

## **В БИБЛИОТЕКУ СПЕЦИАЛИСТА**

**Пупышев А.А.** Термодинамическое моделирование термохимических процессов в спектральных источниках. Учебное электронное текстовое издание. Екатеринбург: ГОУ ВПО УГТУ-УПИ, 2007. 85 с. Электронный ресурс: [http://study.ustu.ru/view/aid\\_view.aspx?AidId=478](http://study.ustu.ru/view/aid_view.aspx?AidId=478)

Методические указания содержат сведения о методе термодинамического моделирования и о многоцелевых программных комплексах АСТРА.4 и HSC, предназначенных для определения характеристик равновесия, фазового и химического состава многокомпонентных гетерогенных высокотемпературных систем. Приведены правила пользования программными комплексами и общие рекомендации по применению метода термодинамического моделирования.

Рассмотрены конкретные алгоритмы и примеры использования метода термодинамического моделирования для изучения термохимических процессов в источниках атомизации, ионизации и возбуждения спектров (методы атомно-абсорбционной спектроскопии с пламенной и электротермической атомизацией, атомно-эмиссионной спектроскопии с возбуждением спектров в дуге и индуктивно связанной плазме, масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой).

### **СОДЕРЖАНИЕ**

#### **ВВЕДЕНИЕ**

1. ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС АСТРА.4
2. РАБОТА С ПРОГРАММНЫМ КОМПЛЕКСОМ АСТРА.4
3. ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС HSC CHEMISTRY
4. РАБОТА С ПРОГРАММНЫМ КОМПЛЕКСОМ HSC CHEMISTRY
5. ОСНОВЫ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ
  - 5.1. Этапы термодинамического моделирования
  - 5.2. Методические рекомендации по проведению термодинамического моделирования
6. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ПРИЛОЖЕНИИ К ЗАДАЧАМ ИЗУЧЕНИЯ ТЕРМОХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В СПЕКТРАЛЬНЫХ ИСТОЧНИКАХ
  - 6.1. Процессы в пламенах
  - 6.2. Термическое разложение конденсированных веществ и их смесей
  - 6.3. Термохимические процессы при электротермической атомизации элементов в графитовой печи
    - 6.3.1. Стадия пиролиза
    - 6.3.2. Стадия атомизации
  - 6.4. Дуговой разряд постоянного тока с испарением вещества пробы из кратера или тела электрода
  - 6.5. Атомная-спектрометрия с индуктивно связанной плазмой
    - 6.5.1. Масс-спектрометрия с индуктивно связанной плазмой
    - 6.5.2. Атомно-эмиссионная спектроскопия с индуктивно связанной плазмой
7. БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК