

# ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЛЯ МЕТОДА АТОМНО-ЭМИССИОННОЙ СПЕКТРОМЕТРИИ С ИНДУКТИВНО СВЯЗАННОЙ ПЛАЗМОЙ

**Пупышев А.А., Данилова Д.А.**

Учебное пособие. Екатеринбург: ГОУ ВПО УГТУ-УПИ, 2005. 76 с.

Учебное пособие впервые знакомит с инженерными методами расчетов для описания термохимических процессов в плазме индуктивно связанного разряда и прогнозирования оптимальных условий аналитических определений атомно-эмиссионной спектрометрией с использованием данного источника возбуждения спектров.

Кратко изложены основные принципы методов термодинамического моделирования и атомно-эмиссионной спектрометрии с индуктивно связанный плазмой, приведены необходимые для моделирования физические характеристики разряда, основные допущения и ограничения разработанной термодинамической модели. Изложены алгоритмы решения различных аналитических задач с приведением конкретных примеров решений. Приведена обширная справочная информация, необходимая для проведения данных расчетов: комплекты термодинамических свойств атомов и атомных ионов, а также их суммы по энергетическим состояниям.

Пособие предназначено для студентов, бакалавров, дипломированных специалистов, магистров, аспирантов и преподавателей химических и физических специальностей высших учебных заведений России, а также инженерно-технических и научных работников лабораторий спектрального анализа.

Библиогр.: 27 назв. Рис. 9. Табл. 8. Прил. 2.

## Содержание

### Введение

1. Основные принципы и аппаратура метода атомно-эмиссионной спектрометрии с индуктивно связанный плазмой
2. Основные принципы метода равновесного термодинамического моделирования и расчетные программы
3. Термодинамическая модель и ее основные допущения
4. Выполнение расчетов равновесного состава плазмы
  - 4.1. Директивы к конкретному варианту расчета
    - 1.1. Термодинамические свойства индивидуальных веществ
    - 1.2. Исходные данные, задающие элементарный состав термодинамической системы, и параметры, определяющие условия равновесия

2. Расчет интенсивности спектральных линий
3. Основные приемы моделирования
  - 3.1. Влияние температуры плазмы на интенсивность спектральных линий
  - 3.2. Изучение и прогнозирование матричных влияний
  - 3.3. Снижение пределов обнаружения элементов
  - 3.4. Выбор элемента внутреннего стандарта и его спектральной линии
    - 3.4.1. Коррекция матричных влияний
    - 3.4.2. Использование корреляционных коэффициентов
    - 3.4.3. Аксиально наблюдаемая плазма
4. Библиографический список

### Приложение

\* \* \* \*

**Справки по тел.: (343)3754658 или e-mail: pupyshев@dpt.ustu.ru (Пупышев Александр Алексеевич)**

