

Simulación en Aspen HYSYS del proceso de captura de CO₂ con mezclas de
monoetanolamina (MEA) y líquidos iónicos

Eliana Fernanda Rincón Ocampo y Ricardo Jaime Mejía Díaz

Trabajo de grado para optar el título de Ingeniero Químico

Modalidad trabajo de investigación

Director

Giovanni Morales Medina

PhD en Ingeniería Química

Universidad Industrial De Santander

Facultad de Ingenierías Fisicoquímicas

Escuela de Ingeniería Química

Bucaramanga

2023

Dedicatoria

Este trabajo de grado está dedicado a mis padres, Jimmy Alexander Rincon y Omaira Ocampo Zuluaga, y a todos mis queridos familiares y amigos.

Mis padres, quienes me han brindado amor y apoyo a lo largo de mi vida. Su constante aliento y sacrificio son la base sobre la cual he construido mi camino académico.

A mi familia y amigos, cuyo afecto y respaldo han sido una fuente inagotable de motivación. Gracias por estar a mi lado en cada etapa de este viaje y por creer en mí cuando más lo necesitaba.

A cada uno de ustedes, les dedico este trabajo como una expresión de mi profundo agradecimiento y cariño. Vuestro apoyo ha sido inestimable, y este logro es tanto suyo como mío.

Eliana Fernanda Rincón Ocampo

A mis padres, hermano y seres queridos, en particular a Jessica Campuzano, Iyanael Pabón y Graciela Campillo, por su apoyo, consejos y motivación incondicional, pese a las dificultades y tropiezos en este sendero.

Ricardo Jaime Mejía Díaz

Agradecimientos

Deseamos expresar nuestro sincero agradecimiento a las siguientes personas e instituciones que han contribuido de manera significativa a la realización de este trabajo de grado:

A nuestros familiares y amigos, por su apoyo inquebrantable, comprensión y ánimo constante durante todo el proceso.

A nuestro director de tesis, Giovanni Morales Median, por su orientación, apoyo y dedicación a lo largo de este proyecto. Su experiencia y sabiduría fueron fundamentales para el éxito de esta investigación.

A nuestros evaluadores Devora Nabarlatz y Ramiro Martínez, por sus valiosas sugerencias y críticas constructivas que ayudaron a mejorar este trabajo.

A Universidad Industrial de Santander, por brindarnos los recursos y las instalaciones necesarias para llevar a cabo esta investigación.

A la Decanatura de la Facultad de Ingenierías Físicoquímicas, que respaldaron este proyecto en la presentación realizada en el congreso IV Encuentro de Experiencias Significativas en Procesos Industriales realizado en Cartagena los días 2 y 3 de noviembre.

A Dios, por darnos la fuerza y la perseverancia para completar este trabajo.

¡Gracias a todos!

Tabla de contenido

Introducción	11
1. Objetivos	13
2. Marco conceptual	13
3. Estado del arte	14
4. Metodología	17
4.1 Simulación del Proceso de Absorción de CO ₂ con MEA	17
Selección del modelo termodinámico – Simulación absorción de CO ₂ con MEA	17
Codificación de las etapas del proceso en Aspen HYSYS	19
Reacciones involucradas	21
4.2 Selección de un Líquido Iónico	21
4.3 Simulación del proceso de absorción de CO ₂ con LI [bmim][BF ₄]	21
Codificación en Aspen HYSYS del proceso de absorción de CO ₂ con [bmim][BF ₄]	21
5. Resultado	22
5.1 Simulación del proceso de Absorción de CO ₂ con MEA	22
Perfiles de temperatura de las torres – Simulación MEA	25
Perfiles de Concentración – Simulación MEA	27
5.2 Selección de un Líquido Iónico	28
Propiedades Termodinámicas y Validación de Parámetros	31
5.3 Simulación del proceso de absorción con LI	34
Análisis perfiles de propiedades de las torres – Simulación [bmim][BF ₄]	38
Perfiles de temperatura – Simulación [bmim][BF ₄]	40
Perfiles de concentración – Simulación [bmim][BF ₄]	42
6. Conclusiones	43
7. Recomendaciones	44

Referencias bibliográficas.....	45
Apéndices.....	52
Apéndice A. Listado de variables	52
Apéndice B. Procedimiento de selección del paquete termodinámico	54
Apéndice C. Condiciones de operación de los equipos y diseño empírico del proceso	57
Apéndice D. Solubilidad de CO ₂ y costos de diferentes líquidos iónicos.....	59
Apéndice E. Propiedades termodinámicas de [bmim][BF ₄]	66
Apéndice F. Selección de un modelo termodinámico – simulación absorción de CO ₂ con LI	71

Lista de tablas

Tabla 1. Composiciones de las corrientes de entrada	19
Tabla 2. Condiciones de alimentación del proceso.....	20
Tabla 3. Resultados obtenidos simulación MEA.....	23
Tabla 4. Resultados obtenidos simulación [bmim][BF ₄].....	37

Lista de figuras

Figura 1 Diagrama proceso de absorción de CO ₂ con MEA	54
Figura 2 Perfil de temperatura de la torre absorbidora.....	25
Figura 3 Perfil de temperatura de la torre regeneradora	26
Figura 4 Perfiles de concentración de la torre de absorción y regeneradora	28
Figura 5 P vs X _{CO2} Líquidos Iónicos	29
Figura 6 Precio vs. Cantidad.....	30
Figura 7 P vs X _{CO2} in RTIL	31
Figura 8 Validación propiedades termodinámicas.....	33
Figura 9 Diagrama de proceso de absorción de CO ₂ con [bmim][BF ₄].	35
Figura 10 Viscosidad y Capacidad Calorífica para [bmim][BF ₄] y H ₂ O.....	38
Figura 11 Perfil de Viscosidad y Capacidad Calorífica.....	39
Figura 12 Perfil de Temperatura Absorbedor y Regenerador – [bmim][BF ₄].....	40
Figura 13 Perfil de Concentración – Simulación [bmim][BF ₄].....	42

Lista de apéndices

Apéndice A. Listado de variables	52
Apéndice B. Procedimiento de selección del paquete termodinámico	54
Apéndice C. Condiciones de operación de los equipos y diseño empírico del proceso	57
Apéndice D. Solubilidad de CO ₂ y costos de diferentes líquidos iónicos.....	59
Apéndice E. Propiedades termodinámicas de [bmim][BF ₄]	66
Apéndice F. Selección de un modelo termodinámico – simulación absorción de CO ₂ con LI	71

Resumen

Título: Simulación en Aspen HYSYS del proceso de captura de CO₂ con mezclas de monoetanolamina (MEA) y líquidos iónicos *

Autores: Eliana Fernanda Rincón Ocampo, Ricardo Jaime Mejía Díaz[†]

Palabras Clave: Simulación, líquido iónico, absorción, CO₂, MEA.

Descripción: Este estudio tuvo como objetivo simular un nuevo proceso de captura de CO₂ con líquidos iónico (LI) para el cual el gas asociado se caracteriza por su contenido de CO₂, y puede ser endulzado utilizando aminas, e.g. MEA. El endulzamiento es aplicado para el cumplimiento de los parámetros de calidad exigidos en la Resolución-CREG 071 de 1999 y modificaciones posteriores. Sin embargo, este proceso es energéticamente demandante y presenta evaporación de amina. Varios estudios sugieren que la amina podría ser reemplazada por los líquidos iónicos (LI), debido a sus puntos de ebullición elevados y a sus respectivas afinidades por el CO₂. Como punto de partida se construyó la línea base con los resultados relevantes derivados de un análisis por simulación de la captura de CO₂ con mezclas MEA (30% peso) – H₂O desarrollada en Aspen HYSYS V12.1. Posteriormente, la selección del LI, en este caso [bmim][BF₄], se dio gracias a la revisión bibliográfica, de las cuales se extrajeron datos de solubilidad de CO₂ y análisis de disponibilidad en el mercado. Por último, la simulación fue aplicada para análisis del endulzamiento con [bmim][BF₄] (30% peso) – H₂O. Según los resultados, la simulación reportó captura de 96,8 % mol con requerimiento energético de 4,6 GJ/t CO₂ y consumo de amina, resultados concordantes con diversos trabajos previamente reportados. Asimismo, la simulación con el LI mostró una tasa de captura del 73,78% mol, con un ahorro energético notable del 17,71% concordando los perfiles de temperatura y concentraciones con los escasos datos disponibles. Finalmente, la simulación desarrollada valida a nivel técnico el potencial de los LI para la mejora del endulzamiento.

* Trabajo de grado.

[†] Facultad de Ingenierías Físicoquímicas. Escuela de Ingeniería Química. Ingeniería Química. Director: Giovanni Morales Medina. PhD en Ingeniería Química.

Abstract

Title: Simulation in Aspen HYSYS of CO₂ capture process with monoethanolamine (MEA) and ionic liquids mixtures *

Authors: Eliana Fernanda Rincón Ocampo, Ricardo Jaime Mejía Díaz[†]

Key words: Simulation, ionic liquid, absorption, CO₂, MEA

Description: This study aimed to simulate a novel CO₂ capture process using an ionic liquid (IL), where the associated gas is characterized by its CO₂ content and can be sweetened using amines, e.g., MEA. Sweetening is applied to meet the quality parameters required by Resolution-CREG 071 of 1999 and subsequent modifications. However, this process is energy-intensive and involves amine evaporation. Several studies suggest that amines could be replaced by ionic liquids (ILs) due to their high boiling points and respective affinities for CO₂. As a starting point, the baseline was constructed with relevant results derived from a simulation analysis of CO₂ capture with MEA (30% wt) – H₂O developed in Aspen HYSYS V12.1. Subsequently, the selection of the IL, in this case, [bmim][BF₄], was based on a literature review, from which CO₂ solubility data and market availability analysis were extracted. Finally, the simulation was applied for sweetening analysis with [bmim][BF₄] (30% wt) – H₂O. According to the results, the simulation reported a capture of 96.8% mol with an energy requirement of 4.6 GJ/t CO₂ and amine consumption, consistent with various previously reported works. Similarly, the simulation with the IL showed a capture rate of 73.78% mol, with a significant energy saving of 17.71%, aligning with temperature and concentration profiles with the limited available data. Ultimately, the developed simulation technically validates the potential of ILs to enhance sweetening.

* Degree work.

[†] Faculty of Physicochemical Engineering. School of Chemical Engineering. Chemical Engineering. Director: Giovanni Morales Medina. PhD in Chemical Engineering.

Introducción

Frecuentemente se habla sobre el calentamiento global y los cambios que deben ser realizados para el desarrollo de energías limpias. Las fuentes convencionales de energía como el petróleo y el carbón son grandes emisoras de gases efecto invernadero (GEI), lo cual ha suscitado un aumento en investigación, inversión, expansión y crecimiento de alternativas que ayuden en la mitigación de los contaminantes. Una alternativa es la captura y almacenamiento de carbono (CCS, *Carbon Capture Storage*), tecnología de reducción de CO₂ que podría ayudar en la consecución de los objetivos globales de reducción de emisiones para el 2050; Colombia hace parte de los países con el compromiso ambiental de disminución del 51% de sus emisiones de GEI para el 2030 (Ministerio de Ambiente y Desarrollo Sostenible, 2020) y la carbono neutralidad en el 2050 (Ministerio de Ambiente y Desarrollo Sostenible, 2022)

La producción mundial de CO₂ para el año 2022, después de la reactivación económica a causa de la pandemia por COVID-19, dio como resultado un aumento considerable en la emisión mundial mayor a 36.300 millones de toneladas relacionadas con la energía, con un aumento de 2.000 millones de toneladas respecto al año anterior (IEA, 2022). En Colombia las emisiones de CO₂ en el año 2020 fueron de aproximadamente 89.105 millones de toneladas, con una emisión promedio de 1,75 toneladas por habitante (Ritchie et al., 2020) .

Un método de CCS de corrientes industriales es la absorción utilizando monoetanolamina (MEA) (Pant et al., 2021); sin embargo, el uso de MEA implica costos elevados por uso extensivo de energía y requerimiento de reposición de MEA por evaporación, además de problemas de corrosión (Pant et al., 2021). Alternativamente, los desarrollos tecnológicos actuales han considerado el uso de líquidos iónicos (LI) como materiales que incrementan los niveles de captura

de CO₂, comparado con los reportados por la absorción con MEA (Shukla et al., 2019). No obstante, el reemplazo de MEA con LI incurre en inconvenientes técnicos por elevadas viscosidades, disminución de la absorción durante los procesos difusionales y elevados costos de la materia prima. La mezcla entre agua y LI podría conllevar a mejoras en la parte operativa, así como en la economía del proceso. Una evaluación técnica de la eficiencia de estas mezclas podría ser efectuada por medio de simulación con Aspen HYSYS.

El presente documento expone los principales resultados de una evaluación del proceso de captura de CO₂ con mezcla de agua y líquidos iónicos.

La pregunta de investigación correspondió a, ¿cuáles son los desempeños en términos técnicos del proceso de captura de CO₂ con la mezcla de agua y LI, evaluado por medio de simulación en Aspen HYSYS?

1. Objetivos

General

Evaluar el proceso de captura de CO₂ con monoetanolamina (MEA) y con un líquido iónico en solución acuosa, por medio de simulación computacional en Aspen HYSYS V12.1, verificando la factibilidad técnica del proceso.

Específicos

1. Establecer el desempeño del proceso de absorción de CO₂ con MEA, mediante simulación en el programa Aspen HYSYS V12.1, determinando la línea base con los resultados obtenidos.
2. Seleccionar un líquido iónico, por medio de reportes de absorción de CO₂, afinidad con agua y precios, proponiendo un LI para su codificación en la simulación.
3. Analizar los desempeños del proceso de absorción de CO₂ con el líquido iónico seleccionado, mediante simulación en Aspen HYSYS V12.1, comparando el proceso de captura con el caso base.

2. Marco conceptual

Líquido iónico (LI): sales líquidas a temperatura ambiente, o con una temperatura de fusión por debajo del punto normal de ebullición del agua (100 °C), constituida por un catión orgánico y un anión inorgánico poliatómico (Rodríguez Celma, 2017). También son llamados líquidos iónico a temperatura ambiente (*room temperature ionic liquids, RTIL*) (Marcus, 2016); algunos LI no pertenecen a esa categoría, como los líquidos iónicos próticos.

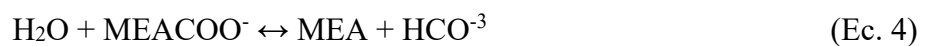
Monoetanolamina (MEA): compuesto orgánico común formado por la reacción de materiales orgánicos con amoníaco (NH₃). Es un solvente usado comúnmente en la industria química para tratar gases y líquidos ácidos (García Castañeda & Ramírez Haro, 2018).

Absorción: Operación unitaria por la cual los átomos, moléculas o iones solubles de una mezcla gaseosa son retenidas o disueltas en un líquido (Green & Southard, 2019).

Desorción: Operación unitaria inversa a la absorción empleada comúnmente cuando se desea transferir un componente volátil disuelto en una mezcla líquida a un gas (Green & Southard, 2019).

Aspen HYSYS: software de simulación utilizado en la industria química, petroquímica y de energía. Permite realizar modelos matemáticos, planificación, diseño y optimización de procesos químicos a diferentes escalas, yendo desde operaciones unitarias hasta plantas industriales complejas. (Noguera, 2021).

Dentro del proceso de eliminación de CO₂ con MEA se es necesario tener a consideración las diferentes reacciones que se dan (Lin et al., 2011),(Akinola et al., 2019),(Mores et al., 2012).



3. Estado del arte

Oko *et al.* en 2018 (Oko et al., 2018) evaluaron los impactos generados en el proceso de captura de CO₂ poscombustión (PCC) de una planta de coque, utilizando un modelo desarrollado

y detallado. Los autores consideraron mezclas acuosas de solvente MEA (30% en peso) con líquido iónico (LI) (5-30% en peso) y el programa Aspen Plus. En el estudio se seleccionó tetrafluoroborato de 1-butilpiridinio ([bpy][BF₄]). Según los resultados, los autores reportaron una reducción del 7%-9% en la energía de regeneración específica y un 12%-27% en la velocidad de circulación del solvente. Se concluye que la concentración de LI (% en peso) tiene un impacto significativo en la energía de regeneración específica y en la velocidad de circulación del solvente. Los autores concluyeron que el cambio al modelo basado en tasas (*rate-based*) representa una mejora teórica respecto al basado en equilibrio (*equilibrium-based*); sin embargo, falta su validación con datos experimentales. El reporte de Oko *et al.* presenta una utilidad práctica en el documento actual, ya que define un límite superior en la concentración de LI (30% peso) necesaria para el proceso de captura de CO₂.

Ma *et al.* en 2017 (Ma et al., 2017) simularon un proceso de captura de CO₂ (a partir de una gas de combustión modelo) usando líquidos iónicos. Para esto, seleccionaron dos LI como absorbentes de CO₂, [bmim][BF₄] y [bmim][PF₆], a los cuales se les determinaron propiedades de equilibrio vapor-liquido (VLE) mediante la ecuación de Redlich-Kwong (RK) y el modelo NRTL como lo son la presión de vapor, la capacidad calorífica y la densidad de estos. Además de ello, se realizó la simulación con el programa de Aspen Plus del proceso de captura de CO₂ para los sistemas en solución acuosa MEA (30% en peso), [bmim][BF₄] y [bmim][PF₆] (LI) de naturaleza pura. Los autores reportaron pérdida de disolvente (LI) en el proceso de captura obteniendo resultados de 0,299 g/tCO₂ para [bmim][BF₄] y 0,391 g/tCO₂ para [bmim][PF₆] respectivamente, en comparación a 178 g/tCO₂ para MEA. Además, se observa una disminución en el consumo de energía con porcentajes más bajos de 26,7 % y un 24,8 % para [bmim][BF₄]- y [bmim][PF₆] que el proceso basado en MEA. El trabajo de Ma *et al.* presenta una utilidad práctica en el documento

actual, ya que expone una metodología para la determinación de propiedades termodinámicas de los LI en simuladores.

(Akinola et al., 2019) evaluaron el rendimiento económico y del proceso de captura de CO₂ de una fuente de gas natural; los autores desarrollaron una simulación con Aspen Plus para la captura con el solvente MEA (30% en peso) y con la mezcla LI (30% en peso) – MEA (30% en peso). En el estudio, se seleccionó el líquido iónico 1-butilpiridinio ([bpy][BF₄]). Los autores reportaron un 15 % y un 7,44 % de disminución en el consumo de energía en el servicio del rehervidor y el costo de eliminación de CO₂, respectivamente, con solvente acuoso [bpy][BF₄]-MEA en comparación con MEA al 30%. Los autores concluyeron que el solvente [bpy][BF₄]-MEA correspondió a un solvente prometedor que podría reemplazar el 30% en peso del solvente MEA en este proceso. La utilidad del trabajo de Akinola et al. en el presente documento corresponde a una metodología para el desarrollo de simulaciones del proceso de captura y el desempeño energético para la captura de CO₂ por absorción.

(Perumal & Jayaraman, 2022) experimentaron con varias mezclas de disolventes acuosos de líquidos iónicos y amina (acetato de tetrabutilamonio [TBA][OAC] y bromuro de tetrabutilamonio [TBA][Br] con MEA) para la captura de CO₂; los autores midieron parámetros como la eficiencia de captura de CO₂, la tasa de absorción de CO₂, el coeficiente de difusión de las mezclas, la densidad, la viscosidad, el pH, la carga de carbono y la tensión superficial. Los resultados obtenidos mostraron que la eficiencia de captura de CO₂ resultó significativamente mayor para las mezclas de solventes en comparación con el solvente acuoso con MEA de referencia. Sin embargo, en el estudio de estos autores se identifica la falta de escalamiento y simulación del proceso de captura con los LI utilizados. Dado que ha sido desarrollado a escala

laboratorio, se obtuvieron datos experimentales, sería valioso complementarlos con simulación para mejorar la consistencia de estos.

Las anteriores referencias soportan la evaluación técnica del uso de los LI en el proceso convencional de absorción de CO₂. Así mismo, estas fuentes muestran que los simuladores comerciales disponibles, como Aspen, contienen códigos que pueden ser aplicados en la evaluación de los desempeños del proceso. Dado que el uso de LI puro y mezcla LI-MEA-H₂O ha mostrado resultados prometedores, el estudio del proceso de captura de CO₂ con LI-H₂O constituye una alternativa y complemento para ser explorado mediante simulación.

4. Metodología

Las simulaciones de las absorciones de CO₂ en MEA y en un LI fueron desarrolladas en el programa Aspen HYSYS V12.1 licencia académica. La ejecución de Aspen HYSYS demandó recursos computacionales de tal forma que el programa fue instalado en una máquina virtual configurada en *Microsoft Azure for students*; el acceso a esta máquina virtual fue obtenido mediante el correo institucional para una suscripción académica de estudiante, con 100 créditos para el uso de la plataforma.

4.1 Simulación del Proceso de Absorción de CO₂ con MEA

Selección del modelo termodinámico – Simulación absorción de CO₂ con MEA

La selección de un paquete termodinámico para la simulación de un proceso de absorción depende de varios factores de entre los cuales están, conocer los componentes involucrados, propiedades físicas y químicas, el tipo de proceso, las condiciones del proceso, entre otros. Para

ello se ha hecho uso de la herramienta de HYSYS llamada “*Methods Assistant*” en la pestaña “*Aspen HYSYS Property Package Selection Assistant*”, es una funcionalidad que ayuda a los usuarios a seleccionar el paquete de propiedades termodinámicas más adecuado para el sistema y proceso en particular. Esta herramienta proporciona una guía paso a paso para ayudar a evaluar y elegir el paquete de propiedades que mejor se ajuste a las necesidades del proceso. Los pasos seleccionados dentro de la herramienta para la simulación de absorción de CO₂ con mezcla acuosa de MEA se muestran en la Figura 1 del apéndice B.

El paquete termodinámico apropiado para la simulación es el paquete *Acid Gas - Chemical Solvents*, dado que se está simulando una solución acuosa de MEA. Este paquete consideró la ecuación de estado de *Peng-Robinson* para la fase de vapor y el modelo de coeficiente de actividad *electrolyte non-random two-liquid* (eNRTL) para la fase líquida y termodinámica de electrolitos. Además, el paquete cuenta con un conjunto de reacciones químicas que se utilizan para simular procesos de absorción de gases ácidos, como el dióxido de carbono (CO₂) y ácido sulfhídrico (H₂S), las cuales serán enlistadas posteriormente a este capítulo.

El paquete termodinámico ha sido sometido a una validación exhaustiva en diversos sistemas que involucran diferentes tipos de aminas. Además, se ha llevado a cabo una verificación rigurosa utilizando datos experimentales y de planta para el proceso de endulzamiento de gas, empleando solventes de aminas. Estos estudios de validación respaldan la precisión y confiabilidad del paquete termodinámico en la simulación de dicho proceso, garantizando resultados consistentes y acordes con los datos reales obtenidos en entornos industriales y de laboratorio. (Dyment & Watanasiri, 2015).

Codificación de las etapas del proceso en Aspen HYSYS

Como punto de partida, fue seleccionada una concentración de MEA del 30% dado que la operación industrial establece una concentración cercana a este valor; lo anterior se debe a que se tiene un adecuado ahorro energético en la operación a la vez que la disminución del consumo de energía para la regeneración del disolvente, mayor absorción de CO₂ por kilogramo de disolvente y disminución en la cantidad de calor sensible requerida.

En el proceso de recolección de datos de diseño se ha establecido la investigación de (Akinola et al., 2019) como base para la simulación del proceso de absorción de CO₂ con MEA para la obtención de una simulación precisa y confiable del proceso (Ver Apéndice C **Tabla 1** , **Tabla 2** y **Tabla 3**).

El gas que ingresa al proceso fue definido como un gas natural que presenta la composición mostrada en la **Tabla 1**. La composición de este gas es característica de, por ejemplo, el asociado al crudo extraído mediante la técnica de recobro mejorado “inyección de CO₂”.

Tabla 1.

Composiciones de las corrientes de entrada

Corriente	Componente	Valor	Unidad
1	MEA	30	peso %
	H ₂ O	70	peso %
2	Metano	73,76	mol %
	Etano	3,39	mol %
	Propano	0,93	mol %
	H ₂ O	1,22	mol %
	CO ₂	20,00	mol %
	N ₂	0,16	mol %

Nota: Adaptado de (Akinola et al., 2019).

Las condiciones de operación de la torre de absorción se tomaron de acuerdo con los lineamientos expresados en el documento de Akinola y colaboradores, definiendo las corrientes

de alimentación, las condiciones iniciales y los equipos involucrados en el absorbedor, así como la temperatura, presión, caudales y composiciones especificados en la **Tabla 2**.

Tabla 2.

Condiciones de alimentación del proceso.

Corriente	Variable	Valor	Unidad
1	T	38	°C
	P	6860	kPa
	F	122.931	kg/h
2	T	35	°C
	P	69	bar
	F	25	MMSCFD

Nota: Adaptado de (Akinola et al., 2019)

Adicional a la torre de absorción se añade una torre regeneradora de amina, en la que el solvente es recuperado por desorción del CO₂. La corriente de solvente enriquecida de CO₂ es alimentada en la etapa 17 (enumerado del fondo al tope, siendo 0 el rehervidor y 21 el condensador), a una temperatura de 100 °C (Addington & Ness, 2010). El tipo de selección del relleno o empaque utilizado, el número de etapas, entre otros parámetros son proporcionados en el estudio base de Akinola y mostrados en la Tabla 1 del Apéndice C.

Por último, la incorporación de los diferentes equipos adicionales como lo son la torre *flash*, intercambiador, *make-up*, *cooler* y bomba y la configuración de sus parámetros adecuados incluye especificaciones que son enumeradas y enlistadas en la Tabla 3 del Apéndice C. La simulación utilizada por el autor Akinola fue desarrollada en aspen plus, y aquellas condiciones que no han sido definidas en el artículo han sido investigadas y seleccionadas por criterios soportados en demás investigaciones de otros autores (Kohl & Nielsen, 1997).

Reacciones involucradas

El paquete termodinámico "*Acid Gas - Chemical Solvents*" incluye las reacciones químicas que ocurren en el absorbedor, las cuales fueron detalladas y enumeradas en el marco teórico. En la **Figura 3** del Apéndice B se presentan las reacciones de mayor relevancia para el sistema MEA-H₂O-CO₂, y se muestra como ejemplo la (Ec. 5) que corresponde a la reacción 56 del set-3 del Simulador.

4.2 Selección de un Líquido Iónico

Se identifican los criterios clave que debe cumplir un líquido iónico para ser considerado como un solvente viable en el proceso de absorción de CO₂. Algunos criterios comunes pueden incluir: alta capacidad de absorción de CO₂, solubilidad del líquido iónico (LI) en agua, estabilidad química y térmica, baja volatilidad y presión de vapor, buenas propiedades de reutilización y regeneración, baja toxicidad y su valor económico. La lista de posibles LI fue completada por medio de una revisión de la literatura abierta y se encuentra en la Tabla 1 del Apéndice D.

Por otra parte, el LI seleccionado según los anteriores criterios fue codificado como un hipotético en Aspen HYSYS. Las propiedades requeridas como temperatura de ebullición, propiedades críticas y de equilibrio de fases fueron definidas según las ecuaciones utilizadas por (Huang et al., 2013) y pueden ser consultadas en Apéndice E.

4.3 Simulación del proceso de absorción de CO₂ con LI [bmim][BF₄].

Codificación en Aspen HYSYS del proceso de absorción de CO₂ con [bmim][BF₄].

La simulación de la absorción de CO₂ en una solución de MEA se utilizó como base para analizar la absorción de CO₂ en solución acuosa de [bmim][BF₄]; el paquete termodinámico

utilizado correspondió a NRTL-RK, seleccionado siguiendo el árbol de decisión de la **Figura 2** del Apéndice B y según lo especificado en el Apéndice F. Se mantuvieron constantes las composiciones de entrada y las condiciones de operación de la torre de absorción y la torre de regeneración, en línea con la simulación previa.

5. Resultado

5.1 Simulación del proceso de Absorción de CO₂ con MEA.

La **Figura 1** muestra el diagrama del proceso con MEA en el ambiente de simulación de Aspen HYSYS, junto con las condiciones de entrada y salida del proceso de endulzamiento con MEA. Según los resultados, el gas de entrada con una composición de CO₂ de 20% mol (**Tabla 1**) es tratado con MEA, reduciendo su contenido de CO₂ hasta el 1% mol de CO₂, una temperatura de 39,54 °C, una presión de 68,60 bar y un flujo de 19,78 MMSCFD (Gas de salida Absorbedor). En cuanto al líquido de salida del absorbedor, su composición fue principalmente 0,0542 mol de CO₂, con un flujo total de 111,5 MMSCFD. Con esto el porcentaje de captura de CO₂ fue de 80% peso. los anteriores resultados concuerdan con el trabajo de (Akinola et al., 2019); estos autores también reportan una recuperación de 95% peso con su simulación desarrollada en Aspen Plus.

En la **Tabla 3** se resumen los resultados encontrados en esta sección y los obtenidos en la investigación base de (Akinola et al., 2019). de estos de destacan las cargas de CO₂, donde se obtuvo 0,498 kmol CO₂/kmol MEA, el cual es aproximadamente igual 0,5 reportado como teórico en la literatura (Kohl & Nielsen, 1997). En comparación con Akinola, las diferencias en la carga rica se deben a que Akinola presenta un menor despojo de CO₂ de la amina rica, el cual se recircula al proceso y se manifiesta en una mayor carga de CO₂ pobre, por tanto, su captura neta es semejante a la obtenida en este trabajo. Por otra parte, se obtuvo una desviación significativa en dos

parámetros que se compensan entre sí, mayor agua de enfriamiento y menor agua de reposición. Estas diferencias se atribuyen al uso de diferentes simuladores de procesos y sus algoritmos de cálculos, recordando que Akinola usó Aspen Plus y en este trabajo Aspen HYSYS, también por aquellos parámetros que no se especificaron en la investigación base y se tomaron de otras fuentes..

Los resultados reportados por la simulación desarrollada en Aspen HYSYS concuerdan con los valores del trabajo de Akinola et al. Asimismo, estos resultados se ajustan adecuadamente con los valores reportados en la literatura encontrada (Kohl & Nielsen, 1997).

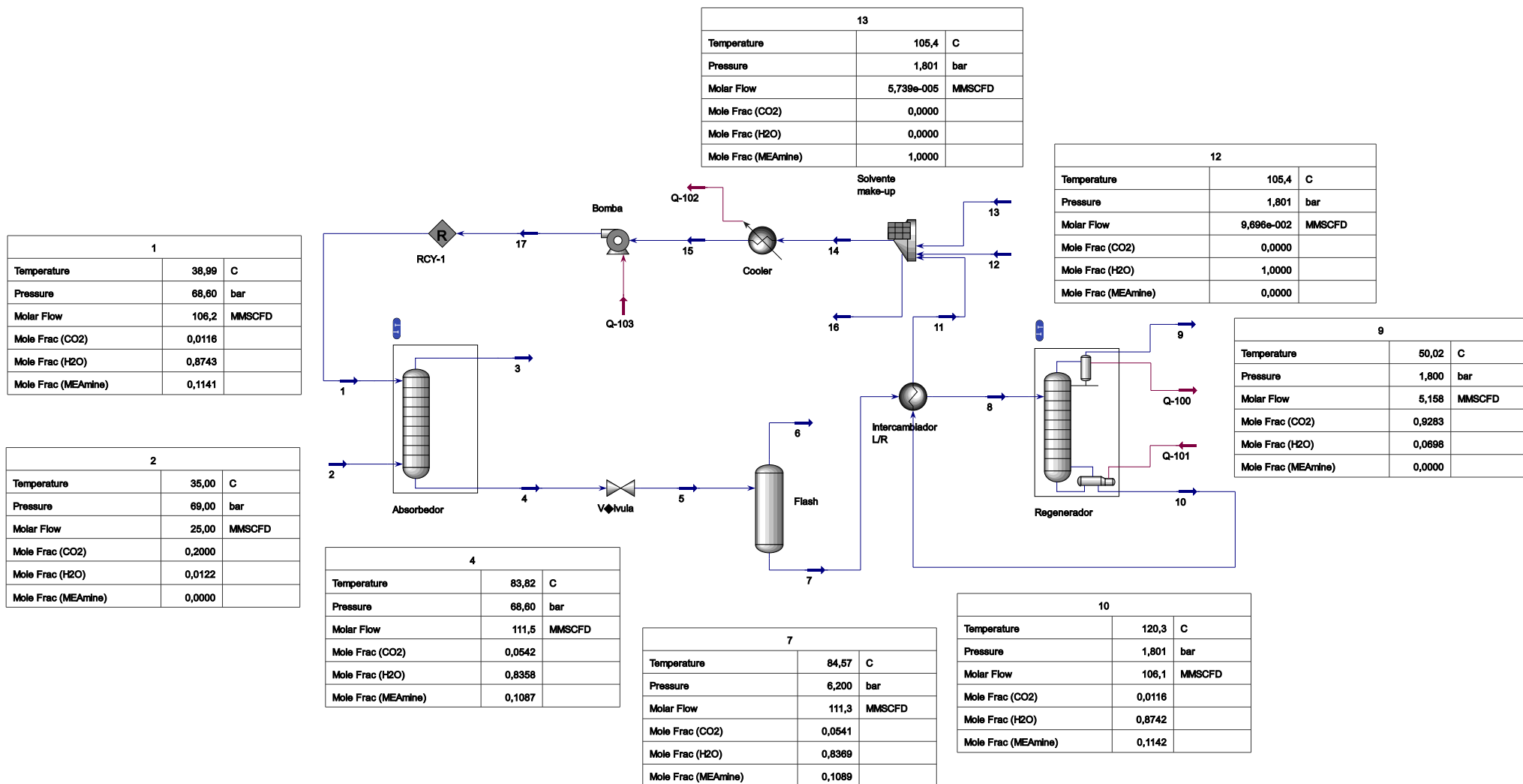
Tabla 3.

Resultados obtenidos simulación MEA

Variable	Este trabajo.	Akinola et al. 2019	Unidades	Error
Solvente pobre	120 223	122 931	kg/h	2%
L/G	4,389	4,37	kg/kg	0%
Carga de CO ₂ en amina pobre	0,102	0,18	kmol CO ₂ /kmol solvente	43%
Carga de CO ₂ en amina rica	0,498	0,59	kmol CO ₂ /kmol solvente	16%
Temperatura del solvente rico	83,825	80	°C	5%
Temperatura del rehervidor	120,261	120	°C	0%
Requerimiento neto energético del proceso	4,591	4,5	GJ/t CO ₂	2%
Requerimiento energético de la bomba	0.08057	0,12	GJ/t CO ₂	33%
Agua de enfriamiento	2874,77	1958,59	t/h	47%
Solvente de reposición	6,588	33,28	kg/t CO ₂	80%

Figura 1

Diagrama proceso de absorción de CO2 con MEA



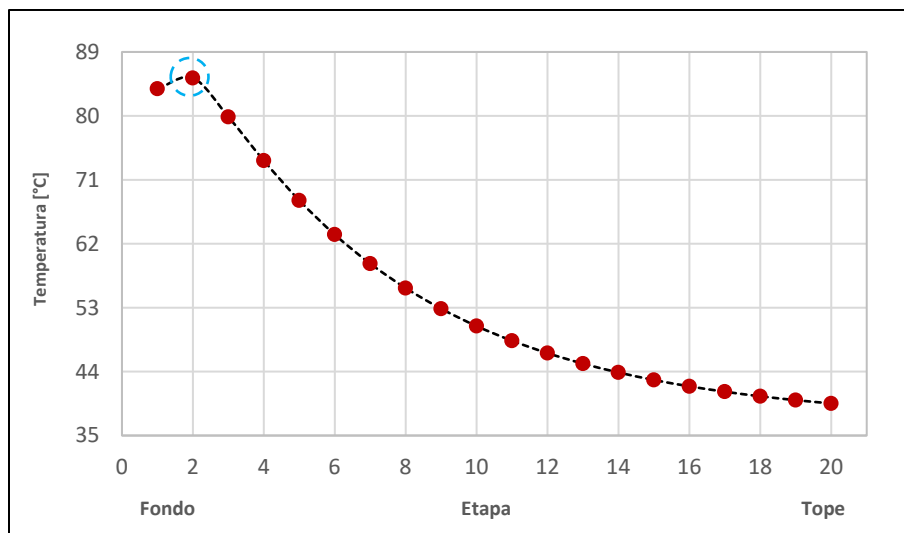
Es importante considerar que las desviaciones pueden deberse a las diferencias en los métodos de cálculo utilizados entre Aspen Plus y Aspen HYSYS (Chaves et al., 2016), dado que cada simulador puede tener en cuenta diferentes modelos y algoritmos de cálculo para la resolución de ecuaciones de equilibrio y reacción, en particular con el calor de disolución. Esto será presentado en la siguiente sección.

Perfiles de temperatura de las torres – Simulación MEA.

En la **Figura 2** se evidencia una variación de la temperatura a lo largo de la torre de absorción. En la base de la torre, se registra un pico de alta temperatura (señalado en círculo segmentado de color azul), que representa el valor máximo alcanzado de 85 °C durante el proceso de absorción. Al ingresar el gas desde la parte inferior de la columna, este contiene una alta concentración de CO₂ en la corriente de gas, generando no solo un gradiente de concentración que facilita la absorción de CO₂ en la solución de amina, sino un calor adicional provocado por las reacciones exotérmicas entre el CO₂ y la Amina. (Rashid et al., 2014).

Figura 2

Perfil de temperatura de la torre absorbidora.



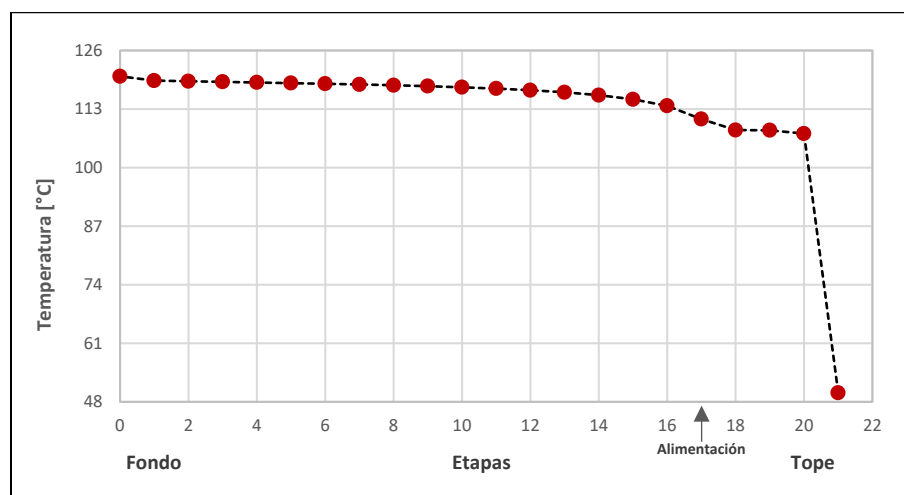
La temperatura es un parámetro crítico que ejerce una fuerte influencia sobre la tasa de absorción de CO₂. En el estudio realizado por (ErikØi, 2012) se analizó la dependencia de la temperatura para una carga específica de CO₂, y se encontró que la fuerza impulsora disminuye a medida que aumenta la temperatura. Como conclusión, se determinó que operar el absorbedor a bajas temperaturas resulta más eficiente en términos de captura de CO₂.

Por otro lado, el estudio realizado por (Rashid et al., 2014) ofrece una perspectiva complementaria al respecto. Este estudio sugiere que el aumento de la temperatura puede afectar negativamente el rendimiento de absorción de CO₂ debido a la mayor movilidad del CO₂ en la corriente de gas y una mayor evaporación de MEA. Estos efectos pueden disminuir la eficiencia general del proceso de absorción de CO₂ a altas temperaturas.

Por otra parte, la **Figura 3** muestra que la regeneradora opera a temperaturas más elevadas que la absorbedora, alcanzando hasta 118 °C en el rehervidor (etapa 0). A medida que se asciende por la torre, la temperatura disminuye gradualmente, alcanzando valores menores de 50 °C (Okon et al., 2018).

Figura 3

Perfil de temperatura de la torre regeneradora



En la figura, se puede observar un punto de inflexión en el perfil de temperatura, Este el cual coincide con la etapa de alimentación a la torre regeneradora, correspondiente a la 17. En esta etapa, el CO₂ se separa del solvente y se libera, generando un aumento significativo de temperatura. A partir de ese punto, la temperatura comienza a disminuir a medida que el gas asciende.

Perfiles de Concentración – Simulación MEA.

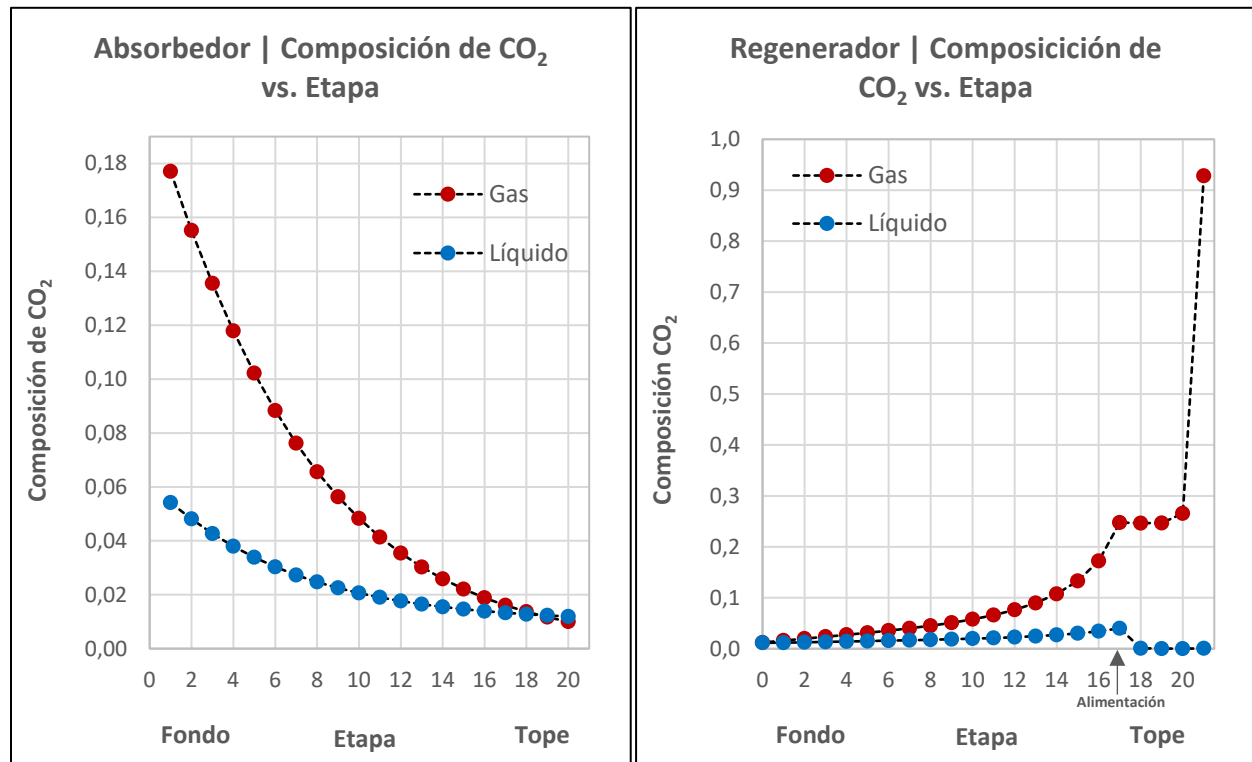
En la **Figura 4** se muestra el comportamiento de la fracción molar de CO₂ en el líquido y en el gas, para las torres absorbedora y regeneradora. La fracción de CO₂ en la torre absorbedora disminuye desde el fondo a la cima, manifestando la captura de CO₂ por absorción química con la solución de MEA; en esta torre (y la regeneradora) el gas asciende y la MEA desciende, dado que fluyen en contracorriente.

Este comportamiento concuerda con lo esperado (Vargas Reyes & González Martínez, 2022), indicando un proceso de captura de CO₂ eficiente, en donde cada etapa contribuye significativamente a la disminución de la concentración de CO₂.

Por otro lado, en la torre regeneradora, la concentración mayor de CO₂ se encuentra en el tope de la torre regeneradora. Esto se debe al proceso de liberación de CO₂ retenido en el solvente. El punto de mayor concentración coincide con la etapa del condensador, en el cual el CO₂ presenta una composición del 92,8%. En el gráfico se observa la etapa de alimentación de la torre, la cual altera el perfil de concentración.

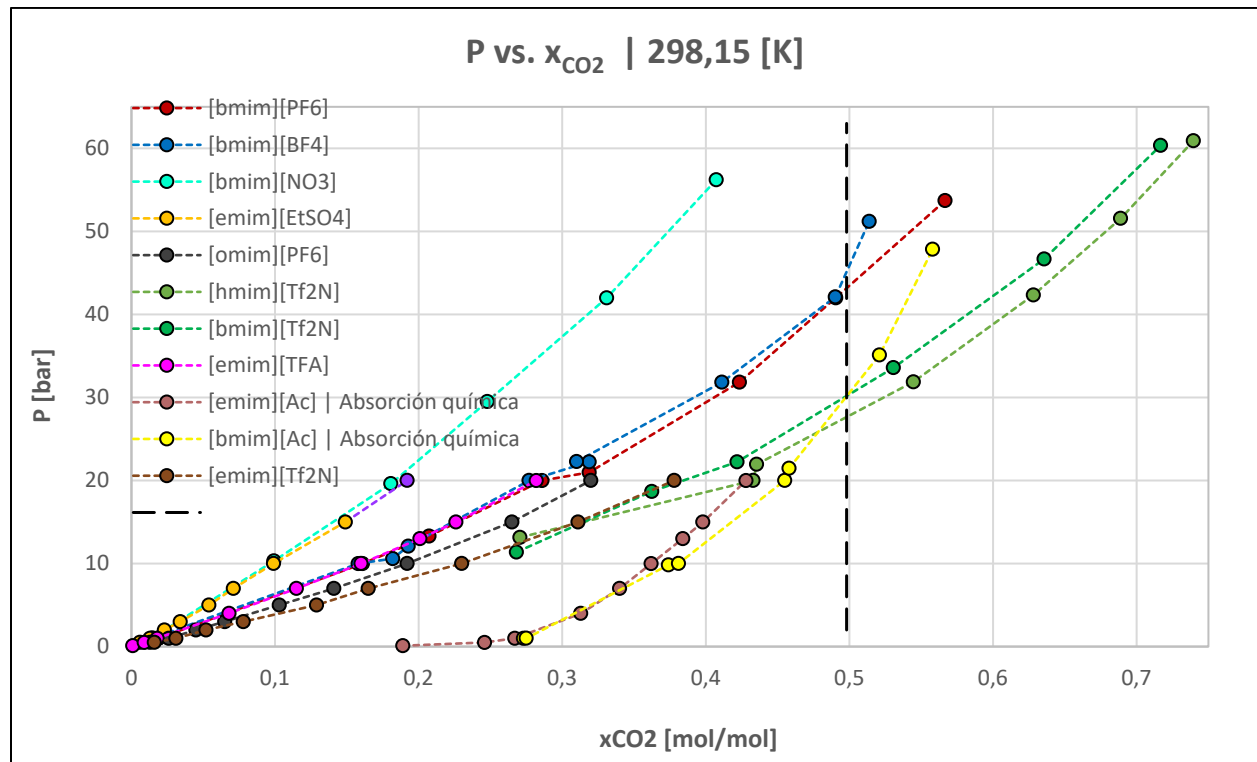
Figura 4

Perfiles de concentración de la torre de absorción y regeneradora.



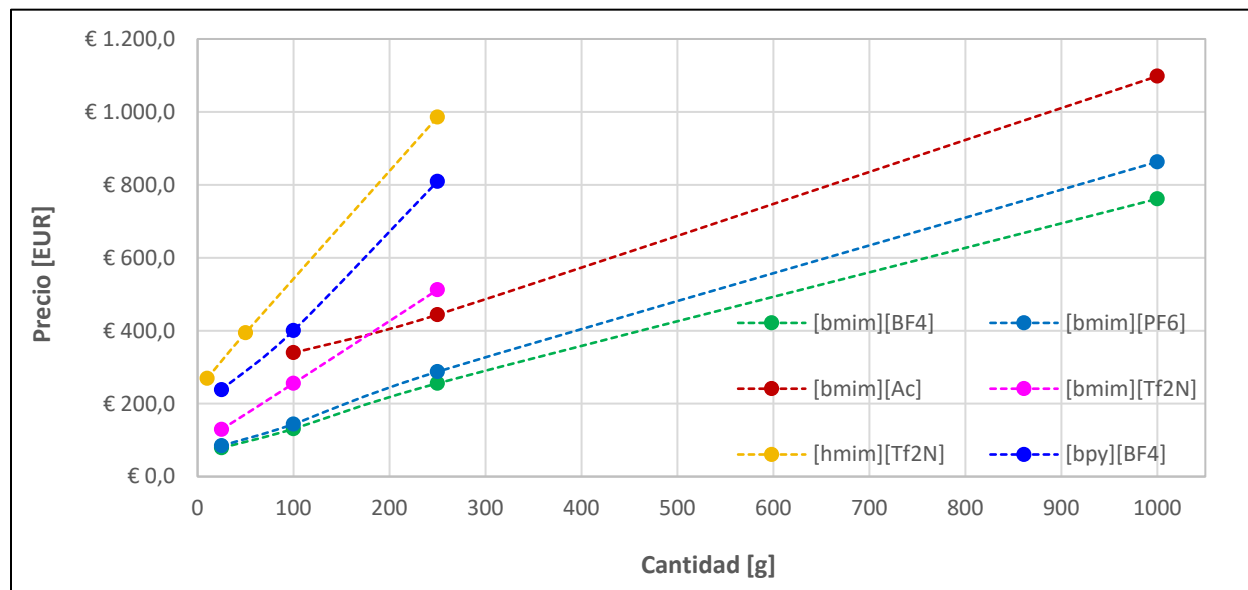
5.2 Selección de un Líquido Iónico

La **Figura 5** presenta la variación de la solubilidad molar de CO₂ en diferentes líquidos iónicos (x_{CO_2}) para presiones (total) entre los valores de 0 y 60 bar, a una temperatura de 298,15 K. Los datos fueron obtenidos de una revisión de literatura cuyos datos se presentan en el Apéndice D. Según esta figura un aumento de la presión del sistema conlleva a un aumento de captura de CO₂.

Figura 5*P vs. x_{CO_2} en diferentes líquidos iónicos.*

En esta figura, la línea negra vertical segmentada establece una línea base de comparación con la solubilidad de CO₂ obtenida en el proceso de absorción utilizando MEA (Sección 5.1) en las condiciones de operación de la torre de absorción. Aquellos LI que mejoran la captura de CO₂ respecto al proceso con MEA son aquellos que presentan fracciones de CO₂ mayores que 0,5 como es el caso del [bmim][BF₄], [bmim][PF₆], [bmim][Ac], [bmim][Tf₂N] y [hmim][Tf₂N], considerados para su selección, dado que indicaban un rendimiento superior a la MEA en términos de absorción de CO₂. Es importante destacar que en la figura se resalta que, a bajas presiones los imidazolios que contienen el anión acetato ([Ac]⁻) presentan la mayor capacidad de captura de CO₂ debido a la absorción química. Estos LI requieren de un mayor consumo energético, en comparación con aquellos que se basan únicamente en la fisisorción, por lo cual los LI que mostraron absorción química, no fueron considerados para su análisis en la simulación.

Asimismo, se analizó la variación del precio de los LI con mayor captura de CO₂ y su cantidad o disponibilidad en el mercado, como se observa en la **Figura 6**. Dado que no se encontraron en la literatura abierta, los datos fueron recopilados de diversos proveedores, algunos de acceso libre y otros por medio de cotización. Según esta figura, el [hmim][TF₂N] y el [bmim][TF₂N] presentan una pendiente pronunciada que refleja sus costos elevados, lo cual los descarta como opciones viables a nivel financiero. Es importante destacar que los precios de estos LI se detallan en el Apéndice D; algunos de los LI inicialmente considerados no están disponibles comercialmente. Desde una perspectiva de costos al por mayor, el 1-butil-3-metilimidazolio tetrafluoroborato [bmim][BF₄] se posiciona como la opción más favorable para su análisis en la simulación.

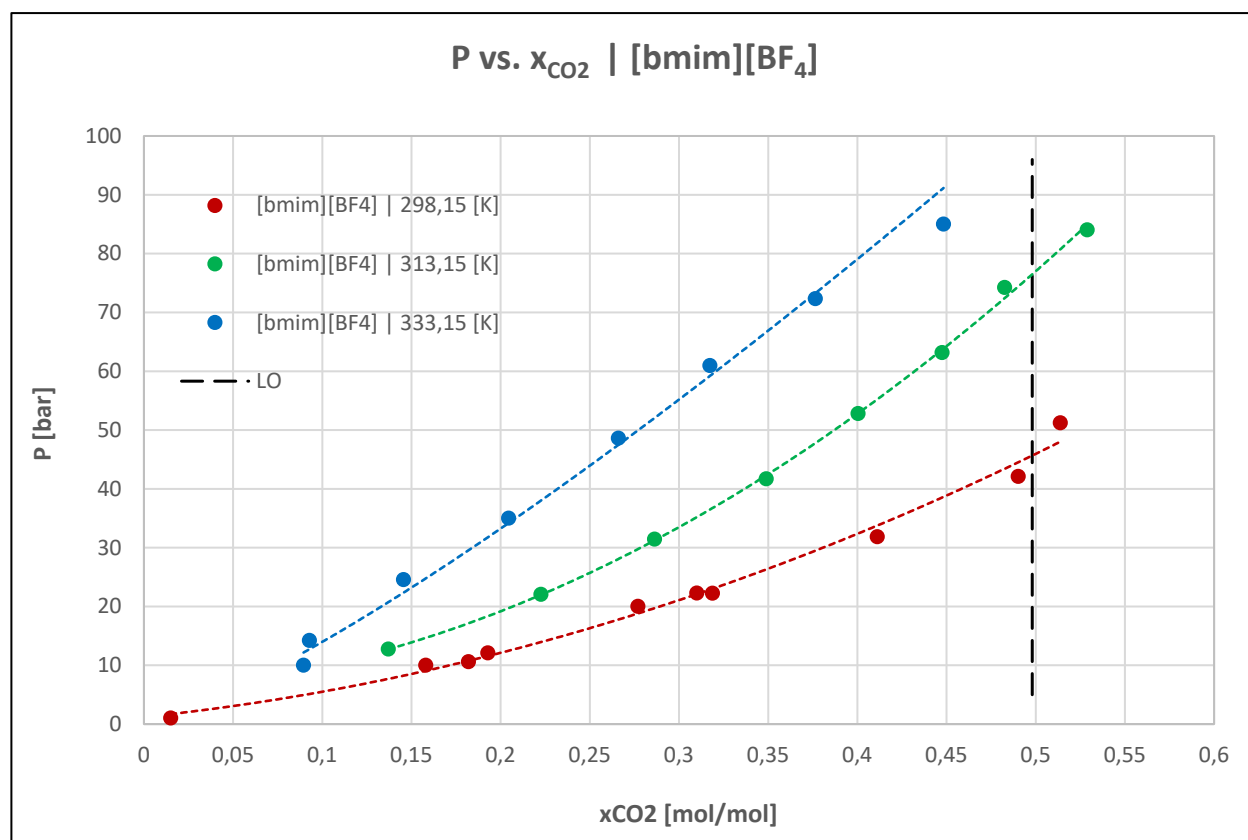
Figura 6*Precio vs. Cantidad*

Propiedades Termodinámicas y Validación de Parámetros.

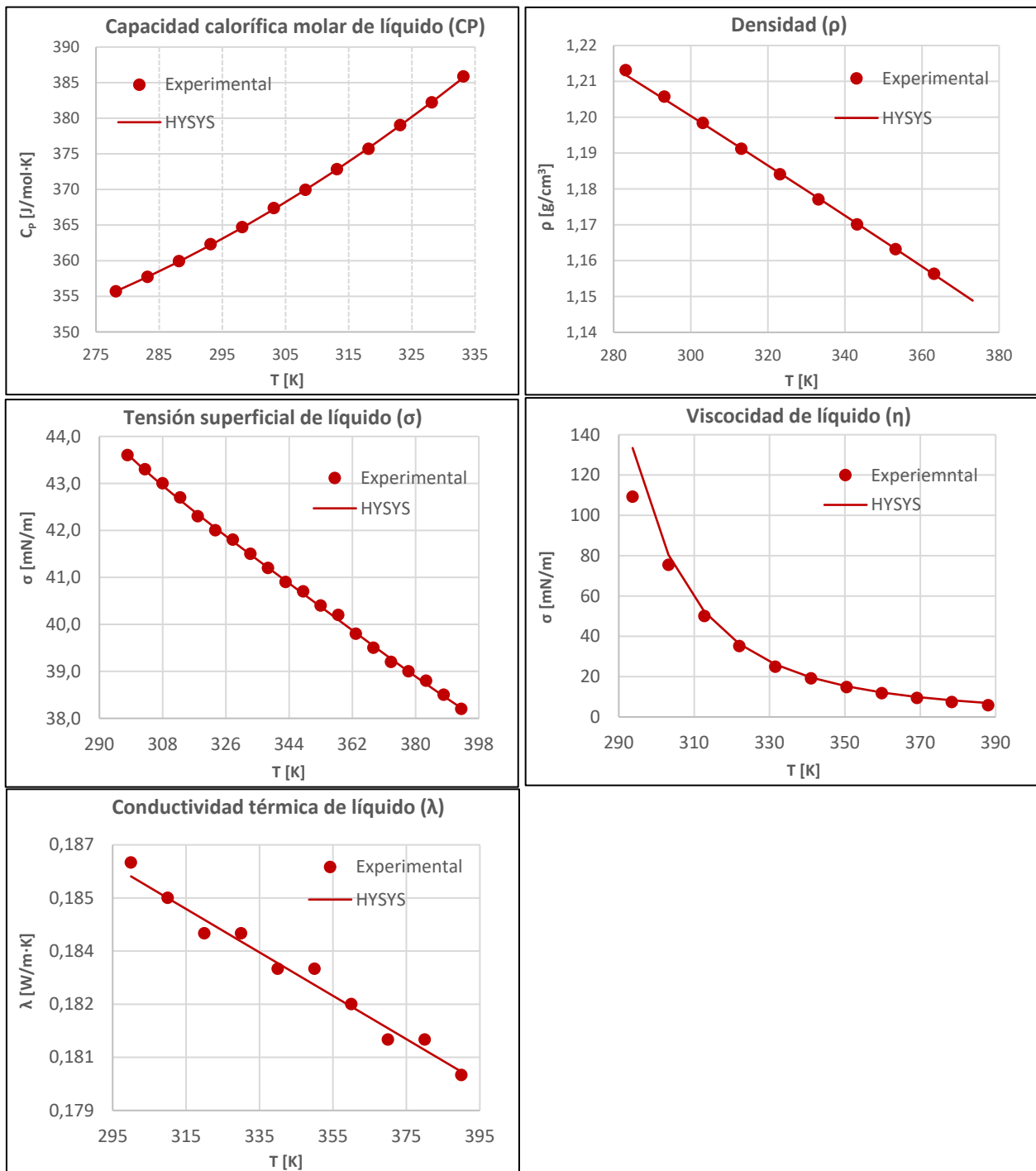
El análisis de la gráfica de solubilidad del dióxido de carbono para el 1-butil-3-metilimidazolio tetrafluoroborato [bmim][BF₄] revela patrones significativos en función de la presión y la temperatura. En la **Figura 7**, se presentan tres isotermas a temperaturas específicas: 298.15, 313.15 y 333.15 [K] (Aki et al., 2004). Según esta figura, la solubilidad del CO₂ tiende a aumentar a medida que se incrementa la presión en el sistema, mientras que esta solubilidad disminuye con un aumento en la temperatura.

Figura 7

P vs x_{CO2} in RTIL



En la **Figura 8** se presentan los resultados de la validación de varias propiedades para el [bmim][BF₄]. Estos resultados concuerdan con los reportados en la literatura. Los detalles completos sobre los parámetros utilizados para definir estas propiedades se encuentran en el Apéndice E. Según lo mostrado en la **Figura 8**, la codificación de las propiedades [bmim][BF₄] realizado en la sección de *Aspen Properties* de Aspen HYSYS reproduce de manera satisfactoria los valores experimentales expresados por (Huang et al., 2014). Lo anterior soporta los resultados mostrados en la siguiente sección.

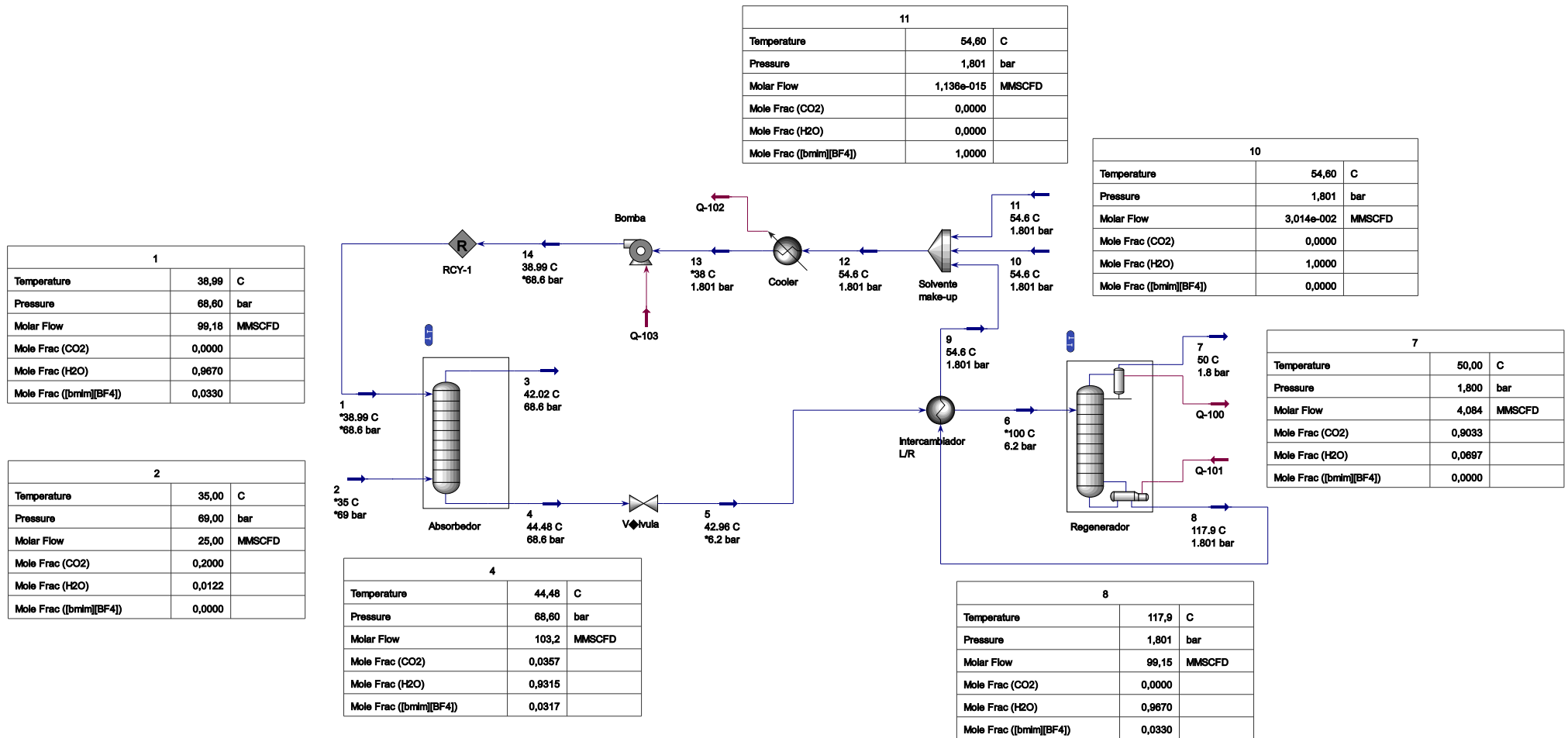
Figura 8*Validación propiedades termodinámicas.**Nota.* Valores experimentales tomados de (Huang et al., 2014).

5.3 Simulación del proceso de absorción con LI

El PFD desarrollado en la sección 5.1 fue modificado para considerar al [bmim][BF₄] (30% en solución acuosa) como el fluido absorbente (sección 4.3 de la metodología) y se mantuvo las condiciones de operación y composiciones del gas de entrada. La **Figura 9** presenta el PFD del proceso con [bmim][BF₄] en el ambiente de simulación de Aspen HYSYS, así como las condiciones de entrada y salida del proceso de endulzamiento. Según los resultados (**Tabla 4**), el gas de entrada, tratado con mezcla [bmim][BF₄]/H₂O, reduce su contenido de CO₂ hasta el 0,0626 molar, una temperatura de 42,2 °C, una presión de 68,60 bar y un flujo de 20.94 MMSCFD (Gas de salida Absorbedor). En cuanto al líquido de salida del absorbedor, su composición fue principalmente 0,0357 mol de CO₂, con un flujo total de 53,2 MMSCFD. Con esto la concentración de CO₂ recuperado de la regeneradora fue de 97% peso. Los anteriores resultados concuerdan con el trabajo de (Akinola et al., 2019); estos autores reportan un contenido del 95% peso con su simulación desarrollada en Aspen Plus.

Figura 9

Diagrama de proceso de absorción de CO₂ con [bmim][BF₄].



La absorción de CO₂ utilizando líquidos iónicos involucra diversos fenómenos a tener en consideración. En primer lugar, se observa una baja afinidad entre el [bmim][BF₄] y el metano, como lo han documentado los estudios previos de (Shaahmadi et al., 2020) (Otvagina et al., 2016). En los experimentos de absorción de [bmim][BF₄] en mezclas de CH₄/CO₂, el metano tiende a mantenerse en la fase gaseosa, lo que indica una preferencia por la separación de fases entre estos dos componentes. En el caso de otros hidrocarburos, también se presenta una baja solubilidad, como lo ha señalado (Camper et al., 2005); sus investigaciones indican que, en comparación con la absorción de CO₂, la solubilidad de los hidrocarburos de bajo peso molecular es insignificante. De igual manera, los autores (Anthony et al., 2004) han justificado que la absorción de los gases N₂ y O₂ por [bmim][BF₄] resulta despreciable. Esto significa que estos gases mantienen una baja retención por el líquido iónico en condiciones de absorción, lo que tiene implicaciones importantes para el diseño de procesos de separación y captura de CO₂. Con base en lo anteriormente expuesto, se opta por omitir la etapa de separación flash, dado que el [bmim][BF₄] del fondo de la columna de absorción carece de hidrocarburos que necesiten ser eliminados.

Analizando el desempeño de cada equipo, en la torre regeneradora se obtuvo un gas a la salida (tope) con una composición de 90,33 % mol de CO₂, una temperatura de 50 °C y una presión de 1,80 bar. En cuanto al solvente regenerado (Con adición de [bmim][BF₄] y H₂O) de reposición, se obtuvo una composición nula de CO₂, una temperatura de 38,99 °C y una presión de 68,60 bar. También se ha estimado una pérdida por evaporación de H₂O de 9,696e-2 MMSCFD con una pérdida de 3,014e-2 MMSCFD.

En la **Tabla 4** se resumen los resultados encontrados en esta sección, estos muestran desviaciones en comparación con los obtenidos por Akinola et al. y Ma et al., los cuales consideraron MEA+[bpy][BF₄] y [bmim][BF₄] puro, respectivamente. El presente documento

propone la aplicación solo de [bmim][BF₄] al 30% en agua, mientras que Akinola et al. utilizaron una mezcla de [bpy][BF₄] al 30% y MEA al 30%; con esto, el presente trabajo muestra la factibilidad de la omisión de MEA y el uso de [bmim][BF₄] en la operación de captura de CO₂ con el proceso convencional aplicado industrialmente. Por su parte, Ma et al. analizaron los líquidos iónicos puros en el proceso convencional, lo cual resulta desfavorable financieramente dado que presentaría elevados costos para la compra del solvente, junto con un elevado requerimiento energético en la bomba producto de las altas viscosidades presentadas por el [bmim][BF₄] en estado puro.

Tabla 4.

Resultados obtenidos simulación [bmim][BF₄]

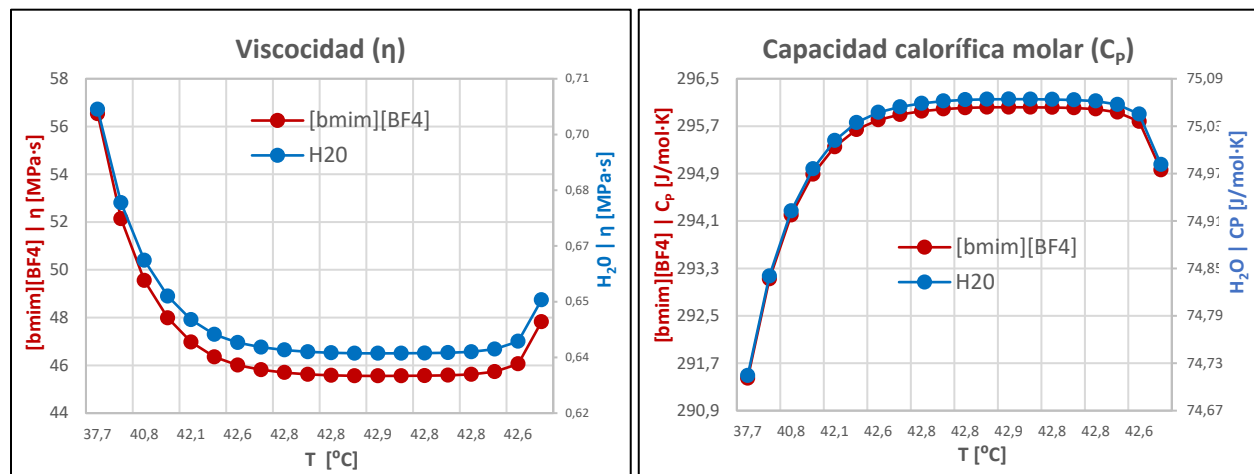
Variable	Este trabajo. [Bmim][BF ₄]- H ₂ O	Akinola et al. 2019 [Bpy][BF ₄]-MEA - H ₂ O	Ma. et al. 2017 [Bmim][BF ₄]	Unidades	Error
Solvente pobre	122 932	129 737	4,54 [m ³ /s]	kg/h	5%
L/G	4,389	4,61	-	kg/kg	5%
Carga de CO ₂ en solvente pobre	4,183E-33	0,11	-	kmol CO ₂ /kmol solvente	100%
Carga de CO ₂ en solvente rica	1,126	0,42	-	kmol CO ₂ /kmol solvente	168%
Temperatura del solvente rico	44,479	76	25,85	°C	41%
Temperatura del rehervidor	117,857	126	-	°C	6%
Requerimiento neto energético del proceso	3,778	3,8	2.63	GJ/t CO ₂	1%
Requerimiento energético de la bomba	0,133	0,11	263,46	GJ/t CO ₂	21%
Agua de enfriamiento.	1436,460	1398,71	-	t/h	3%
Solvente de reposición.	3,345	32,91	2,990E-4	kg/t CO ₂	90%

Análisis perfiles de propiedades de las torres – Simulación [bmim][BF₄]:

En la **Figura 10**, presentan las curvas de viscosidad y capacidad calorífica de sustancia pura proporcionadas por Aspen HYSYS para el [bmim][BF₄] y el agua, en el rango de temperatura de la torre de absorción. Es conocido que los líquidos iónicos exhiben valores elevados de viscosidad debido a sus interacciones moleculares (de Riva et al., 2018). Varios estudios han corroborado que el uso exclusivo del [bmim][BF₄] no es práctico en esta aplicación y esta tendencia puede ser mitigada mediante la adición de agua al proceso, tal como es propuesto en este trabajo.

Figura 10

Viscosidad y Capacidad Calorífica para [bmim][BF₄] y H₂O

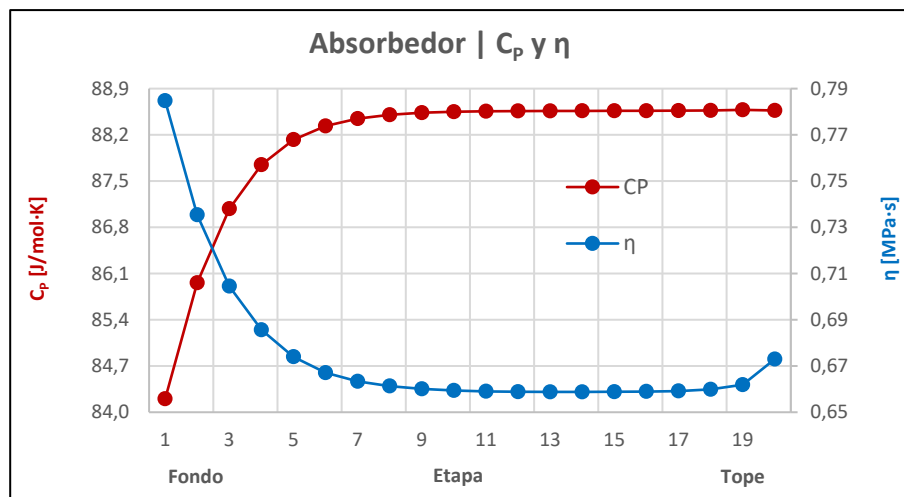


Por otro lado, en la curva de capacidad calorífica (CP) se observa que a medida que la temperatura aumenta para ambos compuestos, la capacidad calorífica también aumenta. (Rebelo et al., 2004) estudiaron las propiedades termodinámicas para el sistema [bmim][BF₄]-H₂O, en esta investigación se corrobora el comportamiento obtenido en la figura anterior.

Un dato a destacar es la notable diferencia en los valores de C_p entre el [bmim][BF₄] y el agua. El C_p del [bmim][BF₄] es considerablemente más elevado ya que se sitúa alrededor de los 290 J/mol·K, mientras el del agua ronda los 70 J/mol·K. Por tanto, se atribuye, parcialmente, a la mayor capacidad calorífica del [bmim][BF₄] que el sistema no aumente tanto su temperatura en comparación al proceso con MEA, lo cual repercute en menor evaporación.

Figura 11

Perfil de Viscosidad y Capacidad Calorífica de corriente líquida en absorbedor



En la **Figura 11** se observa la viscosidad de la corriente líquida de la torre de absorción. En esta se observa que la mezcla [bmim][BF₄]-H₂O presenta una viscosidad significativamente menor que la del [bmim][BF₄] puro, con lo cual su disminución es gracias a su mezcla con H₂O. Por otra parte, se aprecia una tendencia de aumentar la viscosidad a medida que la composición de CO₂ en la corriente líquida aumenta. Estudios previos realizados por (Soutullo et al., 2007) se llevó a cabo observaciones experimentales que revelaron que los líquidos iónicos termostables (TSIL) funcionalizados con amina al entrar en contacto con el CO₂ experimentan un dramático aumento de viscosidad, dando lugar a la formación de una sustancia que se asemeja a un gel (Zhou et al.,

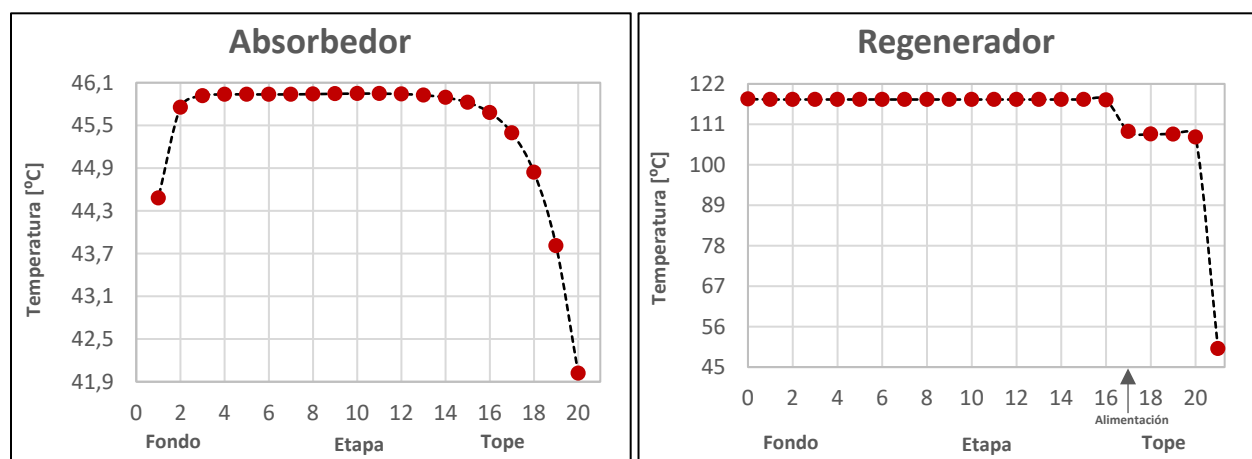
2007), por ello en la zona del fondo de la torre es donde se presenta mayor viscosidad, dado que hay mayor concentración de CO₂. Investigaciones complementarias, identificaron que los aniones muestran una clara preferencia por interactuar intensamente con los grupos –NH₂ presentes en las colas de los cationes, estableciendo enlaces de hidrógeno significativos. Este fenómeno, según sus conclusiones, es un factor fundamental detrás de la elevada viscosidad observada en estos sistemas (Gutowski & Maginn, 2008) (Gurkan et al., 2013).

La capacidad calorífica de la corriente líquida aumentó con la mezcla [bmim][BF₄]-H₂O, en comparación con las sustancias puras, esto favorece la disminución de la temperatura en la torre de absorción y regeneración. Además, el C_p se ve influenciado por la cantidad de CO₂ disuelto en el [bmim][BF₄]; a mayor sea la concentración de CO₂ la capacidad calorífica disminuye (Yu et al., 2009).

Perfiles de temperatura – Simulación [bmim][BF₄]

Figura 12

Perfil de Temperatura Absorbedor y Regenerador – [bmim][BF₄]



El perfil de temperatura observado en la torre de absorción muestra un aumento gradual de la temperatura a medida que se desciende en la torre, lo cual es coherente con los fenómenos de absorción física de CO₂ que ocurren en la solución de agua y [bmim][BF₄]. Los valores de temperatura varían en un rango de 41.9°C a 46.1°C a lo largo de la torre. Este comportamiento térmico es consistente con los resultados de estudios previos de simulación de absorción con líquidos iónicos, como se ha documentado en la investigación de referencia proporcionada por (Oko et al., 2018).

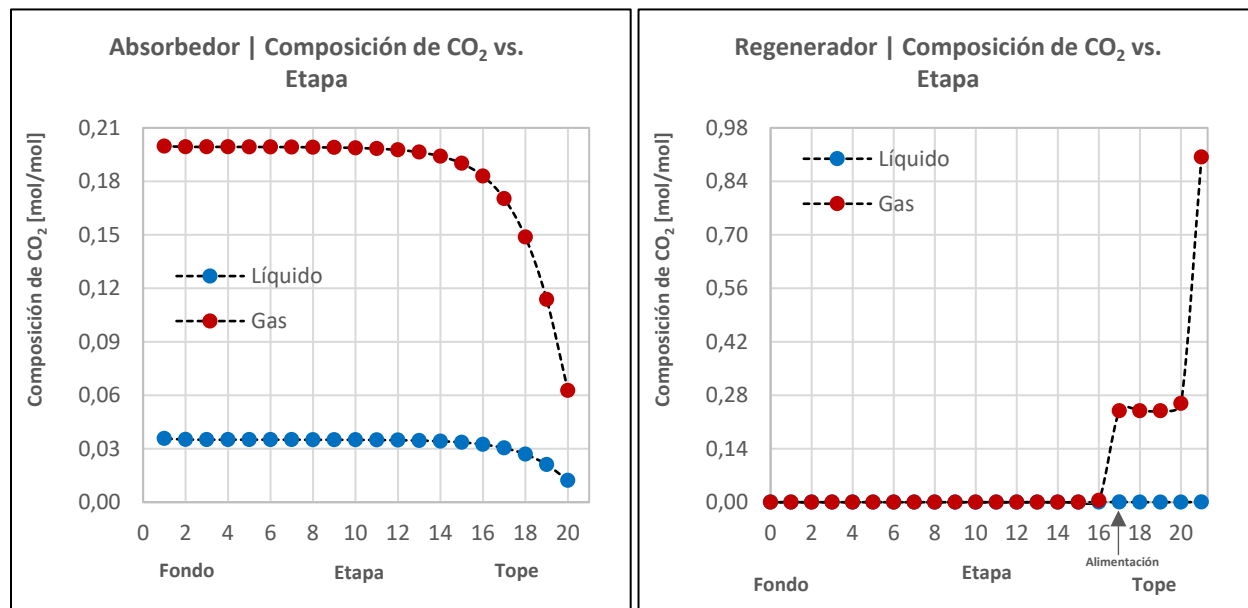
Un punto para destacar es que las temperaturas alcanzadas en este proceso de absorción con [bmim][BF₄] son significativamente más bajas en comparación con el proceso de absorción de CO₂ MEA ya que el [bmim][BF₄] alcanza la temperatura de unos 45 °C y la MEA de hasta 89 °C. En el caso de la MEA (sección 5.1), se analiza la formación de un domo producto de la absorción química que en su caso con el [bmim][BF₄] no se presenta.

En la **Figura 12** se muestra el perfil de temperatura para la torre regeneradora, en ella se ve una temperatura estable a lo largo de la torre que presenta un pequeño cambio en las etapas superiores, este cambio de temperatura observado en la etapa 16 es producto de la interacción entre la corriente de alimentación (etapa 16) y el agua condensada que ingresa (etapa 20) a 50 °C (Ver Apéndice B **Figura 4**), y además de ello se ve influenciada por el desprendimiento de CO₂ discusión que se dará posteriormente. En comparación con los resultados de la simulación con MEA se obtuvieron menores temperaturas en el rehervidor de 117,85°C.

Perfiles de concentración – Simulación [bmim][BF₄]

Figura 13

Perfil de Concentración – Simulación [bmim][BF₄].



La **Figura 13** muestra cómo la composición de CO₂ en la fase gaseosa disminuye a medida que el gas asciende en la torre de absorción. Esto se debe a la eficaz absorción de CO₂ por parte de la solución acuosa del [bmim][BF₄]. Este comportamiento no es similar al observado en simulaciones previas con monoetanolamina (MEA), donde MEA logra composiciones aún más bajas de CO₂ en el gas de salida (ver sección 5.1).

La composición de CO₂ en la torre regeneradora muestra un proceso eficiente. En la etapa 16, la corriente de alimentación que contiene CO₂, [bmim][BF₄] y agua, en la etapa el CO₂ se libera rápidamente, alcanzando una composición cercana a cero para la fase líquida (Vargas Reyes & González Martínez, 2022).

A medida que la corriente asciende en las etapas siguientes (17,18, 19, 20), la composición de CO₂ en la fase líquida aumenta gradualmente alcanzando así su mayor concentración de 0,903 Mol de CO₂.

Se observa que la torre regeneradora puede estar sobredimensionada, dado que el perfil de concentración muestra valores cercanos a 0 en la mayoría de las etapas.

Por último, lo encontrado con la simulación utilizando el [bmim][BF₄] presenta un proceso más eficiente, obteniendo mayor porcentaje recuperación de CO₂ (en la torre de regeneración), logrando un incremento del 20%, además, se reporta un mejor desempeño energético respecto al proceso con MEA, disminuyendo el requerimiento un 17,71%. Por ello se exhorta a llevar el proceso a una etapa de desarrollo básico y detallado para implementar a escala piloto e industrial posteriormente.

6. Conclusiones

En conclusión, se estableció el desempeño de captura de CO₂ con MEA mediante el programa Aspen HYSYS V12.1. En la simulación se reportó una captura del 96,8 % mol para la torre de absorción y un requerimiento energético de 4,591 GJ/t CO₂, por otra parte, se obtuvo una carga de CO₂ en el solvente pobre de 0,102 kmol CO₂/kmol. Estos resultados en comparación con Akinola et. al. validan la simulación como línea base para el proceso de absorción.

Se ha optado por el líquido iónico [bmim][BF₄] como absorbente, basándose en una cuidadosa evaluación que consideró datos experimentales de solubilidad de CO₂, afinidad con el agua, precios y disponibilidad en el mercado. A pesar de que [bmim][BF₄] presenta una solubilidad de CO₂ menor que algunos otros líquidos iónicos basados en [Tf₂N]⁻ y [Ac]⁻, su nivel de solubilidad sigue siendo razonablemente alto y superior a la mayoría de los demás líquidos iónicos evaluados.

Además, su mecanismo de absorción física lo hace preferible sobre aquellos que exhiben absorción química (como LI con [Ac]⁻). Por último, su atractiva oferta económica lo convierte en una elección favorable en comparación con los líquidos iónicos de mayor costo y disponibilidad limitada.

La evaluación del proceso de captura de CO₂ utilizando [bmim][BF₄] a través de Aspen HYSYS V12.1 reportó una tasa de captura del 73,78% molar en la torre de absorción, en conjunto con una reducción del 50,03% en la cantidad de agua requerida para el enfriamiento. Estos resultados son significativos porque conllevan a un ahorro energético notable del 17,71% en comparación con la línea base (MEA). No obstante, el diseño actual de 20 etapas de la torre de absorción y regeneración se encuentra sobredimensionado, como se evidencia en los perfiles de temperatura y composición de ambas torres en el proceso con [bmim][BF₄], presentando condiciones constantes en más de la mitad de estas.

Lo anterior demuestra la factibilidad técnica para el uso del [bmim][BF₄] en solución acuosa como solvente para el proceso de captura de CO₂, el cual, con un diseño óptimo, se espera obtener un desempeño incluso mayor, mostrando el potencial intrínseco en el uso de este líquido iónico.

7. Recomendaciones

Se recomienda expandir el conocimiento en base a esta investigación, como lo es incorporando una investigación técnico-económica del proceso de absorción de CO₂ utilizando [bmim][BF₄]. Así también, se recomienda profundizar el conocimiento de la formación de dos fases líquidas en el absorbedor, comprender este fenómeno es clave para la optimización, reducir costos y mejorar la seguridad en diversas aplicaciones.

Referencias bibliográficas

abcr. Gute Chemie. (s. f.). *Specialty chemicals for research & development – abcr Gute Chemie*.

Recuperado 7 de septiembre de 2023, de <https://abcr.com/>

Addington, L., & Ness, C. (2010). An evaluation of general «rules of thumb» in amine sweetening unit design and operation. *GPA Annual Convention Proceedings, 1*, 119-135.

Aki, S. N. V. K., Mellein, B. R., Saurer, E. M., & Brennecke, J. F. (2004). High-Pressure Phase Behavior of Carbon Dioxide with Imidazolium-Based Ionic Liquids. *The Journal of Physical Chemistry B*, 108(52), 20355-20365. <https://doi.org/10.1021/jp046895+>

Akinola, T. E., Oko, E., & Wang, M. (2019). Study of CO₂ removal in natural gas process using mixture of ionic liquid and MEA through process simulation. *Fuel*, 236, 135-146. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2018.08.152>

Anthony, J. L., Aki, S. N. V. K., Maginn, E. J., & Brennecke, J. F. (2004). Feasibility of using ionic liquids for carbon dioxide capture. *International Journal of Environmental Technology and Management*, 4(1-2), 105-115. <https://doi.org/10.1504/IJETM.2004.004624>

AspenTech. (2020). *Aspen Hysys unit operations—Reference Guide V12*. https://aspentechsupport.blob.core.windows.net/knowledge/003428434_HYSYSUnitOpsV12-Ref.pdf?rscd=inline%3Bfilename%3D%22HYSYSUnitOpsV12-Ref.pdf%22&se=2023-09-30T05%3A35Z&sig=mV8O3CpgS0MjRlO%2Brhse0qUd02vOhTHdF55Vi%2FPEgQQ%3D&sp=r&sr=b&st=2023-09-30T05%3A25Z&sv=2015-04-05

Camper, D., Becker, C., Koval, C., & Noble, R. (2005). Low Pressure Hydrocarbon Solubility in Room Temperature Ionic Liquids Containing Imidazolium Rings Interpreted Using

- Regular Solution Theory. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 44(6), 1928-1933. <https://doi.org/10.1021/ie049312r>
- Carlson, E. C. (1996). Don't gamble with physical properties for simulations. *Chemical engineering progress*, 92(10), 35-46.
- Chaves, I. D. G., López, J. R. G., Zapata, J. L. G., Robayo, A. L., & Niño, G. R. (2016). *Process analysis and simulation in chemical engineering*. Springer.
- de Riva, J., Ferro, V., Moya, C., Stadtherr, M. A., Brennecke, J. F., & Palomar, J. (2018). Aspen Plus supported analysis of the post-combustion CO₂ capture by chemical absorption using the [P2228][CNPyr] and [P66614][CNPyr]AHA Ionic Liquids. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 78, 94-102. <https://doi.org/10.1016/j.ijggc.2018.07.016>
- Dyment, J., & Watanasiri, S. (2015). *Acid Gas Cleaning using Amine Solvents: Validation with Experimental and Plant Data*.
- ErikØi, L. (2012). Comparison of Aspen HYSYS and Aspen Plus simulation of CO₂ Absorption into MEA from Atmospheric Gas. *Energy Procedia*, 23, 360-369. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2012.06.036>
- García Castañeda, D. C., & Ramírez Haro, J. N. (2018). *Simulación del proceso de captura de CO₂ y H₂S del gas natural amargo por absorción con monoetanolamina*. <http://tesis.ipn.mx/xmlui/handle/123456789/25342>
- Green, D. W., & Southard, M. Z. (Eds.). (2019). *Perry's chemical engineers' handbook* (Ninth edition, 85th anniversary edition). McGraw Hill Education.
- Gurkan, B. E., Gohndrone, T. R., McCready, M. J., & Brennecke, J. F. (2013). Reaction kinetics of CO₂ absorption in to phosphonium based anion-functionalized ionic liquids. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 15(20), 7796. <https://doi.org/10.1039/c3cp51289d>

- Gutowski, K. E., & Maginn, E. J. (2008). Amine-Functionalized Task-Specific Ionic Liquids: A Mechanistic Explanation for the Dramatic Increase in Viscosity upon Complexation with CO₂ from Molecular Simulation. *Journal of the American Chemical Society*, *130*(44), 14690-14704. <https://doi.org/10.1021/ja804654b>
- Huang, Y., Dong, H., Zhang, X., Li, C., & Zhang, S. (2013). A new fragment contribution-corresponding states method for physicochemical properties prediction of ionic liquids. *AIChE Journal*, *59*(4), 1348-1359. <https://doi.org/10.1002/aic.13910>
- Huang, Y., Zhang, X., Zhang, X., Dong, H., & Zhang, S. (2014). Thermodynamic Modeling and Assessment of Ionic Liquid-Based CO₂ Capture Processes. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, *53*(29), 11805-11817. <https://doi.org/10.1021/ie501538e>
- IEA. (2022). *Global Energy Review: CO₂ Emissions in 2021 – Analysis*. IEA. <https://www.iea.org/reports/global-energy-review-co2-emissions-in-2021-2>
- IoLiTec. (s. f.). *Iolitec—Ionic Liquids Technologies*. Recuperado 7 de septiembre de 2023, de <https://iolitec.de/>
- Kohl, A. L., & Nielsen, R. (1997). *Gas purification* (5th ed). Gulf Pub.
- Lin, Y.-J., Hossain, N., & Chen, C.-C. (2021). Modeling dissociation of ionic liquids with electrolyte NRTL model. *Journal of Molecular Liquids*, *329*, 115524. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2021.115524>
- Lin, Y.-J., Pan, T.-H., Wong, D. S.-H., Jang, S.-S., Chi, Y.-W., & Yeh, C.-H. (2011). Plantwide Control of CO₂ Capture by Absorption and Stripping Using Monoethanolamine Solution. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, *50*(3), 1338-1345. <https://doi.org/10.1021/ie100771x>

- Ma, T., Wang, J., Du, Z., Abdeltawab, A. A., Al-Enizi, A. M., Chen, X., & Yu, G. (2017). A process simulation study of CO₂ capture by ionic liquids. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 58, 223-231. <https://doi.org/10.1016/j.ijggc.2017.01.017>
- Marcus, Y. (2016). *Ionic Liquid Properties*. Springer International Publishing. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-30313-0>
- Ministerio de Ambiente y Desarrollo Sostenible. (2020, noviembre 26). *Colombia reducirá en un 51% sus emisiones de gases efecto invernadero para el año 2030*. Ministerio de Ambiente y Desarrollo Sostenible. <https://www.minambiente.gov.co/asuntos-ambientales-sectorial-y-urbana/colombia-reducira-en-un-51-sus-emisiones-de-gases-efecto-invernadero-para-el-ano-2030/>
- Ministerio de Ambiente y Desarrollo Sostenible. (2022, abril 21). Empresas: La Estrategia Colombia Carbono Neutral del Minambiente iniciará un nuevo ciclo. *Ministerio de Ambiente y Desarrollo Sostenible*. <https://www.minambiente.gov.co/empresas-la-estrategia-colombia-carbono-neutral-del-minambiente-iniciara-un-nuevo-ciclo/>
- Mirzaei, M., Badiiei, A. R., Mokhtarani, B., & Sharifi, A. (2017). Experimental study on CO₂ sorption capacity of the neat and porous silica supported ionic liquids and the effect of water content of flue gas. *Journal of Molecular Liquids*, 232, 462-470. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2017.02.104>
- Moya, C., Gonzalez-Miquel, M., Rodriguez, F., Soto, A., Rodriguez, H., & Palomar, J. (2017). Non-ideal behavior of ionic liquid mixtures to enhance CO₂ capture. *Fluid Phase Equilibria*, 450, 175-183. <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2017.07.014>
- Noguera, I. B. (2021). ¿Qué es Aspen Hysys? *Ingeniería Química Reviews*. <https://www.ingenieriaquimicareviews.com/2021/07/que-es-aspen-hysys.html>

- Oko, E., Zacchello, B., Wang, M., & Fethi, A. (2018). Process analysis and economic evaluation of mixed aqueous ionic liquid and monoethanolamine (MEA) solvent for CO₂ capture from a coke oven plant: Original Research Article: Process analysis and economic evaluation. *Greenhouse Gases: Science and Technology*, 8(4), 686-700. <https://doi.org/10.1002/ghg.1772>
- Otvagina, K. V., Mochalova, A. E., Sazanova, T. S., Petukhov, A. N., Moskvichev, A. A., Vorotyntsev, A. V., Afonso, C. A. M., & Vorotyntsev, I. V. (2016). Preparation and Characterization of Facilitated Transport Membranes Composed of Chitosan-Styrene and Chitosan-Acrylonitrile Copolymers Modified by Methylimidazolium Based Ionic Liquids for CO₂ Separation from CH₄ and N₂. *Membranes*, 6(2), Article 2. <https://doi.org/10.3390/membranes6020031>
- P212121. (s. f.). *Chemicals, Reagents, Plastics | P212121 Store*. Recuperado 7 de septiembre de 2023, de <https://store.p212121.com/>
- Pant, D., Kumar Nadda, A., Pant, K. K., & Agarwal, A. K. (Eds.). (2021). *Advances in Carbon Capture and Utilization*. Springer Singapore. <https://doi.org/10.1007/978-981-16-0638-0>
- Perumal, M., & Jayaraman, D. (2022). Amine-Ionic Liquid Blends in CO₂ Capture Process for Sustainable Energy and Environment. *Energy & Environment*, 0958305X2110707. <https://doi.org/10.1177/0958305X211070782>
- Rashid, H., Hasan, N., Nor, M., & Iskandar, M. (2014). Temperature Peak Analysis and Its Effect on Absorption Column for CO₂ Capture Process at Different Operating Conditions. *Chemical Product and Process Modeling*, 9. <https://doi.org/10.1515/cppm-2013-0044>
- Rebelo, L. P. N., Najdanovic-Visak, V., Visak, Z. P., Nunes Da Ponte, M., Szydłowski, J., Cerdeiriña, C. A., Troncoso, J., Romani, L., Esperança, J. M. S. S., Guedes, H. J. R., & De

- Sousa, H. C. (2004). A detailed thermodynamic analysis of [C4mim][BF₄] + water as a case study to model ionic liquid aqueous solutions. *Green Chem.*, 6(8), 369-381. <https://doi.org/10.1039/B400374H>
- Ritchie, H., Roser, M., & Rosado, P. (2020, mayo 11). *CO₂ and Greenhouse Gas Emissions*. Our World in Data. <https://ourworldindata.org/co2/country/colombia>
- Rodríguez Celma, I. (2017). *Líquidos iónicos. Propiedades, síntesis y aplicaciones* [Universidad Nacional de Educación a Distancia (España). Facultad de Ciencias. Departamento de Química Orgánica y Bio-Orgánica]. <http://e-spacio.uned.es/fez/view/bibliuned:master-Ciencias-CyTQ-Irodriguez>
- Shaahmadi, F., Hashemi Shahraki, B., & Farhadi, A. (2019). The Solubility of Carbon Dioxide and Density for Binary Mixtures of 1-Butyl-3-methylimidazolium Acetate and 1-Butyl-3-methylimidazolium Tetrafluoroborate. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 64(2), 584-593. <https://doi.org/10.1021/acs.jced.8b00784>
- Shaahmadi, F., Hashemi Shahraki, B., & Farhadi, A. (2020). The CO₂/CH₄ gas mixture solubility in ionic liquids [Bmim][Ac], [Bmim][BF₄] and their binary mixtures. *The Journal of Chemical Thermodynamics*, 141, 105922. <https://doi.org/10.1016/j.jct.2019.105922>
- Shiflett, M. B., Kasprzak, D. J., Junk, C. P., & Yokozeki, A. (2008). Phase behavior of {carbon dioxide+[bmim][Ac]} mixtures. *The Journal of Chemical Thermodynamics*, 40(1), 25-31. <https://doi.org/10.1016/j.jct.2007.06.003>
- Shiflett, M. B., & Yokozeki, A. (2009). Phase Behavior of Carbon Dioxide in Ionic Liquids: [Emim][Acetate], [emim][Trifluoroacetate], and [emim][Acetate] + [emim][Trifluoroacetate] Mixtures. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 54(1), 108-114. <https://doi.org/10.1021/jc800701j>

- Shukla, S. K., Khokarale, S. G., Bui, T. Q., & Mikkola, J.-P. T. (2019). Ionic Liquids: Potential Materials for Carbon Dioxide Capture and Utilization. *Frontiers in Materials*, 6. <https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/fmats.2019.00042>
- Soutullo, M. D., Odom, C. I., Wicker, B. F., Henderson, C. N., Stenson, A. C., & Davis, J. H. (2007). Reversible CO₂ Capture by Unexpected Plastic-, Resin-, and Gel-like Ionic Soft Materials Discovered during the Combi-Click Generation of a TSIL Library. *Chemistry of Materials*, 19(15), 3581-3583. <https://doi.org/10.1021/cm0705690>
- Valkenburg, M. E. V., Vaughn, R. L., Williams, M., & Wilkes, J. S. (2005). Thermochemistry of ionic liquid heat-transfer fluids. *Thermochimica Acta*, 425(1), 181-188. <https://doi.org/10.1016/j.tca.2004.11.013>
- Vargas Reyes, L. S., & González Martínez, A. C. (2022). Evaluación del desempeño del proceso Turboexpander en gases asociados del petróleo con diferente concentración de CO₂ usando la herramienta HYSYS. <https://noesis.uis.edu.co/handle/20.500.14071/11352>
- Yokozeiki, A., Shiflett, M. B., Junk, C. P., Grieco, L. M., & Foo, T. (2008). Physical and Chemical Absorptions of Carbon Dioxide in Room-Temperature Ionic Liquids. *The Journal of Physical Chemistry B*, 112(51), 16654-16663. <https://doi.org/10.1021/jp805784u>
- Yu, Y.-H., Soriano, A. N., & Li, M.-H. (2009). Heat capacity and electrical conductivity of aqueous mixtures of [Bmim][BF₄] and [Bmim][PF₆]. *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, 40(2), 205-212. <https://doi.org/10.1016/j.jtice.2008.09.006>
- Zhou, G., Liu, X., Zhang, S., Yu, G., & He, H. (2007). A Force Field for Molecular Simulation of Tetrabutylphosphonium Amino Acid Ionic Liquids. *The Journal of Physical Chemistry B*, 111(25), 7078-7084. <https://doi.org/10.1021/jp068365e>

Apéndices

Apéndice A. Listado de variables

ρ : Densidad

M: Masa molar [$\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$]

V_c : Volumen crítico [$\text{cm}^3\cdot\text{Mol}^{-1}$]

T_r : Temperatura reducida

T_b : Temperatura normal de ebullición [K]

T_c : Temperatura crítica [K]

ω : Factor acéntrico

P_c : Presión crítica [bar]

P_b : Presión normal de evaporación [bar]

$n_i\Delta T_{b,i}$: Incrementos de fragmento del fragmento i de la Temperatura normal de ebullición.

$n_i\Delta T_{c,i}$: Incrementos de fragmento del fragmento i de la Temperatura crítica.

$n_i\Delta P_{c,i}$: Incrementos de fragmento del fragmento i de la Presión crítica.

$n_i\Delta V_{c,i}$: Incrementos de fragmento del fragmento i del Volumen crítico.

P^s_i : Presión de vapor [Pa].

$C_{1,i}$, $C_{2,i}$ y $C_{3,i}$: Coeficientes del compuesto i para la ecuación de presión de vapor.

$C_{P,i}$: Capacidad calorífica del compuesto i [$\text{J}\cdot\text{kmol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$].

$C'_{1,i}$, $C'_{2,i}$ y $C'_{3,i}$: Coeficientes del compuesto i para la ecuación de la capacidad calorífica.

R , Z_i^* , R_A y d_i : Coeficientes de la ecuación de la densidad

η : Viscosidad del líquido [m Pa]

A_i , B_i y C_i : Coeficientes de la ecuación de viscosidad.

φ_i^V : Coeficiente de fugacidad en la fase gaseosa.

y_i : la fracción molar del componente i en la fase gaseosa.

x_i : la fracción molar de componente i en la fase líquida.

H_{iA} : Constante de Henry del componente i en el disolvente A .

γ_i^∞ : Coeficiente de actividad de dilución infinita del componente i .

a_{iA} , b_{iA} , c_{iA} , d_{iA} y e_{iA} : Son parámetros de la ecuación donde i representa el componente y A el solvente.

φ_ξ^V : Coeficiente de fugacidad calculado mediante la ecuación de (Redlich-Kwong, RK)

R : Constante de los gases ideales.

T : Temperatura

V : Volumen molar

φ : Coeficiente de fugacidad en fase gaseosa

Z : factor de compresibilidad.

a y b : son constantes de la ecuación de (RK)

Apéndice B. Procedimiento de selección del paquete termodinámico**Figura 1**

Selección de un paquete termodinámico en Aspen HYSYS. MEA – H₂O

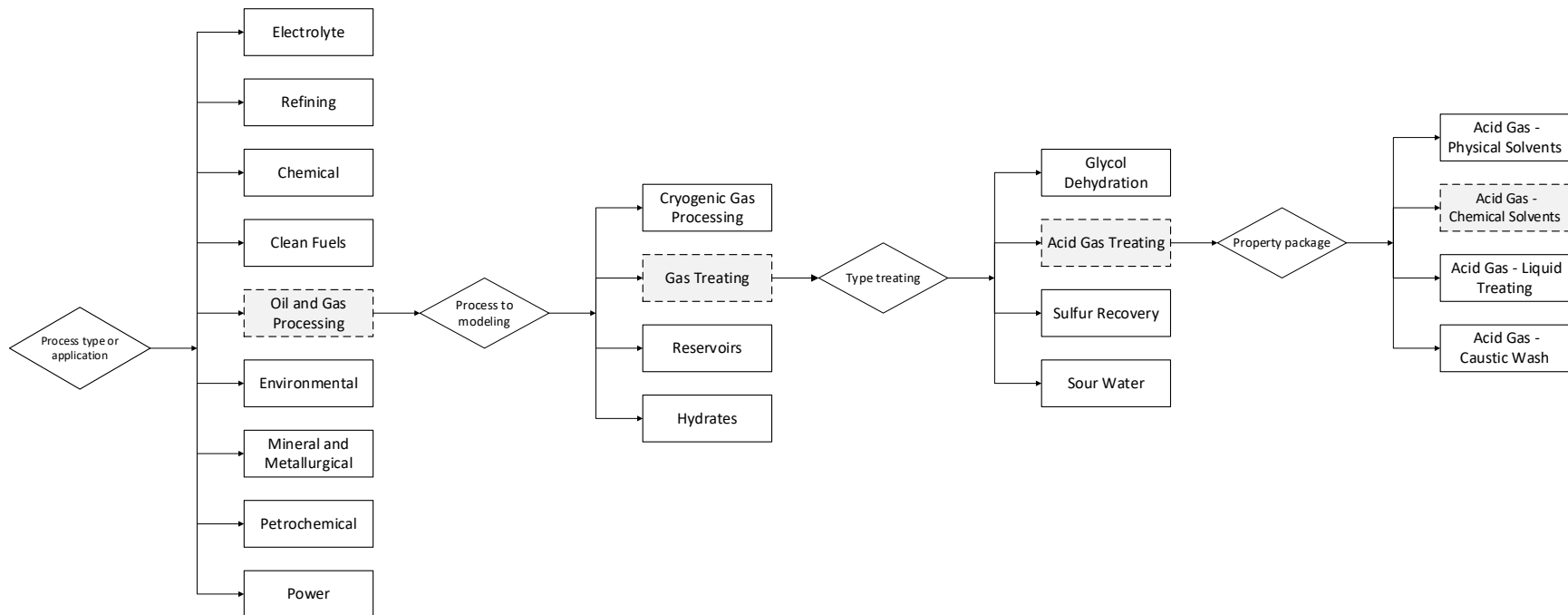
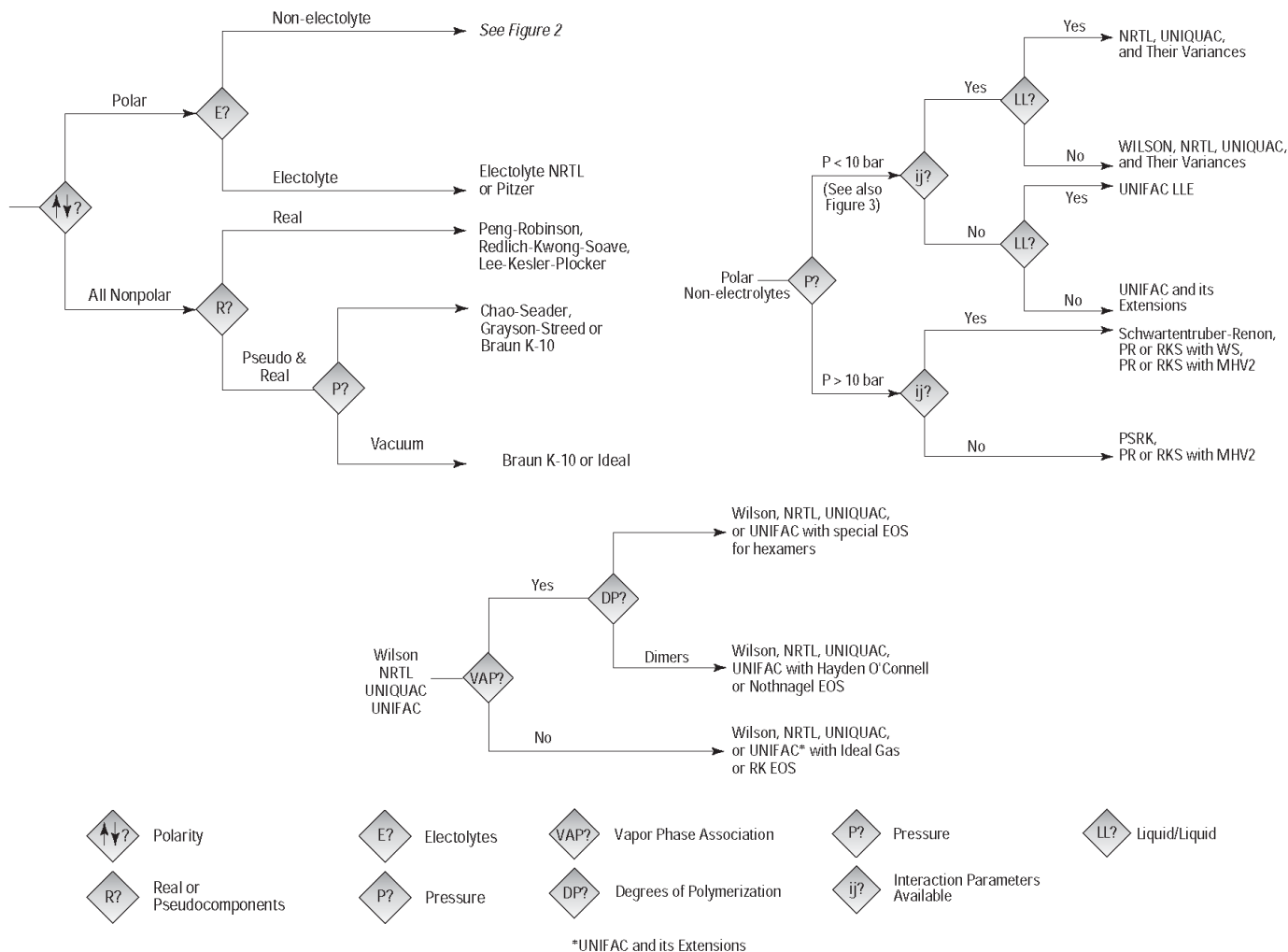


Figura 2

Árbol de decisión de un paquete termodinámico

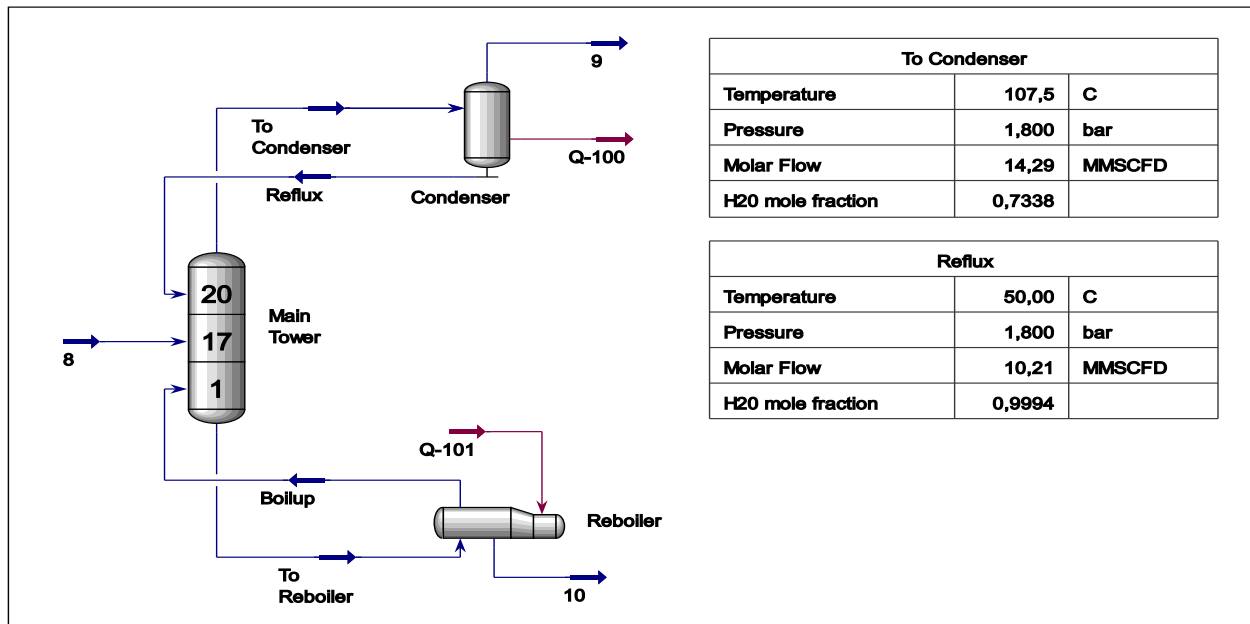


Nota. Adaptado de (Carlson, 1996)

Figura 3*Reacciones Químicas Aspen HYSYS*

The image shows two screenshots from Aspen HYSYS. The left screenshot displays the 'Reaction Set: Set-3' configuration window. It shows a list of active reactions (Rxn-55 to Rxn-60) all of which are 'Chemistry Equilibrium' type and are 'Configured'. The right screenshot shows the 'Equilibrium Chemistry: Rxn-56' window. It details the stoichiometry for reaction Rxn-56, showing the components H2O, CO2, H3O+, and HCO3- with their respective mole weights and stoichiometric coefficients. The reaction heat at 25 C is 3.8e+05 Btu/lbmole.

Component	Mole Weight	Stoich Coeff
H2O	18.015	-2.000
CO2	44.010	-1.000
H3O+	19.023	1.000
HCO3-	61.017	1.000
Add Comp		

Figura 4*Ambiente columna regeneradora.*

Apéndice C. Condiciones de operación de los equipos y diseño empírico del proceso**Tabla 1***Torre de absorción de MEA y LI en proceso de absorción de CO₂.*

Especificación de la Operación Unitaria	Valor	Unidad	Referencia
Regenerador			
Número de etapas.	20		(Akinola et al., 2019)
Presión de la torre.	170	kPa	(Akinola et al., 2019)
Damping	1		(AspenTech, 2020)
Altura de la Columna	6	m	(Akinola et al., 2019)
Tipo de Empaque	FLEXIPAC		(Akinola et al., 2019)
Dimensión del Empaque	250 Y		(Akinola et al., 2019)
Material del Empaque	Metal		(Akinola et al., 2019)

*Nota: Adaptado de (Akinola et al., 2019), (AspenTech, 2020).***Tabla 2***Torre regeneradora de MEA y LI en proceso de absorción de CO₂.*

Especificación de la Operación Unitaria	Valor	Unidad	Referencia
Regenerador			
Número de etapas.	20		(Akinola et al., 2019)
Condensador.	Full Rflx		(Akinola et al., 2019)
Temperatura de Alimentación	100 °C		(Addington & Ness, 2010).
Presión del tope.	170	kPa	(Akinola et al., 2019)
Caída de presión en la torre.	0.1	kPa	(Akinola et al., 2019)
Temperatura del condensador	50	°C	(Kohl & Nielsen, 1997)
Temperatura del rehervidor	120	°C	(Akinola et al., 2019)
Reflujo	2.9		(Kohl & Nielsen, 1997)
Damping	0.25 – 0.5		(AspenTech, 2020)
Altura de la Columna	6	m	(Akinola et al., 2019)
Tipo de Empaque	FLEXIPAC		(Akinola et al., 2019)
Dimensión del Empaque	250 Y		(Akinola et al., 2019)
Material del Empaque	Metal		(Akinola et al., 2019)

Nota: Adaptado de (Akinola et al., 2019), (Kohl & Nielsen, 1997).

Tabla 3*Equipos proceso de absorción de CO₂ con MEA y LI.*

Especificación de la Operación Unitaria	Valor	Unidad	Referencia
Intercambiador de calor			
Caliente/Frío incremento en la temperatura de salida.	5	°C	(Akinola et al., 2019)
Caída de presión del lado caliente	0	kPa	(Akinola et al., 2019)
Cooler			
Temperatura	38	°C	(Akinola et al., 2019)
Bomba			
Presión de descarga	66.899	kPa	(Akinola et al., 2019)

Apéndice D. Solubilidad de CO₂ y costos de diferentes líquidos iónicos**Tabla 1***Líquidos iónicos (LI)*

LI	CAS	Nombre
[bmim][Ac]	284049-75-8	Acetato de 1-butil-3-metilimidazolio
[bmim][NO ₃]	179075-88-8	Nitrato de 1-butil-3-metilimidazolio
[bmim][BF ₄]	174501-65-6	Tetrafluoroborato de 1-butil-3-metilimidazolio
[bmim][PF ₆]	174501-64-5	Hexafluorofosfato de 1-butil-3-metilimidazolio
[bmim][Tf ₂ N]	174899-83-3	Bisdifluorometilsulfonimida de 1-butil-3-metilimidazolio
[bpy][BF ₄]	203389-28-0	Tetrafluoroborato de 1-butilpiridinio
[emim][EtSO ₄]	342573-75-5	Etilsulfato de 1-etil-3-metilimidazolio
[emim][Ac]	143314-17-4	Acetato de 1-etil-3-metilimidazolio
[emim][TFA]	174899-65-1	Trifluoroacetato de 1-etil-3-metilimidazolio
[emim][Tf ₂ N]	145022-44-2	Trifluorometanosulfonato de 1-etil-3-metilimidazolio
[hmim][Tf ₂ N]	382150-50-7	Bisdifluorometilsulfonimida de 1-hexil-1-metilpirrolidinio
[omim][BF ₄]	244193-52-0	Tetrafluoroborato de 1-octil-3-metilimidazolio
[omim][PF ₆]	304680-36-2	Hexafluorofosfato de 1-octil-3-metilimidazolio

Nota. Adaptado de (Ma et al., 2017)

Tabla 2*Solubilidad [bmim][AC]*

Acetato de 1-butil-3-metilimidazolio - [bmim][AC]			
Temperatura [K]	Presión [bar]	X _{CO₂ in RTIL} [mol/mol]	Fuente
298.15	0.99	0.273	(Shaahmadi et al., 2019)
298.15	1.00	0.275	(Yokozeki et al., 2008)
298.15	9.83	0.374	(Shaahmadi et al., 2019)
298.15	10.00	0.381	(Shaahmadi et al., 2019)
298.15	20.00	0.455	(Shaahmadi et al., 2019)
298.15	21.47	0.458	(Shaahmadi et al., 2019)
298.15	35.12	0.521	(Shiflett et al., 2008)
298.15	47.85	0.558	(Shaahmadi et al., 2019)

Nota: Adaptado de (Shaahmadi et al., 2019), (Yokozeki et al., 2008) y (Shiflett et al., 2008).

Tabla 3*Solubilidad [bmim][NO₃]*

Nitrato de 1-butil-3-metilimidazolio - [bmim][NO ₃]			
Temperatura [K]	Presión [bar]	X _{CO₂ in RTIL} [mol/mol]	Fuente
298.15	1.01	0.0142	(Mirzaei et al., 2017)
298.15	10.31	0.099	(Aki et al., 2004)
298.15	19.62	0.181	(Aki et al., 2004)
298.15	29.51	0.248	(Aki et al., 2004)
298.15	42.00	0.331	(Aki et al., 2004)
298.15	56.21	0.4073	(Aki et al., 2004)

Nota: Adaptado de (Mirzaei et al., 2017), (Aki et al., 2004).

Tabla 4*Solubilidad [bmim][BF₄]*

Tetrafluoroborato de 1-butil-3-metilimidazolio – [bmim][BF ₄]			
Temperatura [K]	Presión [bar]	X _{CO₂ in RTIL} [mol/mol]	Fuente
298.15	1.00	0.019	(Yokozeki et al., 2008)
298.15	1.01	0.015	(Shaahmadi et al., 2019)
298.15	10.00	0.158	(Yokozeki et al., 2008)
298.15	10.59	0.182	(Shaahmadi et al., 2019)
298.15	12.09	0.1928	(Aki et al., 2004)
298.15	20.002	0.277	(Yokozeki et al., 2008)
298.15	22.25	0.3188	(Aki et al., 2004)
298.15	22.28	0.310	(Shaahmadi et al., 2019)
298.15	31.830	0.4112	(Aki et al., 2004)
298.15	42.100	0.4902	(Aki et al., 2004)
298.15	51.21	0.514	(Aki et al., 2004)
313.15	12.74	0.1370	(Aki et al., 2004)
313.15	22.05	0.2226	(Aki et al., 2004)
313.15	41.70	0.3489	(Aki et al., 2004)
313.15	52.78	0.4004	(Aki et al., 2004)
313.15	63.17	0.4475	(Aki et al., 2004)
313.15	74.24	0.4826	(Aki et al., 2004)
313.15	84.02	0.5289	(Aki et al., 2004)
333.15	14.22	0.0928	(Aki et al., 2004)
333.15	24.560	0.1456	(Aki et al., 2004)
333.15	35.01	0.2045	(Aki et al., 2004)
333.15	48.600	0.2660	(Aki et al., 2004)
333.15	60.96	0.3173	(Aki et al., 2004)
333.15	72.320	0.3765	(Aki et al., 2004)

Nota: Adaptado de (Yokozeki et al., 2008), (Shaahmadi et al., 2019), (Aki et al., 2004).

Tabla 5*Solubilidad [bmim][PF₆]*

Hexafluorofosfato de 1-butil-3-metilimidazolio - [bmim][PF ₆]			
Temperatura [K]	Presión [bar]	X _{CO₂ in RTIL} [mol/mol]	Fuente
298.15	1.00	0.019	(Yokozeki et al., 2008)
298.15	10.00	0.161	(Yokozeki et al., 2008)
298.15	13.31	0.2073	(Aki et al., 2004)
298.15	20.00	0.286	(Yokozeki et al., 2008)
298.15	20.98	0.319	(Aki et al., 2004)
298.15	31.84	0.4235	(Aki et al., 2004)
298.15	42.00	0.4905	(Aki et al., 2004)
298.15	53.71	0.5667	(Aki et al., 2004)

Nota: Adaptado de (Yokozeki et al., 2008), (Aki et al., 2004).

Tabla 6*Solubilidad [bmim][Tf₂N]*

Bisdifluorometilsulfonimida de 1-butil-3-metilimidazolio - [bmim][Tf ₂ N]			
Temperatura [K]	Presión [bar]	X _{CO₂ in RTIL} [mol/mol]	Fuente
298.15	11.38	0.2682	(Aki et al., 2004)
298.15	18.68	0.3624	(Aki et al., 2004)
298.15	22.24	0.4218	(Aki et al., 2004)
298.15	33.59	0.5307	(Aki et al., 2004)
298.15	46.67	0.6356	(Aki et al., 2004)
298.15	60.35	0.7168	(Aki et al., 2004)

Nota: Adaptado de (Aki et al., 2004).

Tabla 7*Solubilidad [emim][AC]*

Acetato de 1-etil-3-metilimidazolio - [emim][AC]			
Temperatura [K]	Presión [bar]	X _{CO₂ in RTIL} [mol/mol]	Fuente
298.15	0.1	0.189	(Shiflett & Yokozeki, 2009)
298.15	0.499	0.246	(Shiflett & Yokozeki, 2009)
298.15	1.000	0.267	(Shiflett & Yokozeki, 2009)
298.15	3.996	0.313	(Shiflett & Yokozeki, 2009)
298.15	6.995	0.340	(Shiflett & Yokozeki, 2009)
298.15	9.996	0.362	(Shiflett & Yokozeki, 2009)
298.15	12.998	0.384	(Shiflett & Yokozeki, 2009)
298.15	14.997	0.398	(Shiflett & Yokozeki, 2009)
298.15	19.998	0.428	(Shiflett & Yokozeki, 2009)

Nota: Adaptado de (Shiflett & Yokozeki, 2009).

Tabla 8*Solubilidad [emim][EtSO₄]*

Etilsulfato de 1-etil-3-metilimidazolio - [emim][EtSO ₄]			
Temperatura [K]	Presión [bar]	X _{CO₂ in RTIL} [mol/mol]	Fuente
298.15	0.5	0.006	(Moya et al., 2017)
298.15	1	0.013	(Moya et al., 2017)
298.15	2	0.023	(Moya et al., 2017)
298.15	3	0.034	(Moya et al., 2017)
298.15	5	0.054	(Moya et al., 2017)
298.15	7	0.071	(Moya et al., 2017)
298.15	10	0.099	(Moya et al., 2017)
298.15	15	0.149	(Moya et al., 2017)
298.15	20	0.192	(Moya et al., 2017)

Nota: Adaptado de (Moya et al., 2017)

Tabla 9*Solubilidad [emim][Tf₂N]*

Bisdifluorometilsulfonimida de 1-etil-3-metilimidazolio – [emim][Tf ₂ N]			
Temperatura [K]	Presión [bar]	X _{CO₂ in RTIL} [mol/mol]	Fuente
298.15	0.5	0.006	(Moya et al., 2017)
298.15	1	0.013	(Moya et al., 2017)
298.15	2	0.023	(Moya et al., 2017)
298.15	3	0.034	(Moya et al., 2017)
298.15	5	0.054	(Moya et al., 2017)
298.15	7	0.071	(Moya et al., 2017)
298.15	10	0.099	(Moya et al., 2017)
298.15	15	0.149	(Moya et al., 2017)
298.15	20	0.192	(Moya et al., 2017)

Nota: Adaptado de (Moya et al., 2017).

Tabla 10*Solubilidad [emim][TFA]*

Trifluoroacetato de 1-etil-3-metilimidazolio – [emim][TFA]			
Temperatura [K]	Presión [bar]	X _{CO₂ in RTIL} [mol/mol]	Fuente
298.15	0.100	0.001	(Yokozeki et al., 2008)
298.15	0.498	0.009	(Yokozeki et al., 2008)
298.15	0.998	0.018	(Yokozeki et al., 2008)
298.15	3.999	0.068	(Yokozeki et al., 2008)
298.15	6.997	0.115	(Yokozeki et al., 2008)
298.15	9.999	0.160	(Yokozeki et al., 2008)
298.15	12.997	0.201	(Yokozeki et al., 2008)
298.15	14.998	0.226	(Yokozeki et al., 2008)
298.15	19.996	0.282	(Yokozeki et al., 2008)

Nota: Adaptado de (Yokozeki et al., 2008)

Tabla 11*Solubilidad [hmim][Tf₂N]*

Bisdifluorometilsulfonimida de 1-hexil-1-metilpirrolidinio – [hmim][Tf ₂ N]			
Temperatura [K]	Presión [bar]	X _{CO₂ in RTIL} [mol/mol]	Fuente
298.15	13.15	0.2706	(Aki et al., 2004)
298.15	20.00	0.433	(Marcus, 2016)
298.15	21.95	0.4354	(Aki et al., 2004)
298.15	31.88	0.5446	(Aki et al., 2004)
298.15	42.34	0.6282	(Aki et al., 2004)
298.15	51.56	0.6889	(Aki et al., 2004)
298.15	60.91	0.7396	(Aki et al., 2004)

Nota: Adaptado de (Aki et al., 2004) y (Marcus, 2016).

Tabla 12*Solubilidad [omim][PF₆]*

Hexafluorofosfato de 1-octil-3-metilimidazolio – [omim][PF ₆]			
Temperatura [K]	Presión [bar]	X _{CO₂ in RTIL} [mol/mol]	Fuente
298.15	0.5	0.013	(Moya et al., 2017)
298.15	1	0.026	(Moya et al., 2017)
298.15	2	0.045	(Moya et al., 2017)
298.15	3	0.065	(Moya et al., 2017)
298.15	5	0.103	(Moya et al., 2017)
298.15	7	0.141	(Moya et al., 2017)
298.15	10	0.192	(Moya et al., 2017)
298.15	15	0.265	(Moya et al., 2017)
298.15	20	0.320	(Moya et al., 2017)

Nota: Adaptado de (Moya et al., 2017)

Tabla 13*Precios Líquidos Iónicos.*

Líquido Iónico	Fuente	Pureza	Cantidad [g]	Precio
[bmim][BF ₄]	abcr ^a	99%	1000	€ 761.6
[bmim][PF ₆]	abcr ^a	99%	1000	€ 863.1
[bmim][PF ₆]	abcr ^a	99.5%	1000	€ 1,259.0
[bmim][Ac]	abcr ^a	98%	1000	€ 1,098.0
[bmim][Tf ₂ N]	IoLiTec ^b	99.5%	1000	€ 1,876.0
[hmim][Tf ₂ N]	IoLiTec ^b	99.5%	1000	€ 1,840.0
[bpy][BF ₄]	P212121 ^c	99%	1000	€ 1,736.37

Nota: ^a(abcr. Gute Chemie, s. f.). ^b(IoLiTec, s. f.). ^c(P212121, s. f.). En IoLiTec se realizó cotización.

Tabla 14*Precios Líquido-Iónicos.*

Líquido Iónico	Fuente	Pureza	Cantidad [g]	Precio
[bmim][BF ₄]	abcr	99%	25	€ 78.7
[bmim][BF ₄]	abcr	99%	100	€ 130.9
[bmim][BF ₄]	abcr	99%	250	€ 255.6
[bmim][BF ₄]	abcr	99%	1000	€ 761.6
[bmim][PF ₆]	abcr	99%	25	€ 84.5
[bmim][PF ₆]	abcr	99%	100	€ 143.9
[bmim][PF ₆]	abcr	99%	250	€ 287.5
[bmim][PF ₆]	abcr	99%	1000	€ 863.1
[bmim][Ac]	abcr	98%	100	€ 339.7
[bmim][Ac]	abcr	98%	250	€ 444.0
[bmim][Ac]	abcr	98%	1000	€ 1,098.0
[bmim][Tf ₂ N]	abcr	99%	25	€ 129.4
[bmim][Tf ₂ N]	abcr	99%	100	€ 255.6
[bmim][Tf ₂ N]	abcr	99%	250	€ 512.2
[hmim][Tf ₂ N]	abcr	99.5%	10	€ 269.2
[hmim][Tf ₂ N]	abcr	99.5%	50	€ 394.2
[hmim][Tf ₂ N]	abcr	99.5%	250	€ 985.6
[bpy][BF ₄]	abcr	99%	25	€ 238.2
[bpy][BF ₄]	abcr	99%	100	€ 400.6
[bpy][BF ₄]	abcr	99%	250	€ 809.4

Nota: Adaptado de (abcr. Gute Chemie, s. f.)

Apéndice E. Propiedades termodinámicas de [bmim][BF₄]

Se llevaron a cabo estimaciones de propiedades termodinámicas para caracterizar el comportamiento del líquido iónico dentro del simulador los cuales son necesarios para el modelo *Non-Random Two-liquid* o NRTL. Este proceso requirió una revisión de la literatura científica, de la cual se extrajeron datos relacionados con propiedades escalares, propiedades críticas, propiedades dependientes de la temperatura, constantes de Henry y parámetros de interacción binaria.

Los datos recopilados se incorporaron en el simulador, creando así un nuevo componente que incluía las propiedades termodinámicas del LI seleccionado. Para garantizar la precisión del modelo, se llevó a cabo un proceso de validación en el que se compararon los resultados obtenidos a través del simulador con datos experimentales disponibles en la literatura. Se prosiguió a elaborar un catálogo de componentes de Henry dentro del simulador que abarcaba el CO₂, N₂, CH₄, C₂H₆ y C₃H₈.

Se analizan los perfiles de viscosidad, y capacidad calorífica, así como los de temperatura y concentración reportados en la simulación y a su vez estos fueron comparados con diferentes reportes de literatura. Así mismo el desempeño de la captura de CO₂ con LI fue comparado con el proceso convencional utilizando MEA.

Propiedades críticas: la temperatura normal de ebullición (T_b), la temperatura crítica (T_c), la presión crítica (P_c), el volumen crítico (V_c) y el factor acéntrico (ω).

$$T_b = 198.2 + \sum_i n_i \Delta T_{b,i} \quad (\text{Ec. 1})$$

$$T_c = \frac{T_b}{0.5703 + 1.0121 \sum_i n_i \Delta T_{c,i} - (\sum_i n_i \Delta T_{c,i})^2} \quad (\text{Ec. 2})$$

$$P_c = \frac{M}{(0.2573 + \sum_i n_i \Delta P_{c,i})^2} \quad (\text{Ec. 3})$$

$$V_c = 6.75 + \sum_i n_i \Delta V_{c,i} \quad (\text{Ec. 4})$$

$$\omega = \frac{T_b T_c}{(T_c - T_b)(0.7T_c)} \cdot \text{Log} \left(\frac{P_c}{P_b} \right) - \left(\frac{T_c}{T_c - T_b} \right) * \text{Log} \left(\frac{P_c}{P_b} \right) + \text{Log} \left(\frac{P_c}{P_b} \right) - 1 \quad (\text{Ec. 5})$$

Los Incrementos por fragmento han sido determinados en un estudio previo y se muestran los resultados obtenidos para 46 grupos contribuyentes diferentes, estos deben ser seleccionados dependiendo de la formula molecular del líquido iónico a utilizar. (Huang et al., 2013).

Propiedades dependientes de la temperatura: Presión de Vapor (P_i^S), capacidad calorífica (C_{pi}), densidad (ρ) y la viscosidad (η_i):

$$\text{Ln}(P_i^S) = C_{1,i} + \frac{C_{2,i}}{T + C_{3,i}} \quad (\text{Ec. 6})$$

$$C_{pi} = C'_{1i} + C'_{2i}T + C'_{3i}T^2 \quad (\text{Ec. 7})$$

$$\rho_i = \frac{M_i P_{ci}}{RT_{ci} [Z_i^{*,RA} (1 + d_i (1 - T_r))]^{[1+(1-T_r)^{2/7}]}} \quad (\text{Ec. 8})$$

$$\text{Ln}(\eta_i) = A_i + \frac{B_i}{T} + C_i \text{Ln}(T) \quad (\text{Ec. 9})$$

Datos de equilibrio de fase:

$$\varphi_i^V y_i \cdot P = x_i \cdot H_{iA} \cdot \left(\frac{\gamma_i}{\gamma_i^\infty} \right) \quad (\text{Ec.10})$$

$$\gamma_i^\infty = \lim_{x_i \rightarrow 0} \gamma_i \quad (\text{Ec.11})$$

Para la cual es necesario determinar parámetros como lo son la constante de Henry (H_{iA}) con ayuda de la (Ec. 12) y el coeficiente de fugacidad (φ_i^V) mediante la ecuación de Redlich-Kwong (RK) que consta de las ecuaciones (Ec. 13), (Ec. 15), (Ec. 14) y (Ec. 16) de la siguiente manera (Ma et al., 2017):

$$\ln(H_{iA}) = a_{iA} + \frac{b_{iA}}{T} + c_{iA} \ln(T) + d_{iA} T + \frac{e_{iA}}{T^2} \quad (\text{Ec. 12})$$

$$p = \frac{R \cdot T}{V - b} - \frac{a}{T^{0.5} \cdot V \cdot (V + b)} \quad (\text{Ec. 13})$$

$$a = 0.42748 \cdot \frac{R^2 \cdot T_c^{2.5}}{P_c}; \quad b = 0.08664 \cdot \frac{R \cdot T_c}{P_c} \quad (\text{Ec. 14})$$

$$Z = \frac{pV}{RT} \quad (\text{Ec. 15})$$

$$\ln(\varphi) = Z - 1 - \ln\left(Z - b \cdot \frac{p}{R \cdot T}\right) - \frac{a}{b \cdot R \cdot T^{1.5}} + \ln\left(1 + b \cdot \frac{p}{Z \cdot R \cdot T}\right) \quad (\text{Ec. 16})$$

Tabla 1

Propiedades Escalares

Propiedades Escalares			
Propiedad	Valor	Unidades	Fuente
M	226.02	g/mol	
Tb	632.3	[K]	
ΔH_f^0	-1221.8	[KJ/mol]	(Huang et al., 2014)
ΔH_C^0	-5335	[KJ/mol]	
ω	0.5276		
Tm	192.15	[°C]	

2Tabla 2

Propiedades Críticas

Propiedades Críticas			
Propiedad	Valor	Unidades	Fuente
Tc	886.1	[K]	(Huang et al., 2014)
Pc	27.4	[bar]	
Vc	655.4	[cm ³ /mol]	
Zc	0.2434		

Tabla 3

Propiedades dependientes de la Temperatura

Propiedades dependientes de la Temperatura				
Propiedad	Parámetros	Valor	Unidad	Fuente
Presión de Vapor	C _{1i}	-1,00e+20	P [=] Pa	(Huang et al., 2014)
	C _{2i}	0		
	C _{3i}	0	T [=] K	
Capacidad Calorífica molar de Líquido	C ^o _{1i}	464,88	[J/mol·K]	(Rebelo et al., 2004)
	C ^o _{2i}	-1,1755		
	C ^o _{3i}	0,002815		
Densidad	R·TC _i /PC _i	2,6888	[g/cm ³]	(Huang et al., 2014)
	Z _i [*] , RA	0,2416		
	d _i	0,004653		
Viscosidad de líquido	A _i	-71,32	[mPa·s]	(Huang et al., 2014)
	B _i	6329,89		
	C _i	8,37		
Tensión superficial de líquido	C _{1i} ^{''}	88,68	[mN/m]	(Huang et al., 2014)
	C _{2i} ^{''}	70,89		
	C _{3i} ^{''}	-279,86		
	C _{4i} ^{''}	469,54		
	C _{5i} ^{''}	-296,96		
Conductividad térmica de líquido	C _{1i} ^{'''}	0,204	[W/m·K]	(Valkenburg et al., 2005)
	C _{2i} ^{'''}	-0,0000613		
	C _{3i} ^{'''}	-		
	C _{4i} ^{'''}	-		
	C _{5i} ^{'''}	-		

Tabla 4*Parámetros de Constantes de Henry.*

Parámetros de constante de Henry CO ₂ (i) en LI (A)			
Parámetros	Valor	Unidades	Fuente
a _{iA}	32,449	P [=] Pa	(Huang et al., 2014)
b _{iA}	-10864,735		
c _{iA}	7,708	T [=] K	
d _{iA}	-0,119		

Tabla 5*Parámetros de interacción binaria NRTL.*

Parámetros de interacción binaria NRTL						
i	j	a _{ij}	a _{ji}	b _{ij}	b _{ji}	Fuente
CO ₂	[bmim][BF ₄]	6,713	-16,928	-2577,397	6048,75	(Huang et al., 2014)
H ₂ O	[bmim][BF ₄]	-0,9689	1,114	85	732	

Apéndice F. Selección de un modelo termodinámico – simulación absorción de CO₂ con LI

A diferencia del proceso de selección del modelo empleado para el caso base con MEA, los líquidos iónicos no se encuentran incorporados en la herramienta “*Methods Assistant*” de Aspen HYSYS o su sección de ayuda, por lo cual se ha recurrido a otra dinámica de selección.

(Carlson, 1996) resume algunos parámetros o criterios de importancia para la selección del modelo termodinámico y los condensa en un árbol o diagrama de decisión segmentado en tres partes. El primer criterio, como se observa en la **Figura 1** del Apéndice B, es la polaridad de los componentes, esta determina el tipo de interacción molecular que puede tener lugar entre las sustancias, si la polaridad es alta, la interacción es fuerte (Chaves et al., 2016). Debe elegirse la vía polar si al menos uno de los componentes lo es, como el H₂O, compuesto que, a diferencia del CO₂, es polar. El siguiente criterio que considerar es si la sustancia es (o se comporta) o no un electrolito. En estudios recientes (Lin et al., 2021) se ha explorado el enfoque de “disociación” en iones para el modelado termodinámico de líquidos iónicos en mezcla, no obstante, se empleará el enfoque de “no disociación” debido a las pocas y recientes investigaciones sobre el enfoque disociativo y, por tanto, la escasez de parámetros de interacción necesarios y la necesidad de realizar más investigaciones que permitan validar y/o contrastar un modelo termodinámico fundamentado en dicho enfoque, junto con sus resultados. Cabe resaltar que el enfoque de “no disociación” ha mostrado producir resultados razonables y consistentes con datos experimentales. Para el criterio de la presión del sistema se debe considerar que el proceso tiene etapas a diferentes presiones, la torre de absorción opera a 68,60 bar y de regeneración a 1,8 bar, para lo cual se adopta la integración de modelos de actividad con ecuaciones de estado abordado en (Chaves et al., 2016), en donde explica que es posible realizar un cálculo acoplado aprovechando los enfoques de las ecuaciones de estado para la fase gaseosa y los modelos de coeficientes de actividad para la fase

líquida, dado que cada uno de estos métodos ofrece ventajas específicas, como el rango de operación y representación de la no idealidad de sus respectivas fases. Por último, se dispone de parámetros de interacción binaria (NRTL y Henry), no hay doble fase líquida y tampoco asociación en la fase vapor, por tanto, el modelo de propiedades termodinámicas seleccionado es el NRTL-RK. (NRTL para la fase líquida y Redlich-Kwong para la fase gaseosa).

En esta etapa adicional, se ha tenido en cuenta la naturaleza del fluido empleado y se ha efectuado una comparación con los métodos empleados por el estudio de (Ma et al., 2017) y los pasos específicos seleccionados en la herramienta para simular la absorción de CO₂ mediante una mezcla acuosa de líquido iónico se presentan de manera detallada en la **Figura 2** del Apéndice B.