**Инверсионная газовая хроматография в исследовании**

**адсорбционно-хроматографических свойств углеродных материалов**

***Дмитриев Д.Н.1,3*, Яшкин С.Н.*2,3*, Светлов Д.А.*3*, Яшкина Е.А.*3*, Попов А.С.*1***

*Студент, 1 курс специалитета*

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

*химический факультет, Москва, Россия*

*2Самарский государственный технический университет, Самара, Россия*

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

*E-mail:* *ddn063@gmail.com*

Углеродные адсорбенты занимают лидирующее положение в практике газо-адсорбционной хроматографии в качестве высокоселективных, термически стойких и универсальных адсорбентов. Прогресс в области нанотехнологий значительно расширил спектр аллотропных модификаций углерода (графены, фуллерены, нанотрубки и др.), адсорбционные свойства поверхности которых заметно различаются. Вместе с тем, несмотря на существенные различия в морфологии поверхности различных аллотропных форм углерода, все они характеризуются высокой химической инертностью, термической стабильностью, значительным адсорбционным потенциалом, что позволяет рассматривать их в качестве перспективных материалов в качестве сорбентов в газовой хроматографии, сенсорных систем, катализаторов и др. Удобным методом исследования свойств углеродных материалов является инверсионная газовая хроматография (ИГХ) на микронасадочных колонках. Высокая чувствительность ГХ-детекторов позволяет определять термодинамические характеристики адсорбции (ТХА) различных адсорбатов для наиболее активных участков поверхности в области предельно малых заполнений, что исключает вклад латеральных взаимодействий адсорбат-адсорбат в общую энергию адсорбции. Долгое время считалось, что на поверхности углеродных материалов, не содержащих атомы других элементов, реализуются исключительно дисперсионные межмолекулярные взаимодействия адсорбат-адсорбент. Вместе с тем, накоплено достаточно сведений о том, что общая энергия адсорбции определяется вкладом различных видов межмолекулярных взаимодействий: дисперсионные, электростатические индукционные и электростатические ориентационные взаимодействия. При этом вклад специфических взаимодействий определяется полярностью молекул адсорбатов и особенностями морфологии поверхности углеродного адсорбента. Так в случае неполярной поверхности ГТС могут быть реализованы лишь дисперсионные и индукционные взаимодействия адсорбат-адсорбент [1], в то время как в случае искривлённой π-дефицитной поверхности молекулярных кристаллов фуллеренов С60 реализуется более широкий спектр межмолекулярных взаимодействий [2].

В продолжении проводимых нами исследований [1,2] в работе были определены неспецифический и специфические вклады в общую энергию адсорбции молекул различной геометрии и состава на поверхности различных типов саж, фуллеренов и углеродных нанотрубок. В рамках сольватационной модели Абрахама исследована способность изученных адсорбентов к разным типам межмолекулярных взаимодействий, определена их общая хроматографическая полярность, селективность в отношении изомеров разного типа (структурных и пространственных). С помощью предложенного нами хроматографического метода оценки шероховатости поверхности определены особенности геометрии адсорбционного пространства адсорбат-адсорбент и показано влияние найденных закономерностей на сорбционно-хроматографические свойства изученных углеродных материалов. Впервые показано, что по классификации А.В. Киселёва молекулярные кристаллы С60 могут быть отнесены к адсорбентам II типа – сорбентам с электроположительными центрами на поверхности.

**Литература**

1. Яшкин С.Н., Дмитриев Д.Н., Яшкина Е.А., Светлов Д.А., *Изв. РАН. Сер. хим.*, 2022, Т.71, С.1878-1886.
2. Дмитриев Д.Н., Яшкин С.Н., Яшкина Е.А., *Изв. РАН. Сер. хим.*, 2023, Т.72 (в печати).