

этилацетата и гексана в воздушной среде может найти практическое применение.

*Работа выполнена при поддержке программы стратегического развития ТвГУ, проект № 2.1.2.5.*

## **ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ МОЛЕКУЛ SrF ПРИ ЭЛЕКТРОТЕРМИЧЕСКОМ МОЛЕКУЛЯРНО-АБСОРБЦИОННОМ ОПРЕДЕЛЕНИИ ФТОРА**

*Зайцева П.В., Пупышев А.А., Курмачев Ю.А.*

Уральский федеральный университет

620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Одновременно с разработкой экспрессных методик молекулярно-абсорбционного определения фтора в различных объектах анализа с использованием атомно-абсорбционных спектрометров высокого разрешения с непрерывным источником света (HR CS AAS) возникла потребность изучения механизма образования его двухатомных молекул MeF. Это необходимо для проведения градуировки, учета и устранения матричных помех, улучшения метрологических показателей анализа.

Первые исследования механизма образования молекул SrF, выполненные только экспериментально [1], показали малоинформативность и неоднозначность получаемой информации. Цель данных исследований – разработка на примере молекул SrF теоретического алгоритма изучения механизма образования димерных молекул MeF при электротермическом варианте молекулярно-абсорбционного определения фтора.

С использованием программного комплекса HSC 6.1 с собственным банком термодинамических данных выполнено термодинамическое моделирование термохимических процессов стадии высушивания пробы, стадий пиролиза и испарения при внесении растворов  $\text{Sr}(\text{NO}_3)_2$  и NaF на платформу графитовой печи. Условия моделирования соответствовали экспериментальным данным [1]. Расчеты показали, что в случае совместного внесения  $\text{Sr}(\text{NO}_3)_2$  и NaF на один участок платформы уже на стадии высушивания пробы возможно протекание обменной реакции с образованием конденсированного  $\text{SrF}_2^c$ . На стадии пиролиза в зоне поверхности пробы прогнозируются потери фтора в газовую фазу в виде  $\text{NaF}^g$  в диапазоне температур 800-1000 °C, а значимые – выше 1250 °C в виде  $\text{SrF}^g$  и  $\text{SrF}_2^g$ . При этом в зоне контакта пробы с углеродом атомизатора потерь фтора в газовую фазу графитовой печи не должно происходить до 1100 °C, т.е. разложения  $\text{SrF}_2^c$  до  $\text{SrF}^g$ . NaF не является оп-

тимальным веществом для градуировки по фтору, в этом случае лучше использовать  $\text{NH}_4\text{F}$ .

При раздельном внесении растворов  $\text{Sr}(\text{NO}_3)_2$  и  $\text{NaF}$  на разные участки платформы на стадии высушивания раствора  $\text{NaF}$  образуется  $\text{NaF}^c$ , который на стадии пиролиза как в зоне поверхности пробы, так и в зоне контакта пробы с углеродом атомизатора начинает разлагаться до газообразных  $\text{NaF}^g$  и  $\text{Na}_2\text{F}_2^g$ , что будет определять температуры стадии пиролиза. В данном случае образование газообразной молекулы  $\text{SrF}^g$  будет происходить в газовой фазе аналитической зоны графитовой печи на стадии испарения.

Соответствие рассчитанных теоретически температур стадии пиролиза экспериментальным данным свидетельствует о правильности использованного подхода. В результате исследований на примере молекул  $\text{SrF}^g$  разработан алгоритм теоретического изучения механизма образования двухатомных молекул в графитовой печи, который можно применять для изучения механизмов образования других молекул  $\text{MeF}$ , а также двухатомных молекул  $\text{Cl}$ ,  $\text{Br}$ ,  $\text{J}$ ,  $\text{P}$  и  $\text{S}$ , с целью последующей оптимизации определения данных элементов методом молекулярно-абсорбционного анализа.

1. Ozbek N., Akman S. Molecule formation mechanisms of strontium mono fluoride in high-resolution continuum source electrothermal atomic absorption spectrometry // *Analytical Sciences*. 2013. V. 29. P. 741–746.

## **СОРБИЦИОННЫЕ СВОЙСТВА СОПОЛИМЕРА НА ОСНОВЕ ВИНИЛТРИАЗОЛА ПО ОТНОШЕНИЮ К ИОНАМ СЕРЕБРА**

*Елаева И.Е., Бабенко Т.А., Узлова Е.М.*

Иркутский государственный университет  
664003, г. Иркутск, ул. К. Маркса, д. 1

Эффективным способом выделения и концентрирования ионов серебра из кислых, агрессивных технологических растворов является сорбция с использованием комплексобразующих сорбентов. Интерес представляют сорбенты, функциональные группы которых содержат донорные атомы, способные образовывать прочные связи с ионами металлов. Тогда состав, и строение комплексов, образующихся при взаимодействии ионов серебра с функциональными группами сорбента, как полимерным лигандом, представляют самостоятельный интерес для координационной химии элемента.