

## Термодинамика сорбции производных бензотриазола из водноорганических элюентов

© Джабиева<sup>1</sup> Сара Али Кызы, Тагиев<sup>1</sup> Дильгам Бебир оглы,  
Зейналов<sup>1</sup> Низами Аллахверди оглы и Курбатова<sup>2\*+</sup> Светлана Викторовна

<sup>1</sup> Институт катализа и неорганической химии имени академика М.Ф. Нагиева. Национальная академия наук Азербайджана. проспект Гусейна Джавида, 113. AZ1143, Баку, Азербайджан.

<sup>2</sup> Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королёва.  
ул. Акад. Павлова, 1. г. Самара, 443011. Россия. Факс: (846) 334-54-17. E-mail: [curbatsv@gmail.com](mailto:curbatsv@gmail.com)

\*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** производные бензотриазола, высокоэффективная жидкостная хроматография, сверхсшитый полистирол, термодинамика сорбции, водноацетонитрильный элюент, энтальпия сорбции, энергия Гиббса сорбции.

### Аннотация

Исследована температурная зависимость хроматографического удерживания производных бензотриазола на сверхсшитом полистироле из водноацетонитрильного элюента с различным содержанием ацетонитрила. Показано, что удерживание производных бензотриазола на поверхности сверхсшитого полистирола в целом подчиняется закономерностям обращенно-фазового варианта ВЭЖХ. При этом основной вклад в хроматографическое удерживание вносят дисперсионные взаимодействия гетероароматического фрагмента с поверхностью сорбента, однако присутствие функциональных групп различной химической природы в основном гетероароматическом фрагменте приводят к значительным вариациям сорбционных характеристик, определяемым также составом элюента. Из экспериментально определенных термодинамических характеристик сорбции производных бензотриазола следует, что значения изменения стандартных мольных энтальпии и энергии Гиббса сорбции при переходе молекул исследованных аналитов из объемного раствора в поверхностный слой ССПС являются отрицательными. Этот факт свидетельствует об экзотермичности процесса и самопроизвольном его протекании. При этом значения термодинамических параметров исследованных производных варьируют в сравнительно узком диапазоне и определяются, главным образом, природой заместителя и его положением в гетероцикле, оставаясь в целом не столь значительными, как величины фактора удерживания. На основании анализа рассчитанных значений энтальпии и энергии Гиббса сорбции установлено влияние природы функциональных групп на удерживание исследованных веществ, а также различия в значениях термодинамических величин для соединений с электронодонорными и электроноакцепторными заместителями, способными к  $\pi$ -взаимодействиям с поверхностью сверхсшитого полистирола и образованию водородной связи с компонентами подвижной фазы. Продемонстрировано отсутствие эффекта энтропийно-энтальпийной компенсации, связанное с конкурентными взаимодействиями сорбатов с поверхностью сорбента и объемной фазой элюента. Изучена зависимость термодинамических характеристик сорбции от структурных и топологических параметров молекул сорбатов. Установлено влияние стереохимии молекул сорбатов, изменяющейся под влиянием полярных молекул компонентов подвижной фазы, на удерживание. Показана симбатность в изменении значений энергии Гиббса сорбции и величин площади поверхности и проекции площади поверхности молекул на плоскость сорбента, обусловленная усилением взаимодействия молекул сорбатов, имеющих большую поверхность, за счет  $\pi$ -стекинга.