



## INTERACCIÓN DE CO<sub>2</sub> CON DERIVADOS DE AMINAS

Fernando Murillo<sup>1</sup>, Miguel Mora-Fonz<sup>1</sup>, Gustavo Ávila-Zárraga<sup>2</sup>, José Luis Cabellos<sup>3</sup> y Gabriel Merino<sup>3</sup>

<sup>1</sup> División Académica de Ciencias Básicas, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, Cunduacán, Tabasco; Mexico

<sup>2</sup> Facultad de Química. Universidad Nacional Autónoma de México. Circuito interior, Cd. Universitaria, 04510. Cd. de México, México

<sup>3</sup> Departamento de Física Aplicada, Cinvestav, Unidad Mérida, Yucatán; Mexico  
e-mail: fermurilloc@gmail.com

La generación de electricidad a partir de combustibles fósiles representa aproximadamente el 25% de las emisiones de CO<sub>2</sub> a nivel mundial<sup>1</sup> y aunque es considerado un gas inerte en términos de combustión, al reaccionar con el agua tiende a causar corrosión y su presencia en el gas natural reduce su poder calorífico.<sup>2</sup> La absorción química es un método importante a nivel industrial que usa alcanos aminas en solución acuosa para la captura de CO<sub>2</sub> de los gases de combustión de plantas de potencia.<sup>3-6</sup>

En este estudio exploramos la superficies de energía potencial de las interacciones del CO<sub>2</sub> con aminas primarias, secundarias y terciarias y con los 20 aminoácidos esenciales, al igual que los efectos de la microsolvatación con 4 moléculas de agua, usando la Teoría del Funcional de la Densidad, para determinar qué factores intervienen en la selectividad y la capacidad de absorción de CO<sub>2</sub>, así como la estabilidad de los complejos formados. La búsqueda de los mínimos locales y globales se realizó empleando el código Bilatu, a nivel PBE0-D3/def2TZVP que incluye las correcciones de la dispersión.

### Referencias

- [1] Puxty, G.; Rowland, R.; Allport, A.; Yang, Q.; Bown, M.; Burns, R.; Maeder, M.; Attalla, M. *Environ. Sci. Technol.* 2009, 43, 6427–6433.
- [2] Abdeen, F. R.; Mel, M.; Jami, M. S.; Ihsan, S. I.; Ismail, A. F. *Chinese J. Chem. Eng.* 2016, 24, 693–702.
- [3] Choi, J. H.; Kim, Y. E.; Nam, S. C.; Yun, S. H.; Yoon, Y. I.; Lee, J.-H. *Korean J. Chem. Eng.* 2016, 32, 1–9.
- [4] B. Arstad, R. Blom and O. Swang, *J. Phys. Chem. A*, 2007, 111, 1222.
- [5] K. R. Jorgensen, T. R. Cundari and A. K. Wilson, *J. Phys. Chem. A*, 2012, 116, 10403
- [6] Orestes, E.; Ronconi, C. M.; Carneiro, J. W. M. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2014, 16, 17213–9.