electrothermal molecular absorption determination of iodine, were studied using the method of thermodynamic simulation.

В последние годы опубликованы работы по электротермическому молекулярно-абсорбционному определению йода с использованием газообразных молекул BaI, SrI, CaI и InI. Однако некоторые полученные экспериментальные данные неоднозначны, а механизм образования газообразных молекул, содержащих йод, в графитовой печи по-прежнему не изучен.

Для решения этой задачи использовали разработанный ранее алгоритм термодинамического моделирования, который успешно был применен к изучению механизмов образования двухатомных молекул фтора и хлора. С использованием программного комплекса HSC 6.1 рассчитаны равновесные составы термодинамических систем на стадиях пиролиза и испарения, а затем построены теоретические кривые пиролиза и испарения. В качестве молекулообразующих химических агентов изучены соли бария и стронция. Рассмотрены различные формы введения йода и молекулообразующего агента в графитовую печь. Условия моделирования соответствовали экспериментальным данным [1, 2].

При определении йода по поглощению молекул SrI расчеты показали, что уже при начальных температурах стадии пиролиза как в зоне поверхности пробы, так и в зоне контакта пробы с углеродом атомизатора йод присутствует в виде конденсированного SrI₂. Заметные газообразные потери на этой стадии возможны в

зоне поверхности пробы выше 600 °С в виде газообразного I^g , а в зоне контакта пробы с углеродом атомизатора в выше 750 °С в виде SrI_2^g и SrI^g . Рассчитанные температуры стадий пиролиза (600 °С) и испарения (2130 °С) соответствуют экспериментальным (700 °С и 2100 °С, соответственно). Молекулы SrI^g , согласно рассчитанному равновесному составу, на стадии испарения в газовой фазе графитовой печи образуются за счет реакции: $SrI_2^g = SrI^g + I^g$.

При определении йода по поглощению молекул BaI прогнозируются аналогичные процессы, что и для SrI . Согласно расчетам, на стадии пиролиза в зоне поверхности пробы заметные потери йода в газовую фазу возможны выше 550 °С в виде I^g , а в зоне контакта пробы с углеродом атомизатора – выше 850 °С в виде BaI_2^g и BaI^g . Согласно рассчитанному равновесному составу на стадии испарения в газовой фазе графитовой печи молекулы BaI^g образуются за счет реакции $BaI_2^g = BaI^g + I^g$.

Результаты моделирования полезны для выбора условий молекулярно-абсорбционного определения йода: выбор молекулообразующего агента, температурно-временной программы, химического модификатора и т.д.

1. 1. M. Schneider, B. Welz, M.-D. Huang, H. Becker-Ross, M. Okruss, E. Carasek, *Spectrochimica Acta. Part B*, 153, 42–49 (2019).

2. 2. M.D. Huang, H. Becker-Ross, S. Florek, M. Okruss, B. Welz, S. Morés, *Spectrochimica Acta. Part B*, 64, 697–701 (2009).