



ESTUDIO TEÓRICO-EXPERIMENTAL CON TFD ENTRE EL TIOCIANATO DE 1-BUTIL-3-METILIMIDAZOLIO E HIDROCARBUROS AROMÁTICOS POLICICLICOS

Brenda Manzanilla-Viveros¹, Zaira Julieta Domínguez Esquivel¹, Magali Salas Reyes¹, Myrna Hernández Matus¹, José Manuel Domínguez Esquivel²

¹ Unidad de Servicios de Apoyo en Resolución Analítica (SARA), Universidad Veracruzana, Luis Castelazo S/N, Col. Industrial-Ánimas, Xalapa, Ver., C.P. 91190, A. P. 575; México

² Instituto Mexicano del petróleo, Eje Central Lázaro Cárdenas Norte 152, Col. San Bartolo Atepehuacan, C.P. 07730, México, D.F.; México
e-mail: myhm24y@yahoo.com.mx

Los líquidos iónicos (LIs) han provocado interés por sus propiedades fisicoquímicas, las cuales, les han permitido sustituir algunos disolventes utilizados. Éstos han sido útiles para la extracción de determinados componentes de una mezcla sin recurrir de altas temperaturas (desulfuración de diésel) [1,2,3]. Los LIs pueden modelarse considerando que cumplan valores predeterminados de: densidad, presión de vapor, punto de fusión, viscosidad, poder de disolución, pH, estabilidad química y solvatación [1,4]. Así, es posible diseñar LIs que sean menos contaminantes, creando los llamados solventes verdes [4]. En este trabajo se presentan los resultados del estudio de la interacción entre el LI tiocianato de 1-butil-3-metilimidazolio ([BMIM⁺][SCN⁻]) e hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAPs), tales como: naftaleno, antraceno, fenantreno y dibenzotiofeno, empleando la Teoría de Funcionales de la Densidad (TFD). El LI optimizado con TFD fue empleado para interactuar con los HAPs. Dichas interacciones fueron analizadas mediante estudios de potencial electrostático, de átomos en moléculas (AIM) y de interacciones no covalentes (NCI), dichos resultados fueron corroborados con estudios experimentales de RMN y de IR, encontrándose que los cálculos teóricos predicen de manera adecuada interacciones débiles y por último que el LI es apto para modificar ciertas propiedades de los HAPs.

Referencias:

1. Brennecke, J. F.; Maginn, E. J. *AIChE J.* **2001**, *47*, 2384-2389.
2. Giernoth, R. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2010**, *49*, 2834-2839.
3. Lü, R.; Lin, J.; Qu, Z. *J. Fuel Chem. Technol.*, **2012**, *12*, 1444-1453.
4. Canongia, J.; Deschamps, J.; Pádua, A. *J. Phys. Chem. B*, **2004**, *108*, 2038-2047.