

## Особенности адсорбции на микропористом металл-органическом каркасном полимере НКУСТ-1 летучих органических соединений разных классов

© **Мартина Юлия Вячеславовна, Копытин Кирилл Александрович, Онучак\*+ Людмила Артёмовна**

*Кафедра физической химии и хроматографии. Естественнонаучный институт. Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королёва (Самарский университет). ул. Московское шоссе, 34. г. Самара, 443086. Самарская обл. Россия.  
Тел.: +7 (846) 334-54-47. E-mail: onuchakla@mail.ru*

\*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** металл-органический каркасный полимер, микропористый адсорбент, газовая хроматография, термодинамические характеристики адсорбции, селективность.

### Аннотация

В работе с использованием метода обращённой газовой хроматографии проведено исследование адсорбционных и селективных свойств микропористого металл-органического каркасного полимера бензил-1,3,5-триметилкарбоксилата меди (НКУСТ-1) по отношению к шестнадцати летучим органическим соединениям разных классов с линейными размерами молекул, не превышающими 10 Å. Для определения термодинамических характеристик адсорбции, близких к равновесным, разработана и обоснована методика газохроматографического эксперимента с применением микронасадочной колонки (0.53 мм × 50 см), заполненной кристаллитами НКУСТ-1. Методика предполагает ввод в колонку малых проб паро-образных адсорбатов (область Генри), выполнение эксперимента в том интервале скоростей газового потока, в котором характеристики удерживания сохранялись практически постоянными, а адсорбаты элюировались из колонки с не слишком размытыми пиками и за приемлемое время. На основании экспериментальных данных рассчитаны термодинамические характеристики адсорбции алканов C<sub>5</sub>-C<sub>8</sub>, аренов C<sub>6</sub>-C<sub>8</sub>, циклогексана, хлорпроизводных метана, метанола и нитрометана. Показано, что адсорбент НКУСТ-1, содержащий в своей кристаллической структуре три типа микропор различного диаметра, проявляет смешанный механизм адсорбции. В зависимости от электронного строения, формы и размеров молекулы адсорбата проявляются различные типы межмолекулярных взаимодействий, а также наблюдаются ситовый эффект для адсорбатов с линейными размерами  $l > 4\text{Å}$  и очень высокая способность к адсорбции полярных веществ с молекулами малого линейного размера (2.8-3Å, метанол, нитрометан). Адсорбент НКУСТ-1 проявил селективные свойства по отношению к изомерным алканам и аренам. Фактор разделения при 190 °С для пары *n*-октан – 2,3,4-триметилпентан составил 1.29. В случае изомеров ксилола наибольшее значение фактора разделения наблюдалось для *орто*- и *пара*-ксилолов –  $\alpha_{o/p} = 1.21$  (190 °С).

### Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Мартина Ю.В., Копытин К.А., Онучак Л.А. Особенности адсорбции на микропористом металл-органическом каркасном полимере НКУСТ-1 летучих органических соединений разных классов. *Бутлеровские сообщения*. 2024. Т.77. №2. С.95-101. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-77-2-95

### Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Мартина Ю.В., Копытин К.А., Онучак Л.А. Особенности адсорбции на микропористом металл-органическом каркасном полимере НКУСТ-1 летучих органических соединений разных классов. *Бутлеровские сообщения В*. 2024. Т.7. №1. Id.6. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-77-2-95/ROI-jbc-RB/24-7-1-6

### The output for citing the English online version of the article:

Yuliya V. Martina, Kirill A. Kopytin, Lyudmila A. Onuchak. Adsorption characteristics of volatile organic compounds of different classes on the microporous metal-organic framework НКУСТ-1. *Butlerov Communications В*. 2024. Vol.7. No.1. Id.6. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-77-2-95/ROI-jbc-B/24-7-1-6