

# ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ГРАФИТОВОЙ ПЕЧИ ПРИ АТОМНО- И МОЛЕКУЛЯРНО-АБСОРБЦИОННОМ ОПРЕДЕЛЕНИИ ФОСФОРА

Михеева А.В.\*, Пупышев А.А., Зайцева П.В.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина,  
г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: [mikheeva\\_av@mail.ru](mailto:mikheeva_av@mail.ru)

## THERMODYNAMIC SIMULATION OF THERMOCHEMICAL PROCESSES IN GRAPHITE FURNACE FOR PHOSPHORUS DETERMINATION USING ATOMIC AND MOLECULAR ABSORPTION SPECTROMETRY

Mikheeva A.V.\*, Pupyshv A.A., Zaitceva P.V.

Ural Federal University named after the first President of Russia  
B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

Thermochemical processes of gaseous atoms  $P^g$  and molecules formation  $PO^g$  in the graphite furnace with chemical modifier were studied using the method of the thermodynamic simulation.

При электротермическом атомно- и молекулярно-абсорбционном определении фосфора в различных объектах анализа необходимо знать термохимические процессы образования его атомов  $P^g$  и двухатомных молекул  $PO^g$ . В [1] экспериментально показано, что такое определение фосфора без использования модификаторов практически невозможно из-за низкой температуры стадии пиролиза.

По экспериментальным данным [1] выполнено термодинамическое моделирование термохимических процессов стадий пиролиза и атомизации/испарения атомов и молекул фосфора в отсутствии и присутствии фторсодержащих матричных модификаторов.

Расчеты показали, что в отсутствии модификатора в зоне поверхности пробы при начальных температурах стадии пиролиза фосфор присутствует в системе в виде конденсированного  $H_3PO_4^c$ , а заметные потери фосфора в газовую фазу должны происходить при температуре выше 250 °С. При контакте пробы с углеродом атомизатора уже при начальных температурах стадии пиролиза наблюдаются 100 % потери фосфора в газовую фазу.

Удержание фосфора в конденсированном остатке пробы на стадии пиролиза в присутствии NaF происходит за счет образования  $Na_xP_yO_z^c$ , устойчивых до 1100 °С. Образование молекул  $PO^g$  возможно только на стадии испарения за счет диссоциации  $Na_xP_yO_z^c$ . При более высоких температурах стадии испаре-

ния происходит частичная диссоциация газообразных молекул  $P_xO_y^g$  до атомов  $P^g$ .

При использовании модификатора  $NH_4F$  уже при начальных температурах стадии пиролиза в зоне поверхности пробы фосфор находится в виде  $NH_4H_2PO_4^c$  и  $H_3PO_4^c$ , которые разлагаются с образованием преимущественно  $PF_3^g$ . В зоне контакта пробы с поверхностью атомизатора наблюдаются потери фосфора в газовую фазу в виде оксида  $P_4O_6^g$  уже при  $100^\circ C$ . При  $110^\circ C$  на стадии высушивания пробы  $NH_4F^c$  практически полностью переходит в  $HF^g$ , вследствие чего на стадиях пиролиза и атомизации/испарения не образуется труднолетучих соединений фосфора. Согласно расчетам, фторид натрия является более эффективным химическим модификатором при электротермическом атомно-абсорбционном определении фосфора, чем фторид аммония.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 14-03-31065 мол\_а.*

1. Mikheeva A.V., Pupyshev A.A., Zaitceva P.V. Chem. in the federal university, 88 (2015).

## **ПОЛУЧЕНИЕ ЦИРКОНИЕВОЙ КЕРАМИКИ ИЗ КОМПОЗИЦИЙ «МИКРОПОРОШОК - НАНОПОРОШОК»**

Чернецкий И.В.\*, Власов А.В., Селиверстов А.В., Устюжанинова И.А.,  
Денисова Э.И., Карташов В.В.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина,  
г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: [y4ernetskiy@urfu.ru](mailto:y4ernetskiy@urfu.ru)

## **PRODUCTION OF ZIRCONIA CERAMICS FROM A COMPOSITIONS «MICROPOWDER – NANOPOWDER»**

Chernetskiy I.V.\*, Vlasov A.V., Seliverstov A.V., Ustyuzhaninova I.A.,  
Denisova E.I., Kartashov V.V.

Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The possibility of producing a hardened zirconium ceramic from a composition micropowder-nanopowder using the simplified process of mixing and baking powder materials was studied.

В процессе создания новых машин и аппаратов все чаще возникает потребность в уникальных конструкционных материалах. Их применение - залог надежности и долговечности самых различных узлов и деталей ответственного