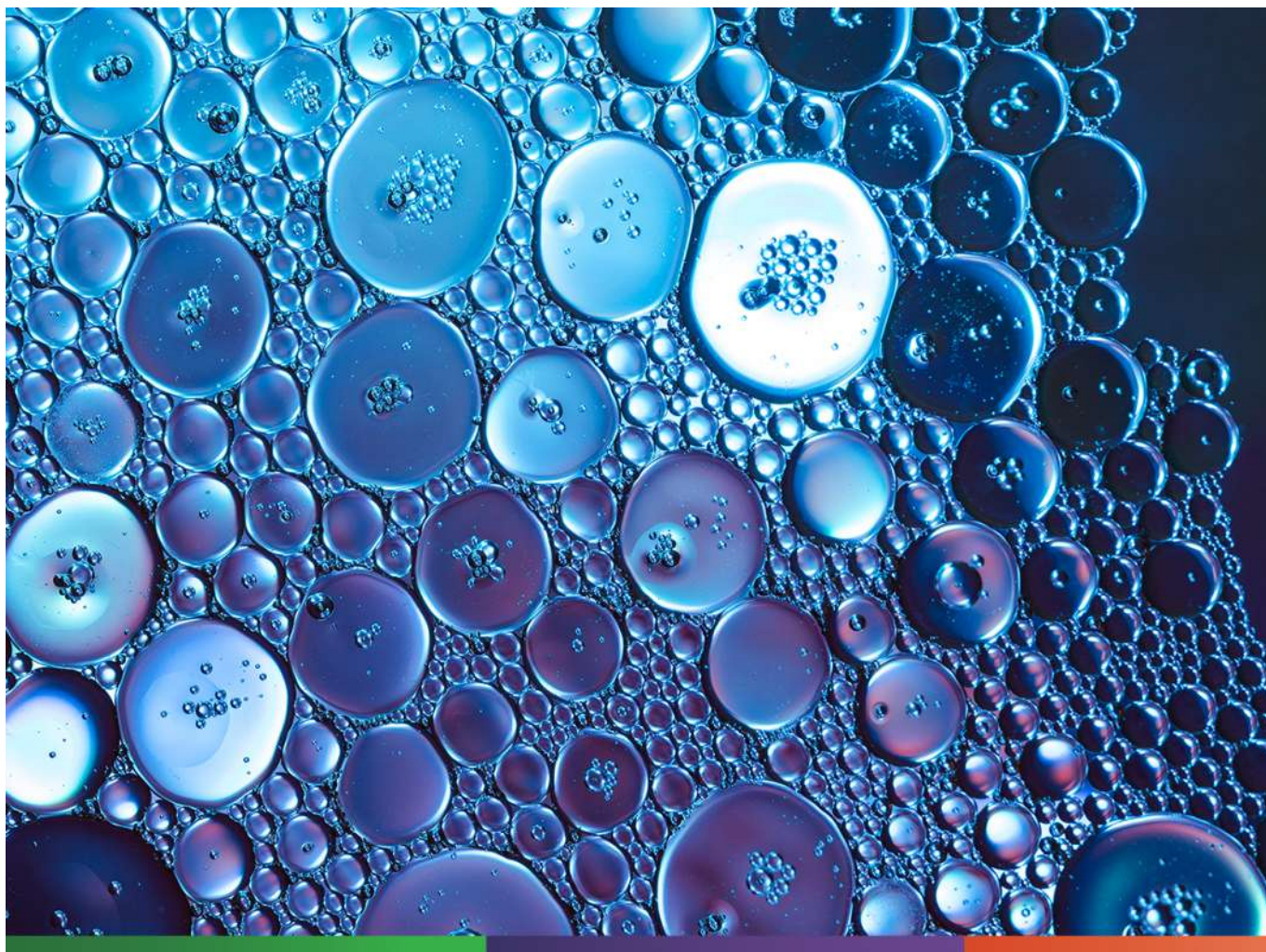


Карбанионные ионные жидкости для связывания CO₂



Улавливание и утилизация углекислого газа — один из ключевых методов в борьбе с глобальным потеплением и переходе к низкоуглеродной энергетике. Наука продолжает искать эффективные химических поглотителей (скэвенджеров), которые могли бы не только прочно связывать CO₂, но и делать этот процесс обратимым с минимальными энергозатратами.

В статье, опубликованной в журнале *Journal of Molecular Liquids* (квартиль Q1), научный коллектив под руководством доцента Высшей школы высоковольтной энергетике СПбПУ Надежды Андреевой представил теоретическое исследование, описывающее поведение перспективного класса соединений — ионных жидкостей на основе карбанионов. Авторы сконцентрировались на ионной жидкости, состоящей из тетраметиофосфониевого катиона и малонитрильного аниона. Особенность таких соединений заключается в наличии карбаниона — отрицательно заряженной частицы с ненасыщенной валентностью у центрального атома углерода, что делает их исключительно реакционноспособными и открывает новые возможности для химического связывания CO₂.

С помощью квантово-химических расчетов проведен поэтапный анализ процессов, происходящих при контакте поглотителя с углекислым газом. Рассмотрена физическая сорбция CO₂ ионной жидкостью и последующие стадии химического взаимодействия: карбоксилирование метанидного центра, внутри- и межмолекулярный перенос протона, а также дополнительная физическая адсорбция газа образующимися карбоксильными группами. Это позволило оценить термодинамику и энергетические барьеры каждого этапа.

Результаты показали, что суммарные энергетические эффекты на различных стадиях поглощения невелики. Выяснилось, что энтальпийный выигрыш от связывания CO₂ компенсируется энтропийными потерями, однако равновесие процесса можно эффективно смещать, изменяя температуру и давление. Авторами продемонстрировано, что после хемосорбции в системе могут сосуществовать две формы аниона — карбоксилатная и метанидная. При этом переход протона от центрального атома углерода к кислороду карбоксильной группы оказался энергетически затруднен в рамках одной молекулы, но возможен по межмолекулярному механизму с существенно более низким барьером.

Оригинал статьи: Carboxylation products of malononitrile-containing ionic liquid: Methanide anion versus carboxylate anion. Journal of Molecular Liquids, 2025, 435, 128170.