



## ENERGÍAS DE ADSORCIÓN DE CO<sub>2</sub> CON LIQUIDOS IONICOS A BASE DE 1-ALQUIL-3-PROPILAMINA IMIDAZOL DE TETRAFLUOROBORATO

Beatriz Tlelo Bárcena,<sup>1</sup> Víctor Hugo Uc Rosas,<sup>2</sup> Jorge Arturo Aburto Anell,<sup>1</sup> I. García-Cruz<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Gerencia de Transformación de Biomasa. Dirección de Investigación en Transformación de Hidrocarburos del Instituto Mexicano del Petróleo; México. Eje Central Lázaro Cárdenas 152 Norte, Col. San Bartolo Atepehuacán, Ciudad de México, MEX 07730.

<sup>2</sup>Departamento de Ciencias Básicas, DCBI. Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco. Av San Pablo 180, Col. Reynosa Tamaulipas, Azcapotzalco, México, D. F. 02200 MEXICO

e-mail: beatriztb.unam@gmail.com

La emisión de CO<sub>2</sub> debido a la quema de combustibles fósiles ha dado lugar a la acumulación de dióxido de carbono en la atmósfera, a partir de una concentración de un nivel preindustrial de ~ 280 ppm a más de 390 ppm en la actualidad. Por lo que es altamente deseable, el desarrollo de nuevos materiales y tecnologías que de manera eficiente puedan ser económicamente factibles, para llevar a cabo la captura y adsorción de CO<sub>2</sub><sup>1,2</sup>

En este estudio se modela la interacción entre el líquido iónico, [1-ALQUIL-3-PAIM]<sup>+</sup>[BF<sub>4</sub>]<sup>-</sup> y el CO<sub>2</sub>, aplicando teoría de funcionales de la densidad (DFT). Los cálculos se realizaron el programa Gaussian 09, considerando todos los electrones, una función base 6-31+G\*\* y el funcional B3LYP. Los resultados obtenidos, muestran que a cadena alquílica corta de C4 a C8, los líquidos iónicos son muy reactivos, mientras que a cadena alquílica mayor de C10 la reactividad disminuye ligeramente y se mantiene constante. El efecto de la cadena alquílica a partir de C10 en el IL es insignificante. De acuerdo a estos resultados, podemos establecer que los LI de cadena corta de C4 a C10 puede capturar CO<sub>2</sub>, con una energía de adsorción de entre 257 y 263 kcal/mol, debido a que la interacción de los LI con el CO<sub>2</sub> se lleva a cabo por interacciones electrostáticas, favoreciéndose un proceso de fisisorción.

### Referencias:

<sup>1</sup> E. D. Bates, R.D. Mayton, I. Ntai, J. H. Davis Jr. *JACS* **2002**, 124, 926

<sup>2</sup> R García de León, J. Guzmán Pantoja, I. García-Cruz, *Derecho de Autor* **2015**