



## Estudio teórico de atrapamiento de CO<sub>2</sub> por 6-(hydroxymethyl)tetrahydro-2H-pyran-2,3,4,5-tetraol

José Gustavo Ávila Zárraga<sup>1</sup>, Concepción Armenta Salinas<sup>2</sup>, Gabriel Merino<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Facultad de Química, UNAM; México<sup>2</sup>; IIQB, U. Mich. (UMSNH), Mor. Mich.; México, <sup>3</sup>Física Aplicada, CINVESTAV; Mer. Yuc.; México

[gavila@unam.mx](mailto:gavila@unam.mx)

De la mezcla compleja que es el aire, diferentes tipos de compuestos gaseosos se encuentra presentes en ella, de entre dichos compuestos está el CO<sub>2</sub>, el cual ha existido desde el origen de la formación de la atmósfera en la tierra. Este compuesto se ha encontrado presente en el equilibrio entre los procesos metabólicos de los seres vivos y el medio ambiente. Sin embargo se ha encontrado que la concentración ha variado de acuerdo a los procesos biogeológicos, es decir con la evolución y desarrollo de los seres vivos y cambios ambientales. Actualmente se ha notado un incremento de la concentración de CO<sub>2</sub> no encontrado en los registros geológicos, como consecuencia se ha observado un cambio climático drástico<sup>1</sup>.

Existen diferentes métodos para revertir y prevenir este aumento de la concentración de CO<sub>2</sub> tales como: Geológicos, Biológicos y Químicos<sup>2,3</sup>.

Nuestro grupo de trabajo está abordando la formación de complejos (CO<sub>2</sub>-Compuestos orgánicos) y para ello hemos utilizado diferentes sistemas. El objetivo del trabajo es la determinación cuantitativa de las interacciones del CO<sub>2</sub> con cada uno de los hidroxilos del compuesto orgánico seleccionado. En una primera etapa se seleccionó un compuesto orgánico polihidroxiado, el 6-(hydroxymethyl)tetrahydro-2H-pyran-2,3,4,5-tetraol. A continuación se efectuó la optimización de las geometrías del CO<sub>2</sub>, del compuesto polihidroxiado y de cada uno de los complejos. Posteriormente se realizó el cálculo de mínima energía de dichos complejos y se determinaron las propiedades termodinámicas de cada una de las especies. Además de realizar el cálculo de multicaptura de CO<sub>2</sub> por el compuesto polihidroxiado. Los cálculos se llevaron a cabo usando el modelo teórico de DFT.

[1] Foster, G.L.; Rohling, E.J. *PNAS*; **2013**, *110*, 1209

[2] Ko, D.; Patel, H.A.; Yavuz, C. *Chem. Comm.*; **2015**, *51*, 2915-2917.

[3] Keturakis, C.J.; Ni, F.; Spicer, M.; Beaver, M.G.; Caram, H.S.; Wachs, I.E. *ChemSusChem*; **2014**, *7*, 3459-3466.