

ЛХОС, и предотвратить аварийные ситуации, связанные с коррозией технологического оборудования, что в свою очередь положительно повлияет как на экологическую, так и на экономическую стороны процессов нефтедобычи и нефтепереработки.

УДК 543.544.94

АДСОРБЕНТЫ ДЛЯ ГАЗОВОЙ ХРОМАТОГРАФИИ НА ОСНОВЕ МЕТАЛЛ-ОРГАНИЧЕСКИХ КАРКАСОВ

К.А. Копытин, Ю.В. Мартина, М.Ю. Парийчук, Л.А. Онучак

Самарский национальный исследовательский университет

имени академика С.П. Королева, Самара, Московское шоссе, д. 34, г., 443086

e-mail: kopitin.ka@ssau.ru

Получение и исследование новых материалов на основе самоорганизующихся систем является одним из передовых направлений современной химии. К ним можно отнести монослои, пленки и различные каркасные структуры. Использование хиральных макроциклических соединений, обеспечивающих распознавание на молекулярном уровне, и металл-органических каркасных полимеров (МОКП), имеющих разнообразную пористую структуру, позволяет получать материалы для различных отраслей науки и техники – сорбционных технологий, катализа, медицины, сенсорных технологий и т.д. Подобные структуры склонны к проявлению комплексообразования по типу «гость-хозяин» с соединениями различной природы. МОКП представляют собой класс кристаллических пористых материалов, как правило, с высокой удельной поверхностью, большим объемом пор, возможностью точной регулировки их размера и термической стабильностью, что обеспечивает их потенциал практического применения в сорбционных технологиях и хроматографии. Разделение на хроматографических колонках с МОКП связано как с проявлением молекулярно-ситового эффекта, так и с адсорбционным механизмом за счет реализации различных межмолекулярных взаимодействий (водородные связи, π - π -взаимодействия, взаимодействие с ненасыщенными металлическими центрами и т.д.). Однако использование чистых кристаллов МОКП затруднено из-за неоднородности синтезируемых частиц, низкой механической прочности и достаточно высокой стоимости. Решением указанных проблем является получение композитных материалов. В случае адсорбентов для газовой хроматографии логичным представляется изготовление поверхностно-слоистых композитов, в которых микрокристаллы МОКП иммобилизируются на поверхности макропористых твердых носителей, или получение PLOT колонок. Такой подход обеспечивает быстрый массообмен, термостабильность и воспроизводимость получаемых хроматографических колонок разных типов.

Целью работы являлось исследование сорбционных и селективных свойств композиционных адсорбентов, содержащих различные МОКП.

Для определения характеристик полученных композиционных материалов применялись различные методы, связанные с определением их термической стабильности, морфологии, геометрических параметров, сорбционных и селективных свойств. Также было исследовано влияние полимерных модификаторов, вносимых для усиления адгезии микрочастиц МОКП к поверхности носителя, и количества самого наносимого МОКП на термодинамические характеристики сорбции органических соединений из газовой фазы.

Установлено, что разработанные поверхностно-слоистые адсорбенты, содержащие использованные МОКП, позволяют достаточно эффективно разделять *n*-алканы и их изомеры за счет ситового эффекта, арены (в т.ч. ВТЕХ, крезолы) за счет π - π -стекинга и взаимодействия с открытыми металлическими центрами, хлорпроизводные метана. Таким образом, композиционные адсорбенты с МОКП сочетают селективность каркасных структур с механической прочностью и хорошей массопередачей, открывая путь к получению эффективных хроматографических колонок для аналитической практики.

УДК 543.544.42

**МЕТОДИКА ПРОЕКТИРОВАНИЯ ТОПОЛОГИИ ПЛАНАРНЫХ
ХРОМАТОГРАФИЧЕСКИХ КОЛОНОК**

Агафонов А.Н.

*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева" (Самарский университет).**Московское шоссе, д. 34, г. Самара, 443086**agafonov.an@ssau.ru*

При разработке планарных колонок, как правило, стремятся к размещению максимальной длины канала на минимальной площади подложки при условии минимизации сопротивления потоку флюида и минимизации размытия хроматографического пика. Однако, нахождение оптимальной топологии канала в таких условиях является сложной обратной задачей, которая для своего решения требует как эффективных алгоритмов оптимизации, так и методов сравнительно быстрого решения прямой задачи, т.е. нахождения формы хроматографического пика по известной топологии канала. Даже решение прямой задачи является достаточно сложным и предполагает большого количества вычислительных мощностей, так как требует решения системы уравнений, описывающих движение флюида, диффузию в подвижной и неподвижной фазе и адсорбционно-десорбционные процессы [1]. Решение такой задачи для всей колонки является весьма затратным с точки зрения вычислительных ресурсов, что делает практически невозможным решение обратной задачи при таком подходе.

В данной работе предлагается решать прямую задачу не для всей колонки, а для отдельных ее участков, заранее сформировав их перечень. Для планарных колонок типичными элементами обычно являются прямые участки, повороты на 90 и на 180 градусов. Для каждого из предложенных элементов топологии решается прямая задача с целью определения их вклада в сопротивление потоку флюида и искажение формы хроматографического пика. Пример результата решения прямой задачи для элемента канала в Comsol Multiphysics приведен на рисунке 1.

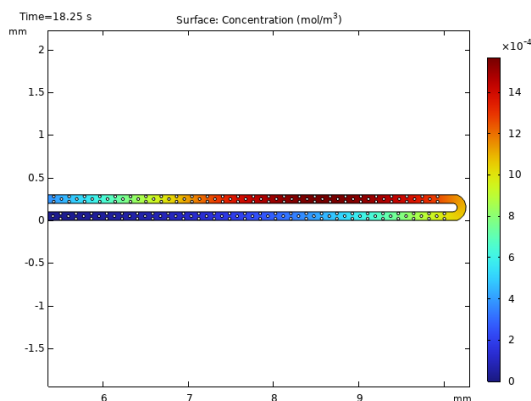


Рисунок 1. Пример результатов решения прямой задачи. Прохождение концентрационного пика через элемент канала «поворот на 180 градусов»

Основываясь на полученном массиве данных, предлагается вычислять интегральные параметры всей колонки в целом, аналогично методам синтеза вакуумных систем,