

ПРОЦЕСИ ПРИ ЕЛЕКТРОТЕРМІЧНІЙ АТОМІЗАЦІЇ ТА ЇХ МОДЕЛЮВАННЯ

мол. наук. співр. Бугай О.М.

Інформація про процеси, що відбуваються при електротермічній атомізації в атомно-абсорбційному спектрометрі може бути використана при розробці методів покращення аналітичних характеристик. Така інформація найчастіше отримується з атомно-абсорбційного (АА) сигналу і її достовірність залежить від адекватності моделі, яка описує утворення АА сигналу. Для адекватного опису процесу утворення атомно-абсорбційного сигналу, необхідно щоб створена модель враховувала вплив поверхневих явищ.

Найбільш перспективним є підхід, в якому АА сигнал описується за допомогою динамічного накладання процесів утворення вільних атомів та їх динамічного винесення. Для описання динаміки цих процесів було застосовано рівняння дифузії з двома незалежними джерелами, в якому одне джерело описує атомізацію атомів, що знаходяться на поверхні печі, інше – утворення атомів всередині стінки графітової печі та їх вихід в аналітичну зону. Використовуючи ряд фактів та припущень, було отримано рівняння, яке описує утворення АА сигналу в реальних неізотермічних умовах:

$$A(t) = C_1 \frac{k_1^s}{k_2 - k_1^s} (\exp(-k_1^s t) - \exp(-k_2 t)) + C_2 \frac{k_1^p k_{gr}}{k_{gr} - k_1^p} \times$$
$$\times \left[\frac{1}{k_2 - k_1^p} (\exp(-k_1^p t) - \exp(-k_2 t)) - \frac{1}{k_2 - k_{gr}} (\exp(-k_{gr} t) - \exp(-k_2 t)) \right],$$

де k_1^s , k_1^p – константи швидкостей утворення вільних атомів на поверхні печі та в товщі графіту; k_2 і k_{gr} – константи швидкостей процесів дифузійного винесення та дифузії в графіті, відповідно.

Зазначимо, що величина константи швидкості утворення вільних атомів та константа швидкості дифузії в графіті залежать від температури печі, а константа швидкості дифузійного винесення вільних атомів залежить від температури газової фази. Для опису залежності температури печі від часу можна застосувати рівняння

$$T_f(t) = T_{end} - (T_{end} - T_{beg}) \cdot \exp\left(\frac{-t}{\tau_c}\right),$$

де $T_f(t)$ – температура печі в момент часу t ; T_{end} – кінцева установочна температура розігріву; T_{beg} – початкова температура розігріву печі; τ_c – характерний час розігріву печі.

Температуру газової фази можна визначити з рівняння:

$$T_{gas}(t) = T_{end} - \frac{T_{end} - T_{begin}}{\tau_{gas} - \tau_c} \left(\tau_{gas} \exp\left(-\frac{t}{\tau_{gas}}\right) - \tau_c \exp\left(-\frac{t}{\tau_c}\right) \right),$$

де $T_{gas}(t)$ – температура печі в момент часу t ; τ_{gas} – характерний час розігріву газової фази.

При певному співвідношенні характерних часів розігріву τ_c та τ_{gas} температура печі і температура газової фази починають співпадати. В такому випадку при моделюванні можна застосовувати лише рівняння залежності від часу температури печі. Можливість використання лише одного рівняння визначається експериментально.

З використанням запропонованої моделі були досліджені механізми атомізації міді, срібла та цинку.