

## **ИССЛЕДОВАНИЕ СОРБЦИОННО-КИНЕТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ УГЛЕРОДНЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИТ**

**А.В. Бервено, В.П. Бервено**

*КемГУ, КФ ИХТТМ, СО РАН*

Углеродные молекулярные сита (УМС) используются для выделения газов ( $O_2$ ,  $N_2$  из воздуха; водорода,  $CO$  из синтез-газа). Для устойчивого получения УМС с требуемыми свойствами необходимо знание закономерностей формирования их текстуры, а также связи её характеристик с сорбционными, кинетическими свойствами.

Эффективность разделения газов в углеродных молекулярных ситах определяется шириной щелевых пор, размером молекул аренов, боковые поверхности которых являются стенками пор в элементарных нанотекстурных фрагментах (ЭНТФ).

Были изучены УМС из изотропного каменноугольного пека, полученные при разных температурах активации. Для выяснения роли электронообменных свойств молекул аренов – стенок пор УМС во взаимодействии с молекулами сорбатов в данной работе рассмотрели их связь с сорбционно-кинетическими характеристиками. Сорбционные свойства УМС анализировали по данным газовой хроматографии водорода, монооксида углерода, гелия. Оценивали значения удельных удерживаемых объёмов газов и коэффициентов селективности ( $K_r$ ) разделения  $H_2$  и  $CO$ .  $K_r$  оценивали из отношения удельных удерживаемых объёмов  $CO/H_2$ . Изменение удерживаемых объёмов газов,  $K_r$  газов ( $H_2 / CO$ ) напрямую зависит от межплоскостного расстояния, размеров и электронно-обменных свойств молекул в ассоциатах аренов - ЭНТФ углеродной матрицы УМС. Полученные данные сопоставляли с межплоскостным расстоянием, определяющим ширину пор, и электронно-обменными свойствами, определяющими энергию взаимодействия ЭНТФ УМС с сорбированными молекулами, которые оценивали с помощью квантово-химического моделирования.

В результате работы были сделаны следующие выводы:

1.Изменение коэффициента селективности газов соответствует изменению удерживаемых объёмов  $H_2$  и  $CO$ ,  $He$ .

2.Увеличение температуры получения УМС сопровождается монотонным ростом ширины и некоторым уменьшением высоты элементарных текстурных фрагментов, составляющих их матрицу, а также увеличением селективности разделения газов.

3.Быстрое увеличение селективности разделения  $H_2$  и  $CO$  в УМС800 в сравнении с УМС700 объясняется изменением электронодонорной и электроноакцепторной способности молекул аренов, составляющих стенки пор в ассоциатах аренов - ЭНТФ углеродной матрицы УМС, за счёт электронообменного взаимодействия молекул водорода и монооксида углерода с  $\pi$ -электронами ЭТФ.