

**СТРУКТУРНАЯ СЕЛЕКТИВНОСТЬ УГЛЕРОДНЫХ АДСОРБЕНТОВ  
ДЛЯ ГАЗО-АДСОРБЦИОННОЙ ХРОМАТОГРАФИИ**

Яшкина Е.А.<sup>(1)</sup>, Дмитриев Д.Н.<sup>(1,2)</sup>, Базилин А.В.<sup>(3)</sup>, Яшкин С.Н.<sup>(1,3)</sup>, Шевцов К.А.<sup>(1)</sup>

<sup>(1)</sup> Самарский региональный центр для одаренных детей

443016, г. Самара, ул. Черемшанская, д. 70

<sup>(2)</sup> Московский государственный университет

119991, г. Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3

<sup>(3)</sup> Самарский государственный технический университет

443100, г. Самара, ул. Молодогвардейская, д. 244

Впервые систематизированы данные по структурной селективности большого числа применяемых в современной ГАХ адсорбентов. Выполнен детальный анализ понятия «селективность сорбентов», которая определяется их чувствительностью к особенностям молекулярного строения сорбатов, а также способностью к различным типам межмолекулярных взаимодействий. Показано, что интервал селективности сорбентов определяется совокупностью различных факторов – спектром проявляемых межмолекулярных взаимодействий, геометрическим строением, фрактальностью, а также рядом физико-химических параметров. Анализ большого массива сорбционных данных на различных сорбентах позволяет говорить о *структурной, энергетической, размерной* и других видах селективности. Нами развивается подход, основанный на понятии о *nD*-размерной структурной селективности сорбентов. Основу этого подхода составляют представления о двумерном (2D) и трехмерном (3D) характере адсорбционных и абсорбционных явлений. При этом структурная селективность сорбента должна оцениваться по соединениям-реперам. Среди всего многообразия молекулярных форм можно найти такие соединения, которые бы обладали наиболее ярко выраженным геометрическим подобием в отношении размерности пространства реализуемых сорбционной системой межмолекулярных взаимодействий. Одним из критериев выбора таких молекул-селекторов может быть принцип структурного подобия в пространственном строении сорбата и поля сил сорбента. Так, в случае адсорбции на твердой поверхности оказывается справедливым правило: *геометрически подобное хорошо адсорбируется на геометрически подобном*, которое хорошо согласуется с известными экспериментальными фактами: наибольшее сродство к поверхности плоского адсорбента (2D) будут иметь плоские или линейные молекулы. В случае же шероховатых или объемных сорбентов (пористые тела, макроциклические комплексообразователи и др.) (3D), большим сродством к поверхности характеризуются объемные молекулы, геометрические размеры которых близки к размеру полости или поверхностного фрактала в сорбенте. Обсуждаются достоинства и ограничения известных классификационных подходов при выборе сорбентов с максимальными показателями структурной селективности в отношении компонентов разделяемой сложной смеси аналитов.