

# Uso de líquidos iónicos a temperatura ambiente en estructuras metalorgánicas cristalinas para almacenamiento y separación de dióxido de carbono

José M. Vicent-Luna\*, J. J. Gutiérrez-Sevillano, J. A. Anta, y S. Calero

*Departamento de Física, Química y Sistemas Naturales.*

*Universidad Pablo de Olavide. Ctra. Utrera km. 1. 41013 (Sevilla)*

La separación de mezclas gaseosas en las que se vea envuelto el dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ), no tienen solamente interés científico si no también tienen un gran interés social. Debido a la implicación de dicho gas en el calentamiento global<sup>1</sup>, esto supone un reto desde el ámbito de la protección medioambiental. Por ello es interesante estudiar los mecanismos de captura y separación del dióxido de carbono mas efectivos que se puedan desarrollar.

Los líquidos iónicos a temperatura ambiente – room temperature ionic liquids (RTILs) – se han propuesto como disolventes potencialmente interesantes para capturar  $\text{CO}_2$  debido a su alta selectividad para la adsorción de  $\text{CO}_2$  en comparación con otros gases<sup>2</sup>. RTILs (FIG.1) son sales fundidas a temperatura ambiente compuestas por un catión orgánico y un anión orgánico o inorgánico. Debido a que hay muchos y muy conocidos cationes y aniones, el número potencial de RTILs es enorme. Sus propiedades únicas han suscitado un alto interés en los últimos años<sup>3</sup>.

Por otra parte las estructuras metalorgánicas cristalinas – Metal-Organic Frameworks (MOFs) – son materiales relativamente novedosos bien conocidos por su gran área superficial, volumen de poro, y capacidad de almacenamiento entre otras características. Estas estructuras poseen gran cantidad de topologías y esto se puede usar para mejorar el almacenamiento o la separación de dióxido de carbono<sup>4</sup> de otros gases, como el metano o el nitrógeno.

En este estudio hemos investigado el efecto en la adsorción de  $\text{CO}_2$  cuando se introduce un líquido iónico dentro de los poros de una estructura metalorgánica cristalina. Para este propósito hemos usado técnicas de simulación molecular Monte Carlo y dinámica molecular.

El efecto de la adsorción de  $\text{CO}_2$  se analiza a partir de dos aspectos (1) la modificación el tipo de anión del que está compuesto el RTIL y (2) la variación la cantidad de líquido iónico introducido en los poros del MOF.

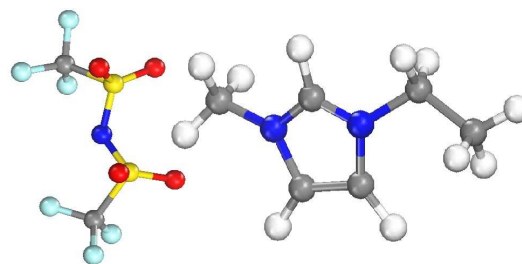


FIG. 1. Ejemplo de líquido iónico,  $[\text{emim}]^+$  (derecha) y  $[\text{Tf}_2\text{N}]^-$  (izquierda).

---

\* jmviclun@upo.es

<sup>1</sup> Peter M. Cox, Richard A. Betts, Chris D. Jones, Steven A. Spall and Ian J. Totterdell. *Nature* vol. 408 (9) **2000**, 184-187

<sup>2</sup> Ravichandar Babarao, Sheng Dai, and De-en Jiang. *J. Phys. Chem. B* **2011**, 115, 9789-9794

<sup>3</sup> Plechkova, N. V.; Seddon, K. R. Applications of ionic Liquids in the chemical industry. *Chem. Soc. Rev.* **2008**, 37, 123-150

<sup>4</sup> David Britt, Hiroyasu Furukawa, Bo Wang, T. Grant Glover, Omar M. Yaghi and Jack Halpern. *PNAS*. Vol. 106(12), **2009**, 49, 20637-20640