

ОКСОХАЛЬКОГЕНАТЫ ДИБЕНЗИОДОНИЯ – СИНТЕЗ И СУПРАМОЛЕКУЛЯРНАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ

Д. М. Иванов¹, Е. А. Кайгородов¹, Н. С. Солдатова², П. С. Постников²

¹Институт химии СПбГУ

199034, Россия, Санкт-Петербург, Университетская наб., д. 7–9

d.m.ivanov@spbu.ru

²Исследовательская школа химических и биомедицинских технологий ТПУ

634034, Россия, Томск, пр. Ленина, д. 43А

Галогенные связи (ГС) – широко исследуемый тип межмолекулярных взаимодействий, который можно назвать аналогом водородных связей, в которых функцию атома водорода выполняет атом галогена. Среди типичных доноров ГС, предложенных ИЮПАК [1], имеются не только соединения галогенов (I), но и диарилиодониевые соли, представители класса λ^3 -иоданов, соединений иода (III). Такие соли, благодаря наличию положительного заряда и двух электрофильных сайтов на центре I (III), уже зарекомендовали себя в качестве удобных строительных блоков в супрамолекулярной химии на примерах галогенидных [2], псевдогалогенидных [3] и комплексных [4] анионов.

В данном исследовании нами был проведён целенаправленный синтез диарилиодониевых солей с неорганическими анионами, состоящи-

ми только из атомов халькогенов – сульфатом SO_4^{2-} , дитионатом $\text{O}_3\text{S}-\text{SO}_3^{2-}$, селенатом SeO_4^{2-} и другими. Их получение, несмотря на гидрофильный характер анионов, было осуществлено с использованием 20-кратного избытка соответствующих натриевых или калиевых солей, и дибензиодиодиевого катиона, соли которого демонстрируют наименьшую растворимость во всех растворителях.

Согласно данным рентгеноструктурного анализа на монокристаллах, полученные соединения кристаллизуются в виде гидратов, демонстрирующих интересную супрамолекулярную организацию за счёт водородных и межйонных галогенных связей $\text{I}\cdots\text{O}$ (Рис. 1).

С помощью квантово-химических расчётов с периодическими граничными условиями, выполненными в программах CP2K и Multiwfn,

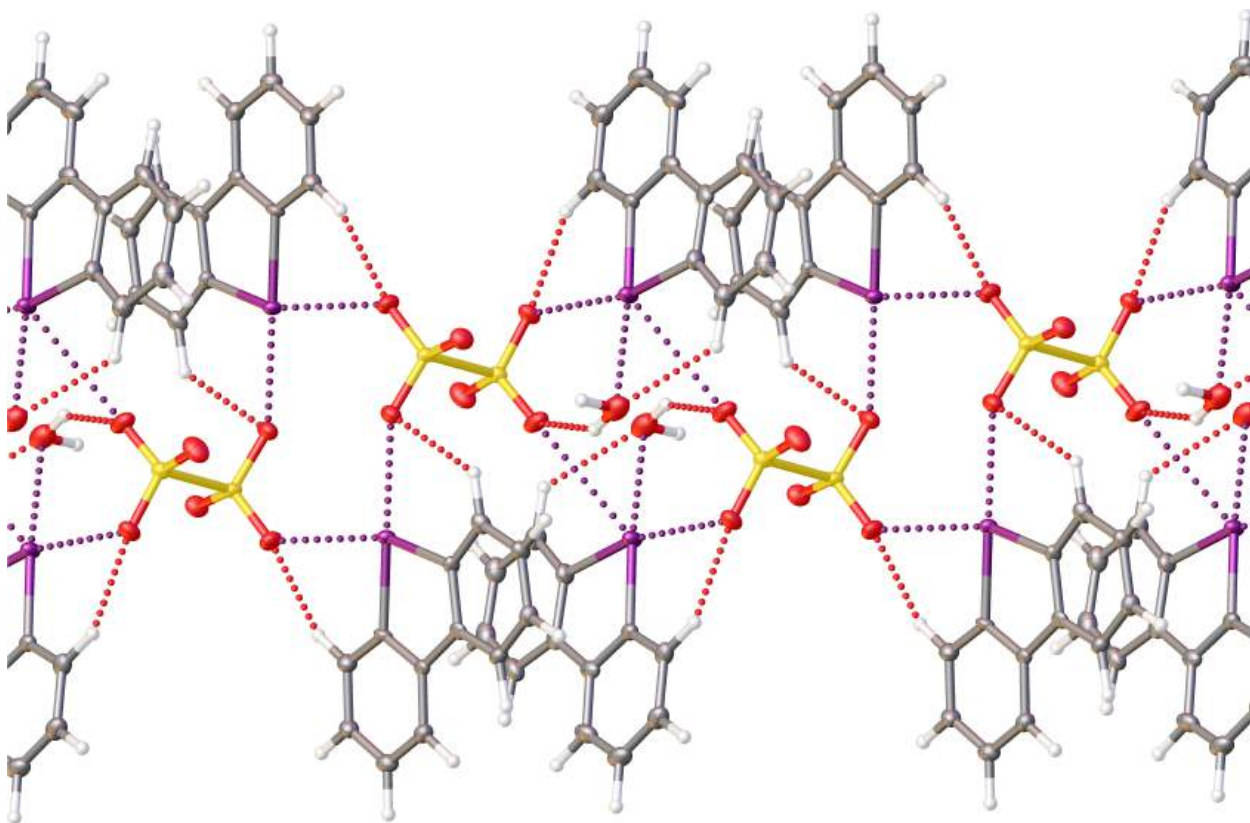


Рис. 1. Полимерная супрамолекулярная организация в кристалле $[(o\text{-C}_6\text{H}_4)_2\text{I}]_2(\text{O}_3\text{S}-\text{SO}_3) \cdot 3\text{H}_2\text{O}$

подтверждено наличие межмолекулярных взаимодействий и их нековалентная природа, а также фильности участников взаимодействий.

Работа была выполнена с использованием оборудования ресурсных центров Санкт-Петербургского Университета, в частности, ресурсных центров «Магнитно-резонансные методы исследования», «Методы анализа состава вещества» и «Рентгенодифракционные методы исследования».

Список литературы

1. Desiraju G.R., Shing Ho P., Kloo L., Legon A.C., Marquardt R., Metrangolo P., Politzer P., Resnati G., Rissanen K. // *Pure and Applied Chemistry* – 2013. – Vol. 85. – № 8. – P. 1711–1713.
2. Yoshimura A., Shea M.T., Guselnikova O., Postnikov P.S., Rohde G., Saito A., Yusubov M.S., Nemykin V.V., Zhdankin V.V. // *Chemical Communications*. – 2018. – Vol. 54. – № 73. – P. 10363–10366.
3. Postnikov P.S., Guselnikova O.A., Yusubov M.S., Yoshimura A., Nemykin V.N., Zhdankin V.V. // *The Journal of Organic Chemistry*. – 2015. – Vol. 80. – № 11. – P. 5783–5788.
4. Aliyarova I.S., Ivanov D.M., Soldatova N.S., Novikov A.S., Postnikov P.S., Yusubov M.S., Kukushkin V.Yu. // *Crystal Growth & Design*. – 2021. – Vol. 21. – № 2. – P. 1136–1147.

СО₂, ПРОИЗВОДСТВО ЦЕМЕНТА И ЭКОЛОГИЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

В. К. Козлова¹, Ю. С. Саркисов², Н. П. Горленко², А. Н. Маноха¹, А. В. Вольф¹

¹Алтайский государственный технический университет Имени Ползунова В. В.
kozlova36@mail.ru

²Томский государственный архитектурно-строительный университет
sarkisov@tsuab.ru

В Парижском соглашении, подписанном в декабре 2015 г., члены ООН определили допустимый предел глобального потепления в 21 веке, равный 2 °С. Известно, что цементная промышленность ответственна за наибольшую долю потребления энергии (26 %), и эмиссии СО₂ (26 %). Это обусловлено двумя факторами: 1) масштабами отрасли, производящей более 4,2 млрд т цемента в год, а также особенностями технологического процесса производства портландцемента и его разновидностей:

- не менее 535 кг СО₂ на 1 т клинкера выделяется при декорбанизации известняка;
- около 330 кг СО₂ на 1 т клинкера образуется при сжигании топлива на обжиг. В сумме это дает 835 кг СО₂ на 1 т клинкера [1].

Кроме того огромные объемы карьерных выработок известняка и глины, необходимой для производства цемента (на 1 т цемента требуется от 1,5 до 2,4 т нерудного сырья); большие выбросы СО₂ и пыли (более 90 кг СО₂ и 300–900 кг пыли на 1 т ПЦ).

Необходимо отметить, что цемент и бетоны на его основе являются главными строительными материалами XXI в. и по-видимому, останет-

ся таковым во всем третьем тысячелетии. Альтернативы им пока не предвидится. Ежегодное производство этих материалов во всем мире неуклонно растет, составляя более 17 млрд. т (второе место по потреблению после воды) (рис. 1, табл. 1).

Глобальное потепление климата на нашей планете побудило все мировое сообщество искать эффективные пути по снижению выбросов парниковых газов (углекислого газа, метана и паров воды) и заставило правительства многих стран разрабатывать комплекс мероприятий для достижения этих целей.

На самом деле, техногенный выбросы углекислого газа составляют лишь небольшую долю от природных вулканических процессов: человеческая история Земли свидетельствует о том, что «все это одно крупное извержение вулкана выбрасывает в атмосферу гораздо больше углекислого газа, чем его выработала вся человеческая индустрия за всю историю» [1].

В России изменение климата рассматривается как вызов и уникальная возможность для технологической трансформации и обеспечения соблюдения экологических норм, позволяющих