



ESTUDIO TEÓRICO DE LAS INTERACCIONES INTERMOLECULARES PRESENTES ENTRE LÍQUIDOS IÓNICOS DE IMIDAZOLIO Y PIRIDINIO E HIDROCARBUROS AROMÁTICOS

Diana Campa-Guevara,¹ Zaira Domínguez,¹ Magali Salas-Reyes,¹
José Manuel Domínguez,² Isidoro García-Cruz,² Myrna H. Matus,¹

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

² Instituto Mexicano del Petróleo, Eje Central Lázaro Cárdenas Norte 152,
Col. San Bartolo Atepehuacan, C.P. 07730, Ciudad de México, México.

Los líquidos iónicos (LIs) son sales orgánicas o inorgánicas líquidas a temperatura ambiente que se han convertido en un tema de gran interés en los últimos años debido a su gran versatilidad de diseño. Uno de los principales usos de los LIs es como disolvente, ya que la presencia de una fuerte interacción catión-anión, les brinda propiedades fisicoquímicas únicas [1] por lo que son considerados solventes verdes [2].

En este trabajo se estudiaron y analizaron las interacciones intermoleculares presentes entre LIs e hidrocarburos aromáticos (HA) mediante el uso de métodos de química teórica y computacional, coadyuvando así en su diseño y aplicación como agentes dispersantes. Los LIs estudiados son tres derivados del piridinio y tres derivados del imidazolio, los cuales fueron optimizados inicialmente con el método semiempírico PM3 y, posteriormente, reoptimizados con el nivel M06-2X/6-311++G** de teoría de funcionales de la densidad (TFD) dentro del programa Gaussian09 [3]. Para el análisis de los complejos LI-HA fueron aplicadas metodologías de dinámica molecular cuántica Born-Oppenheimer [4]. El estudio de las interacciones intermoleculares en los sistemas se llevó a cabo utilizando los métodos AIM (Atoms in Molecules) [5] y NCI (Non Covalent Interactions) [6]. Por último, los resultados de este trabajo se compararon con estudios teóricos previos y con datos experimentales obtenidos por nuestro grupo de trabajo.

Referencias:

1. Muhammad, N.; Man, Z. *Chem. Eng.* **2011**, *56*, 3157-3162.
2. Pakiari, A.; Siahrostami, S. *THEOCHEM* **2010**, *955*, 47-52.
3. Frisch, M. J. *et al.* Gaussian 09, Revision D.01, Gaussian, Inc., Walling Ford CT, **2013**.
4. Helgaker, T.; Uggerud, E.; Jensen, H. J. A. *Chem. Phys.* **1990**, *173*, 145-150.
5. Popelier, P. *Atoms In Molecules: An Introduction*, Pearson Education, England, **2000**.
6. Johnson, E.; Keinan, S.; Mori, G.; Sánchez, P.; Contreras, G.; García J.; Cohen, J.; Yang, W. *J. Am. Chem. Soc.* **2010**, *132*, 6498-6506.