**Термодинамика адсорбции органических соединений различной геометрии и функциональной принадлежности на поверхности *sp2*-гибридных форм углерода**

***Дмитриев Д.Н.1,3*, *Яшкин С.Н.2,3, Попов А.С.1, Пирогов А.В.1, Шпигун О.А.1***

*Студент,2 курс специалитета*

*1Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

*химический факультет, Москва, Россия*

*2 Самарский государственный технический университет, Самара, Россия*

*3Самарский региональный центр для одарённых детей, Самара, Россия*

*E-mail:* [*ddn063@gmail.com*](mailto:ddn063@gmail.com)

Углеродные адсорбенты (графит, алмаз, фуллерены, нанотрубки и др.) занимают лидирующее положение в адсорбционной хроматографии благодаря самым высоким показателям структурной селективности и адсорбционной емкости. Именно сочетание высоких химической и термической устойчивостей определяет удобные эксплуатационные характеристики данных материалов в качестве хроматографических сорбентов. В продолжение проводимых нами исследований [1,2], представлял интерес сравнительный анализ величин ТХА различных по электронному и пространственному строению молекул органических адсорбатов, полученных при адсорбции на различных аллотропных модификациях углерода в условиях газовой хроматографии. Кроме того, представляло интерес изучение влияния кривизны и фрактальной размерности поверхности кристаллов С60 и С70 на ТХА различных классов органических соединений и на характер межмолекулярных взаимодействий «адсорбат-поверхность кристалла фуллерена».

Хроматографические измерения проводили на хроматографах «Хроматэк-Кристалл» и «Хромос» с ПИД в изотермическом режиме в широком интервале температур. Газами-носителями служили гелий и азот. Применяли стеклянные микронасадочные колонки (70 см × 2 мм), заполненные кристаллами фуллеренов (>99.9 %). Пробы адсорбатов вводили в виде разбавленных паровоздушных смесей или растворов в соответствующих растворителях, что позволило выполнить измерения в области предельно малых заполнений поверхности адсорбента (области Генри), с целью исключить латеральные взаимодействия «адсорбат-адсорбат».

В работе впервые определены неспецифический и специфические вклады в общую энергию адсорбции молекул различной геометрии и состава на поверхности С60 и С70, а также графитированной термической сажи. Впервые показано, что π-дефицитный характер поверхности фуллеренов обуславливает реализацию дополнительных специфических взаимодействий с адсорбатами, имеющими электронодонорные группы в своем составе. Это является причиной высокой чувствительности поверхности фуллеренов к адсорбции нитро-, циано-, галоген-, оксосодержащих сорбатов. Определен интервал структурной селективности поверхности изученных фуллеренов в отношении различных изомеров перечисленных функциональных производных. Также исследованы селективные свойства поверхности фуллеренов в отношении молекул различной геометрии на примере молекул линейного, циклического, гетероциклического и каркасного строения. Новые результаты получены при разделении структурных и геометрических изомеров производных адамантана, характеризующихся большим числом соединений с близкими физико-химическими свойствами.

Также с помощью предложенного нами хроматографического метода оценки «шероховатости» (в единицах фрактальности) поверхности определены особенности геометрии адсорбционного пространства «адсорбат-адсорбент» и показано их влияние на сорбционно-хроматографические свойства изученных углеродных материалов.

**Литература**

1. 1. Яшкин С.Н., Дмитриев Д.Н., Яшкина Е.А., Светлов Д.А., *Изв. РАН. Сер. хим.*, 2022, Т.71, С.1878–1886.

Дмитриев Д.Н., Яшкин С.Н., Яшкина Е.А., *Изв. РАН. Сер. хим.*, 2024, Т.73 (в печати).