

**ANÁLISIS DE LA RELACIÓN ENTRE EL PKA, EL CALOR DE REACCIÓN Y
LA ABSORCIÓN DE CO₂ EN LÍQUIDOS IÓNICOS POR MEDIO DE
CÁLCULOS DE ESTRUCTURA ELECTRÓNICA**

Edgar Alberto Villan Jurado

Trabajo de Grado para optar el título de ingeniero Químico

Director

Giovanni Morales Medina

Doctor en Ingeniería Química

Universidad Industrial de Santander

Facultad de ingenierías Físicoquímicas

Escuela de Ingeniería Química

Bucaramanga

2022

Tabla de contenido

	Pág.
Lista de Tablas	3
Lista de figuras.....	4
1. Introducción.....	6
2. OBJETIVOS	7
3. MARCO TEORICO	8
3.7 Estado del arte	11
4 METODOLOGIA.....	12
Actividades	15
5 ANÁLISIS DE RESULTADOS.....	16
5.1 Líquidos Iónicos Considerados.....	16
5.2 Optimización de los LI.....	18
5.3 Reacciones de Captura de CO₂.....	18
4.4 Cálculo de las Energías de Reacción.....	20
Conclusiones	29
Recomendaciones	30
Referencias	31
Anexos.....	34

Lista de Tablas

Tabla 1 Valores de pKa en DMSO para los LI de la Figura 2.	17
Tabla 2 Calor de Reacción	20
Tabla 3 Líquidos iónicos, absorción de CO ₂ y Calor de reacción	22
Tabla 4 Distancia Carbono-Nitrógeno, en el carboxilato	26

Lista de figuras

Figura 1 Diagrama de Flujo del proceso metodología	15
Figura 2 Líquidos iónicos y iones	17
Figura 3 Reacciones de quimisorción de CO ₂ con los LI considerados en el presente trabajo. Estructuras optimizadas al nivel B3LYP/6-31++G(d,p) en GAMESS y visualizadas en Avogadro	19
Figura 4 Cantidad de CO ₂ absorbido, calor de reacción y valor de pKa	24
Figura 5 Cantidad de CO ₂ absorbido, calor de reacción y valor de pKa de los líquidos dados por fisisorción	25
Figura 6 Distancia de enlace contra el Calor de reacción	26
Figura 7 Distancia de enlace contra capacidad de captura de CO ₂	27

1. Resumen

Encontrar métodos para controlar la contaminación causada por el uso de combustibles fósiles, los medios de transporte, industria y demás, se ha convertido en una búsqueda constante para controlar las emisiones CO₂, principal causante del cambio climático y enfermedades respiratorias. Por tal motivo los líquidos iónicos parecen ser la solución y se les está presentando más atención en los últimos años, ya que estos son buenos disolventes para la captura de dióxido de carbono. Hoy en día se tiene una gran variedad de líquidos iónicos que tiene propiedades específicas debido a su configuración y distribución atómica. En el presente trabajo se tienen en cuenta varios, muy usados por la comunidad para el mismo estudio, en donde se aborda por medio de la simulación la información necesaria para generar puntos de partida y encontrar relaciones entre la captura de CO₂ y demás datos, todo esto basado en la energía, la geometría y las frecuencias entre el líquido iónico, el ion y por último el dióxido. Se presenta de manera detallada los resultados obtenidos de manera gráfica y tabulados con el fin de obtener puntos de partida para el análisis y observación de la coherencia de los resultados para así concluir con la investigación.

2. Abstract

Finding methods to control pollution caused using fossil fuels, transportation, industry and others, has become a constant search to control CO₂ emissions, the main cause of climate change and respiratory diseases. For this reason, ionic liquids seem to be the solution and more attention is being paid to them in recent years, since they are good solvents for carbon dioxide capture. Nowadays there is a great variety of ionic liquids that have specific properties due to their configuration and atomic distribution. This work considers several, widely used by the community for the same study, where it is addressed through simulation the necessary information to generate starting points and find relationships between CO₂ capture and other data, all based on the energy, geometry and frequencies between the ionic liquid, the ion and finally the dioxide. The results obtained are presented in detail in graphical and tabulated form to obtain starting points for the analysis and observation of the coherence of the results in order to conclude the research.

3. Introducción

La revolución de la tecnología que se genera hoy en día permite que cada vez se investigue más sobre cómo poder mejorar los procesos para la limpieza ya sea del ambiente o de las fuentes fluviales, este es el caso de líquidos iónicos que son mundialmente conocidos debido a sus múltiples propiedades como su bajo punto de fusión de ser térmicamente muy estables, poco volátiles, conductividad iónica entre otras más, que han sido los detonantes para que sean investigados por la comunidad científica, químicos y demás relacionados al área (Wang M. P., 2019). Además, sumado que tienen un rol muy importante en las reacciones orgánicas y también como solventes (Wasserscheid, 2008), la excelente solubilidad de los líquidos iónicos con el CO₂ permite que sean candidatos para la absorción del mismo, sobre todo el que se encuentra en la atmósfera, como una respuesta a la contaminación y quema derivada del petróleo que afecta océanos, su fauna y flora tan importantes como los corales (Cohen, 2011). Los estudios de este tema se han vuelto muy importantes y se presentan una gran cantidad de investigaciones sobre los líquidos iónicos y aplicaciones, solo para el 2001 se presentó el primer caso de absorción química, el cual mostró una captura por cada mol de líquido iónico, la captura de la mitad de CO₂, es decir ½ mol CO₂/mol IL, todo esto fue realizado a presión ambiente (Eleanor D. Bates, 2001); para este caso, el estudio de una revisión bibliográfica donde es realizada por medio de simuladores para

analizar tanto la geometría como la energía de las moléculas y a su vez obtener una vista de estos líquidos iónicos como absorbentes de CO₂. Una de las particularidades de los líquidos iónicos es que estos tienen variaciones sin fin de su estructura, esta gran particularidad hace que la investigación sea amplia pero también la capacidad para descubrir y encontrar una molécula sin presedentes para la captura de CO₂; se conocen ya varios líquidos iónicos con una buena quimisorción (Wang *. L.-e., 2011) que son candidatos muy prometedores.

El presente documento analizó la relación entre las propiedades pKa en DMSO, calor de quimisorción y absorción de CO₂ de diferentes líquidos iónicos. El análisis fue encaminado en la búsqueda de las características que definen una absorción de CO₂ por medio del mecanismo de quimisorción. Con esto se espera contribuir con el tema de la definición de una estructura de líquido iónico con mayor eficiencia en la captura de CO₂.

4. Objetivos

2.1 Objetivo general

- Determinar la relación entre el pKa, el calor de reacción y la captura de CO₂ con diferentes líquidos iónicos, mediante cálculos de estructura electrónica al nivel B3LYP/6-31++G(d,p).

2.2 Objetivos específicos

- Definir estructuras de líquidos iónicos que conducen a la captura de CO₂ por quimisorción y fisorción, mediante revisión de reportes de literatura abierta.
- Determinar la energía de diferentes estructuras optimizadas de líquidos iónicos y la energía de quimisorción de CO₂, mediante la aplicación de cálculos de estructura electrónica al nivel B3LYP/6-31++G(d,p).
- Establecer una relación entre los calores de quimisorción calculados, los valores reportados de pKa y las capacidades de absorción de CO₂ para los líquidos iónicos analizados.

5. Marco teórico

4.1 Líquidos Iónicos.

Los líquidos iónicos (Lis) se definen como compuestos que están conformados por iones, de carga opuesta y además cuyo punto de fusión se encuentra por debajo de los 100 °C (Seddon, 1997). La mayoría de estos líquidos se encuentran a temperatura ambiente en estado líquido. Su reducida presión de vapor (poco volátiles), su alta estabilidad térmica (Borja, 2015) y química, además de su alta capacidad disolvente, los hace ser considerados la nueva generación de disolventes (Earle, 2000).

4.2 Captura de CO₂ con Líquidos Iónicos.

La absorción o captura de CO₂ con líquidos iónicos puede ser realizada por medio de fisisorción y/o quimisorción. La fisisorción es el medio en el que se adhiere, ya sea un elemento o compuesto, en una superficie en donde se conserva la naturaleza de la sustancia absorbida (Cussler, 1997). Algunos de los líquidos iónicos que capturan CO₂ por fisisorción son el [Bmim][Cl], [Dmim][Cl], [Emim][Cl]. (Zeng 2017). De otro lado, la quimisorción hace referencia a la

interacción y formación de enlaces que se generan entre las moléculas del absorbente sobre la sustancia que se desea absorber (absorbato). Algunos líquidos iónicos reportados para la quimisorción de CO₂ son [Na][Pyr], [Na][Im], [Na][Triz], [Na][Tetz], [Na][Oxa], [Na][Ind], [Na][Bentriz] (Eleanor D. Bates 2001) (Cui 2016) (Eleanor D. Bates 2001) (Noamaan 2014) (Sowmiah, 2009) (Ren 2013). El mecanismo y la magnitud de captura de CO₂ varían dependiendo de las propiedades del catión y anión que conforman el líquido iónico.

4.3 Energía de quimisorción.

La energía de quimisorción corresponde a la energía liberada durante un proceso quimisorción, en el cual sustancias en diferentes fases experimentan una interacción enlazante, conduciendo a la incorporación de una de las sustancias en el seno de la otra (Gonzales, 2019). La energía de quimisorción está relacionada con la captura de CO₂. Según, Wang *. L.-e., 2011, la captura de CO₂ sigue un patrón que considera el líquido iónico y el correspondiente valor de pKa. Este patrón permitiría la predicción del desempeño de los líquidos iónicos en la captura de CO₂.

3.5 pKa

El término de pKa se define como la capacidad medible del valor de la acidez de una molécula por medio de un logaritmo negativo. Esto se logra mediante la constante de disociación ácida (Ka), es decir se considera al pKa un valor que reverbera la manera en que las moléculas en solución se disocian. La medida de los valores se realiza en DMSO, el cual es el solvente usado para medir el pKa para sustancias apróticas, es decir que no donan hidrógenos (Silverstein, 2020)

3.6 Teoría de los Funcionales de la Densidad Electrónica

La teoría de los funcionales de la densidad electrónica, o DFT como se le conoce por sus siglas en Inglés, brinda una solución alternativa a la ecuación de Schrödinger. La DFT se basa en trabajos anteriores expresados en (Dirac 1930), en el que se demostró que por medio de la densidad de carga se puede hallar la energía que ocurre por medio del intercambio de electrones, este tipo de enfoques es directo, es decir por medio de las ecuaciones es complicado obtener una aproximación decente.

La DFT puede ser efectuado considerando el funcional B3LYP (Alcalde, 2018), el cual es frecuentemente utilizado para el cálculo de energías de atomización, potenciales de ionización, afinidades de protones y energías atómicas totales. El funcional B3LYP (Alcalde, 2018) es una aproximación a la energía de intercambio funcional en DFT (Becke, 1993) (MIEHLICH, 1989).

Por su parte, las bases utilizadas definen el uso de funciones tipo Gaussianas. Los números 6-31 manifiestan que un conjunto de 6 (Institut, 2006) Gaussianas de segundo orden son utilizadas para la función de onda de los electrones del *core*, mientras que el 3 y 1 representan el número de Gaussianas que componen la función de onda de los electrones de valencia (Hanson). Por otra parte, los símbolos ++ en las bases manifiestan la adición de funciones Gaussianas para los átomos pesados (Clark, 1983). De igual manera, el término (d,p) corresponde a la adición de funciones difusas en átomos pesados (Clark, 1983).

Los procedimientos de solución con la DFT y el funcional B3LYP se encuentran codificados en programas de cálculo de estructura electrónica tales como GAMESS, el cual es un software de uso libre, utilizado en estimaciones generales de química computacional.

3.7 Estado del arte

Wang *et al.* (2011) analizaron la relación entre la entalpía de absorción del CO₂ y la basicidad de líquido iónicos. Los cuales son preparados y neutralizados a través de un donante débil de protones con diferente valor de Pka, se presentan la comparativa de la cantidad de CO₂ absorbidos versus el valor de Pka por tal motivo este artículo soporta lo como la entalpía de reacción es base para el proceso de la elaboración del proyecto y además se obtienen datos y soluciones para la escogencia de Líquidos iónicos al momento de generar la absorción de CO₂ todo eso a un nivel de B3LYP/6-31++G(d,p) (Alcalde, 2018), llevando a cabo una investigación más a fondo de las propiedades de los líquidos iónicos hecha por Cristian Moya Álamo de la Universidad Autónoma de Madrid, Facultad de ciencias publicado en el 2017 como tesis de doctorado en el que se muestra las propiedades de los líquidos iónicos, las aplicaciones que estos tienen, además de su proceso en la captura de CO₂, tanto la captura física como química y el comportamiento cuando se unen líquidos iónicos con aminas, líquidos iónicos basados en acetatos y los líquidos iónicos heterocíclicos apróticos (AHA).

Líquidos iónicos encapsulados, su función, síntesis y la capacidad de heterocíclicos apróticos (AHA).

Líquidos iónicos encapsulados, su función, síntesis y la capacidad de estos al momento de la absorción. Se presenta un modelo experimental por medio de ENIL (Líquidos iónicos encapsulados), se genera un análisis elemental, preparación de las sustancias y posterior realización de la experimentación. Todo esto da como punto de partida ya que se tienen aplicaciones muy viables para el motivo de la investigación, como lo son los AHA y ENIL que son más viables aun para la absorción de CO₂, además que muestra gráficamente la relación de absorción del gas respecto al tiempo. Presenta la absorción química por medio de líquidos iónicos

por medio de aniones heterocíclicos, además de esto el estudio de la estructura molecular por medio de COSMO en el cual se generan los cálculos químico-cuánticos para obtener la distribución de carga superficial. Todos estos estudios que se vuelven recientes cada vez son más relevantes como lo es el publicado en el año 2020 por Cristian Moya* et al. En el artículo Prediction of CO₂ chemical absorption isotherms for ionic liquid design by DFT/COSMO-RS calculations, este fue publicado en Chemical Engineering Department, Universidad Autónoma de Madrid en donde se realiza una aproximación computacional para predecir la absorción química de forma isotérmica de CO₂ en AHA-ILs. Se usa DFT y COSMO-RS, que son simuladores de procesos químicos y moleculares, se hace un modelamiento de absorción física usando las constantes de la ley de Henry, mientras que para la absorción química. En donde se soporta el modelamiento de quimisorción del CO₂ por medio de la ley de Henry. Presenta también la comparación del modelamiento mediante COSMO y los datos obtenidos por experimentación y bibliografía en donde se observa que la aproximación se ajusta de manera muy cercana a los valores reales dando así una prueba de la simulación de la captura de CO₂ como método aproximado para la obtener datos del proceso.

Por medio de la revisión bibliográfica hecha anteriormente es posible obtener información para la selección de los líquidos iónicos a trabajar, además de los datos necesarios para la simulación. Para este caso se busca obtener la energía, la geometría optimizada y las frecuencias de las moléculas en las cuales ocurre la captura de CO₂, todo esto con el fin de observar si existen patrones que puedan llevarnos a obtener una relación entre los datos.

4 METODOLOGIA

A continuación, se describe cada una de las actividades a realizar para el avance de cada objetivo:

Actividad 1. Revisión de literatura: la revisión de literatura fue orientada a las especificaciones estructurales de líquidos iónicos utilizados en la quimisorción o captura química de CO_2 .

Actividad 2. Proposición de reacciones de quimisorción de CO_2 : las reacciones de captura de CO_2 con los líquidos iónicos definidos en la actividad anterior fueron propuestas, con base en los reportes de literatura.

Actividad 3. Optimización de la estructura y cálculo de frecuencias: Las estructuras estables de las reacciones de quimisorción de la actividad anterior fueron optimizadas, a través de software GAMESS. El nivel B3LYP/6-31++G(d, p) (Alcalde, 2018) fue utilizado en la optimización geométrica y en el cálculo de frecuencias.

Actividad 4. Cálculo del calor de reacción. Los calores de reacción para la captura de CO_2 , con el respectivo líquido iónico fueron determinados por medio de la ecuación (1) (fontan, 2005).

$$\Delta Q = (\sum E_{\text{productos}} - \sum E_{\text{reactivos}}) + \Delta ZPE + \Delta H \quad (\text{Ec. 1})$$

Donde, ΔQ es el calor de reacción kcal/mol, $E_{\text{productos}}$, $E_{\text{reactivos}}$ son la energía en kcal/mol de los productos y los reactivos calculados a nivel B3LYP/6-31++G(d,p). ΔZPE y ΔH son el cambio en la energía del punto cero y el cambio en la entalpía o corrección térmica (de 0 a 298 K), respectivamente, en el paso de reactivos a productos.

Actividad 6. Recopilación: Una vez se obtienen los datos del simulador y de la literatura, se hace una recopilación de los datos para organizarlos y así poder generar un análisis, además, compararlos con el fin de disminuir el error y hacer una aproximación mucho mayor, es decir, se busca que los datos sean los más correctos y precisos posibles.

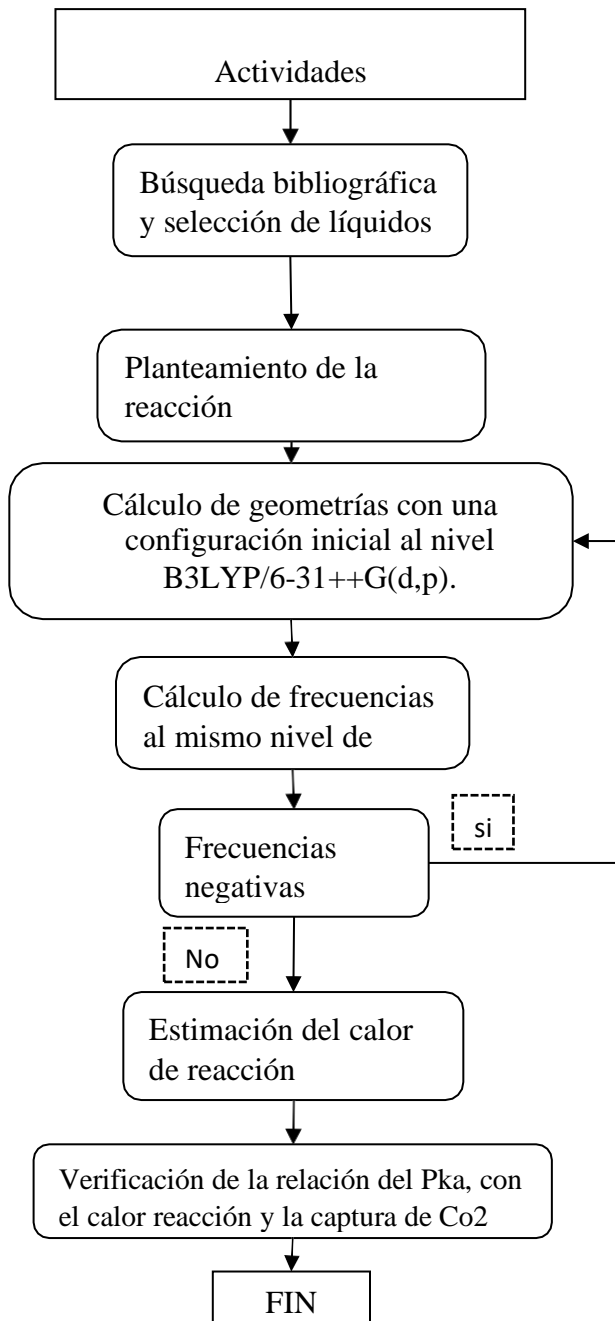
En el trabajo, el mecanismo no fue considerado, ya que los cálculos fueron dirigidos a determinar el calor de la reacción de captura de CO₂.

Actividad 7. Interpretación: Cuando ya se ha hecho la recopilación, se procede a encontrar la relación entre la entalpia de absorción y la cantidad de CO₂ absorbido, mediante los cálculos moleculares y datos obtenidos por el simulador junto a la literatura.

Actividad 8. Conclusión: Una vez encontrada la relación de la absorción de CO₂ en líquidos iónicos respecto a la entalpia de reacción, se concluye el proceso y se presenta el informe de todo lo anteriormente hecho

Figura 1

Diagrama de Flujo del proceso metodología



5 ANÁLISIS DE RESULTADOS

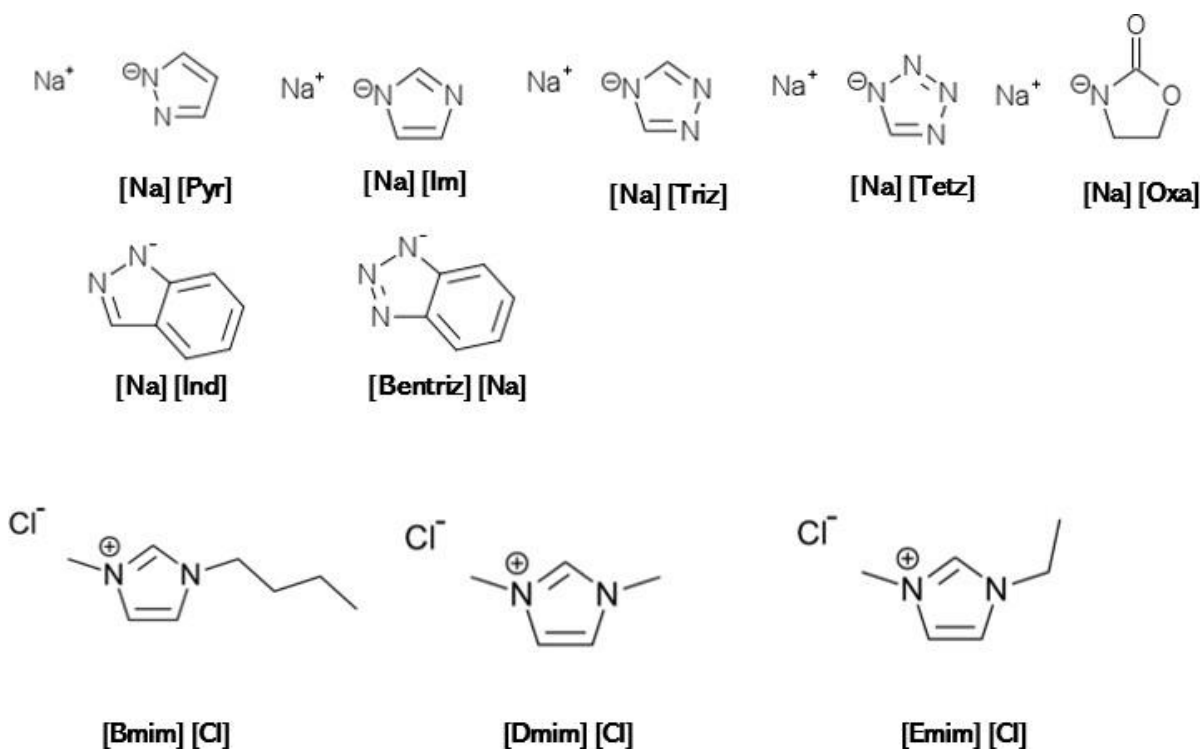
5.1 Líquidos Iónicos Considerados.

Las estructuras de los líquidos iónicos (LI) considerados en el presente documento son presentadas en la Figura 2. En esta figura, [Na][Pyr] corresponde al pirazol de sodio, [Na][im] al imidazol de sodio, [Na][Triz] al 1,2,4-triazol de sodio, [Na][Tetz] al tetrazol de sodio, [Na][Oxa] al Oxazol de sodio, [Ind][Na] al indol de sodio, [Bentriz][Na] al bentrizole de sodio, [Bmim][Cl] al cloruro de 1-butl-3-metilimidazolio, [Dmim][Cl] al cloruro de 1,3-dimetilimidazolio y [Emim][Cl] al cloruro de 1-etil-3-metilimidazolio. A partir de la literatura consultada (Wang *. L.-e., 2011), la mayoría de los LI anteriores tienen el potencial de experimentar reacción con el CO₂, con lo cual capturan esta molécula, por medio de quimisorción. Los LI tipo imidazolio, [Bmim][Cl], [Dmim][Cl] y [Emim][Cl] (Figura 2) exhiben captura de CO₂ por fisisorción (Wang M. H., 2015) (Enslow1, 2012) (Alcalde, 2018) estos LI fueron considerados para realizar una comparación con los LI que capturan por quimisorción.

Es importante mencionar que los LI seleccionados cubren un amplio rango de pKa en DMSO. La Tabla 1 presenta los valores de pKa reportados en la literatura para los diferentes LI de la Figura 2. Según la Tabla 1, los LI con iones Cl⁻ presentan valores altos de pKa, mientras que los LI con cationes Na⁺ presentan valores menores de pKa. Para el caso de LI con el anión cloro se presenta un rango de [8.2, 22] (Mao, 2005) (Wang M. P., 2019) (Wasserscheid, 2008), mientras que para los LI con el catión sodio se tiene un rango de [4.2,19.8] (MIEHLICH, 1989) (Catalan, 1984) (Spivey, Diazoles & diazines: properties, syntheses & reactivity).

Figura 2

Líquidos iónicos y iones

**Tabla 1**

Valores de pKa en DMSO para los LI de la Figura 2.

IL	Pka
[Na][Pyr]	19.8 (Spivey, 2012)
[Na][Im]	18.6 (Spivey, 2012)
[Na][Triz]	13.9 (Märt Lökov, 2017)
[Na][Tetz]	8.2 (nnberg, 2004)
[Na][Oxa]	12.5 (Catalan, 1984)
[Na][Ind]	17.8 (Catalan, 1984)
[Na][Bentriz]	11.9 (Wang *. L.-e., 2011)
[Bmim][Cl]	22 (Sowmiah, 2009)
[Dmim][Cl]	21,1 (Zhao, 2012)
[Emim][Cl]	15,4 (Enslow1, 2012)

5.2 Optimización de los LI

Como fue especificado en la Metodología, la optimización de la geometría fue efectuada al nivel B3LYP/6-31++G(d,p), por medio de los códigos de GAMESS. Las coordenadas de las moléculas optimizadas son mostradas en la Tabla 2a del Anexo. Según las coordenadas optimizadas, la distancia entre el anión y el catión en los diversos LI concuerda con los diferentes reportes de literatura (LLAMAS-SAIZ, 1994) (Sadlej, 1992) (Azhary*, 1997) (Zhou, 2008) (Wang M. H., 2015); *e.g.* para el caso del pirazol de sodio, [Na][Pyr], la distancia entre los iones corresponde a de 1.332 Å, concordando con (LLAMAS-SAIZ, 1994). Por otro lado, las geometrías de las moléculas de LI optimizadas reportaron valores de frecuencias vibracionales positivas, lo cual manifiesta que las estructuras obtenidas corresponden a compuestos estables. La lista completa de las frecuencias vibracionales es presentada en los Anexos (Tabla 3a)

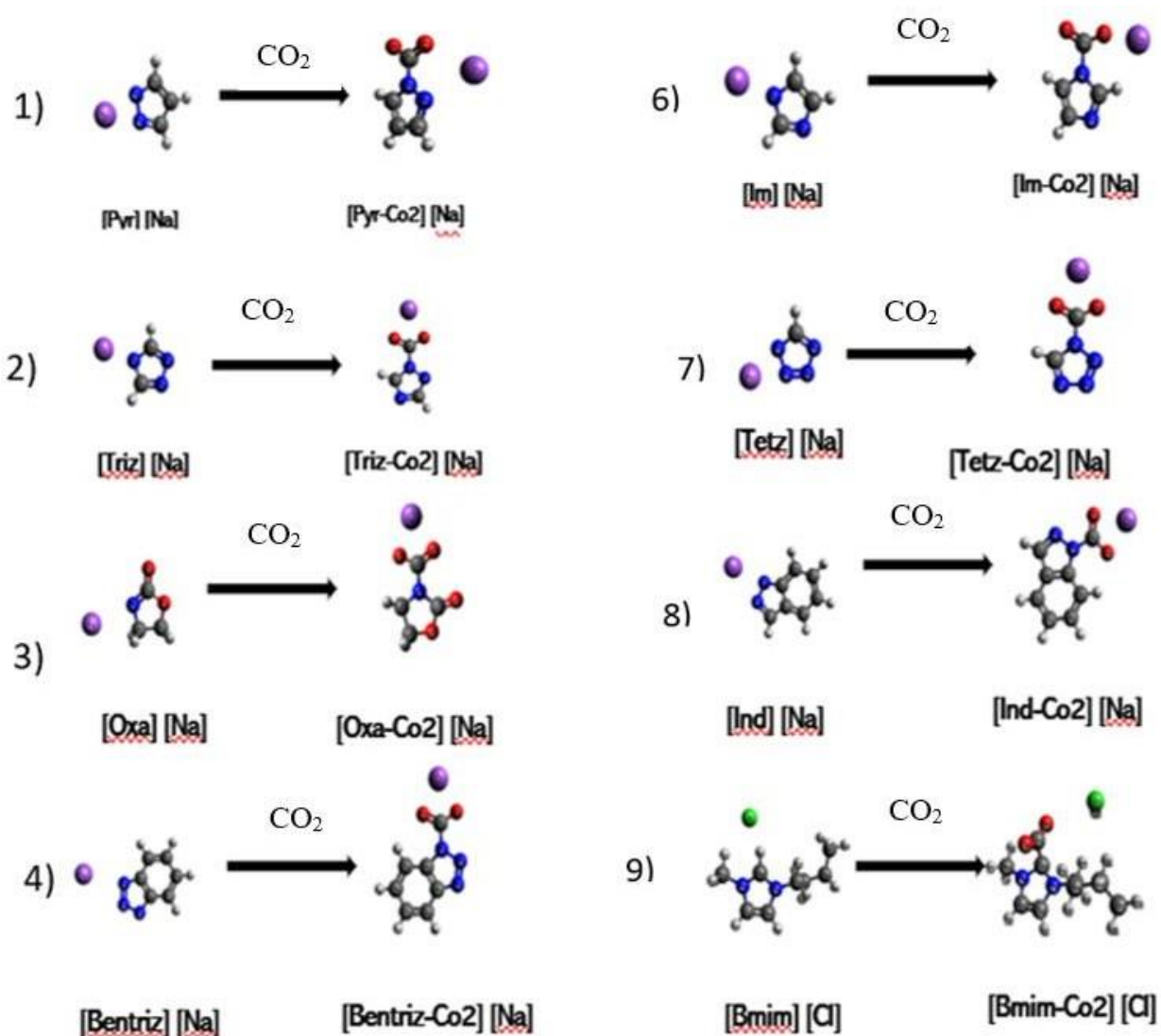
5.3 Reacciones de Captura de CO_2

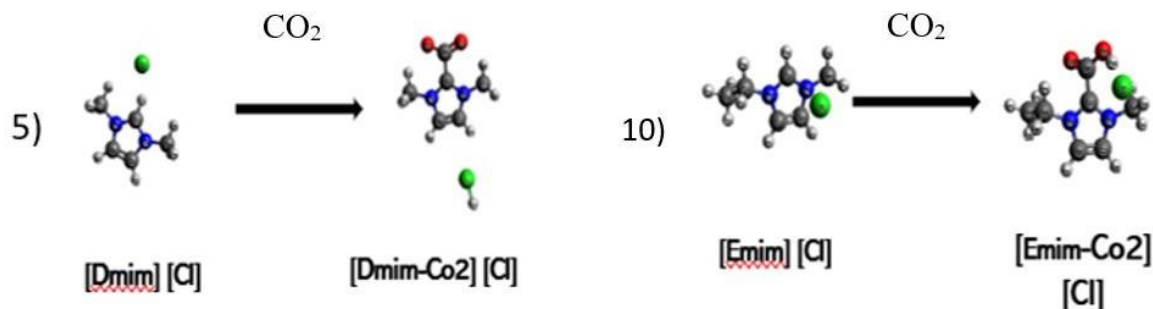
Las reacciones globales de captura de CO_2 de cada LI considerado en el presente documento son planteadas en la Figura 3; estas reacciones fueron planteadas considerando las referencias (Borja, 2015) (Earle, 2000) (Wang *. L.-e., 2011) (Mao, 2005). Las reacciones para los LI con Cl fueron supuestas por comparación de resultados. En las reacciones, la adición del CO_2 se efectúa sobre la carga negativa del anión o del catión del respectivo LI. Los LI sódicos capturan el CO_2 con la parte nucleofílica del anión respectivo, mientras que los LI de cloro realizan la captura con la parte nucleofílica del catión correspondiente; la parte nucleofílica del catión del LI de cloro es formado, mediante el desprendimiento de hidrógeno. Con lo anterior, la formación del carboxilato en los LI [Na][Pyr], [Na][Im], [Na][Triz], [Na][Tetz], [Na][Oxa], [Na][Ind] y [Na][Bentriz] es efectuada por la unión del CO_2 con el anión, mientras que en los LI [Bmim][Cl],

[Emim][Cl] y [Dmim][Cl] la formación del carboxilato es efectuada por la unión del CO_2 con el catión. La Figura 3 ilustra el respectivo carboxilato, según el LI de partida.

Figura 3

Reacciones de quimisorción de CO_2 con los LI considerados en el presente trabajo. Estructuras optimizadas al nivel B3LYP/6-31++G(d,p) en GAMESS y visualizadas en Avogadro





Los productos de la unión entre el anión y el CO_2 (denominados carboxilatos) fueron también optimizados al nivel B3LYP/6-31++G(d,p). La Figura 3 también presenta las estructuras estables calculadas para estos carboxilatos. Estas estructuras reportaron frecuencias vibracionales positivas; las coordenadas y las frecuencias vibracionales para los carboxilatos son presentadas en la Tabla 3a del Anexo. Las distancias de las estructuras obtenidas al nivel B3LYP/6-31++G(d) resultaron congruentes con lo reportado por la literatura para la geometría de [Na][Pyr] (LLAMAS-SAIZ, 1994), [Na][im] (J. Sadlej, A theoretical study of the vibrational spectra of imidazole and its different forms, 1992), [Triz] (Azhar*, 1997) (Boulme`ne, 2016), [Na][Tetz] (Noamaan, 2014), [Na][Ind] (Azhar, 1999), [Bmim][Cl] (Zhou, 2008), [Dmim][Cl] (Liu, 2004) [Emim][Cl] (Wang M. H., 2015) estos datos se muestran en la Tabla 2a de Anexos.

4.4 Cálculo de las Energías de Reacción

Las energías de reacción fueron calculadas por medio de la ecuación (1), presentada en la Metodología. Las energías y las frecuencias vibracionales determinadas al nivel B3LYP/6-31++G(d,p) fueron utilizadas en la ecuación (1). Los términos de la ecuación (1) son presentados en la Tabla 2.

Tabla 2

Cálculo del calor de las reacciones de la Figura 3. Resultados al nivel B3LYP/6-31++G(d,p).

LI	ΔE (Hartree)	ΔE (kcal/mol)	ΔZPE (kcal/mol)	ΔH (Kcal/mol)	ΔQ Kcal/mol
1 [Na][Pyr]	-0,008	-5,27	2,7	1,49	-1,08
2 [Na] [Im]	0,02	14,88	3,19	-0,31	17,75
3 [Na] [Triz]	-0,03	-22,40	1,52	1,20	-19,67
4 [Na] [Tetz]	0,03	18,92	2,40	0,82	22,14
5 [Na] [Oxa]	-0,05	-33,93	5,37	0,79	-27,77
6 [Na] [Ind]	0,019	12,35	2,31	0,65	15,31
7 [Na] [Bentriz]	-0,005	-3,6	2,09	-0,39	-1,95
8 [Bmim] [Cl]	0,032	20,51	1,775	1,20	23,498
9 [Dmim] [Cl]	-0,000051	-0,03	0,877	1,28	2,132
10 [Emim][Cl]	0,020	12,64	-5,21	1,03	8,46

Según la Tabla 2, los calores estimados al nivel B3LYP/6-31++G(d,p), para las reacciones 1, 3, 5, 7 presentan valores negativos, manifestando un proceso exotérmico para la captura de CO₂ con los LI [Na][Pyr], [Na][Triz], [Na][Bentriz], [Na][Oxa] y [Dmim][Cl], respectivamente. Por otra parte, la captura de CO₂ con los LI [Na][Im], [Na][Tetz], [Na][Ind], [Bmim][Cl] y [Emim][Cl] resulta de un proceso endotérmico, según el nivel B3LYP/6-31++G(d,p). Lo anterior demuestra una gran influencia de la estructura del líquido iónico en el comportamiento termodinámico que conlleva a la captura de CO₂; esto fue previamente discutido por otros autores (Gonzalez-Miquel, 2014). Los factores que conllevan a captura de tipo exotérmico y endotérmico pueden ser analizados en futuros trabajos sobre el tema.

Por su parte, la Tabla 3 presenta los valores de pKa, el calor de reacción estimado al nivel B3LYP/6-31++G(d,p) y la absorción o captura de CO₂ para cada LI considerado en el presente documento. Los valores de absorción o captura de CO₂ de la Tabla 3 fueron obtenidos de la literatura. Para el caso del [Emim][Cl] y [Dmim][Cl] no se encontraron datos de captura de CO₂. Sin embargo, la revisión realizada por Zeng *et al.* (2017) muestra que la solubilidad del CO₂ en LI tipo imidazoles disminuye con la reducción del tamaño de la rama alquil. Con esto, el orden de la

solubilidad del CO₂ en los imidazoles presenta la jerarquía [Bmim]>[Emim]>[Dmim], considerando el mismo anión (Zeng, 2017). Los valores bajos de captura de estos LI basados en la estructura metilimidazolio corresponden con un proceso de fisorción. Los calores de reacción de estas moléculas presentados en la Tabla 3 denotan valores en el mismo orden de magnitud, a su vez la absorción de CO₂ está en orden descendiente como fue discutido anteriormente.

Tabla 3

Líquidos iónicos, absorción de CO₂ y Calor de reacción

LI	pKa	Calor de reacción B3LYP/6-31++G(d,p), kcal/mol	Absorción de CO ₂ (mol CO ₂ /mol IL)
[Na][Pyr]	17,5	-1,08	0,95 ^a
[Na][Im]	18,5	17,75	1,03 ^a
[Na][Triz]	13,9	-19,66 (-38.1kJ/mol 338 °C) ^c	0,96 ^c (1 bar, 10 °C, 120 min)
[Na][Tetz]	8,2	22,14	0,21 ^a
[Na][Oxa]	12,5	-27,76	0,56 ^a
[Na][Ind]	17,8	15,31	0,98 ^a
[Na][Bentriz]	11,9	-1,94	0,51 ^a
[Cl] [Bmim]	22	23,498	0,043 ^b
[Cl] [Dmim]	21,1	2,1322	<0,043 ^b
[Cl] [Emim]	15,4	8,46	<0,043 ^b

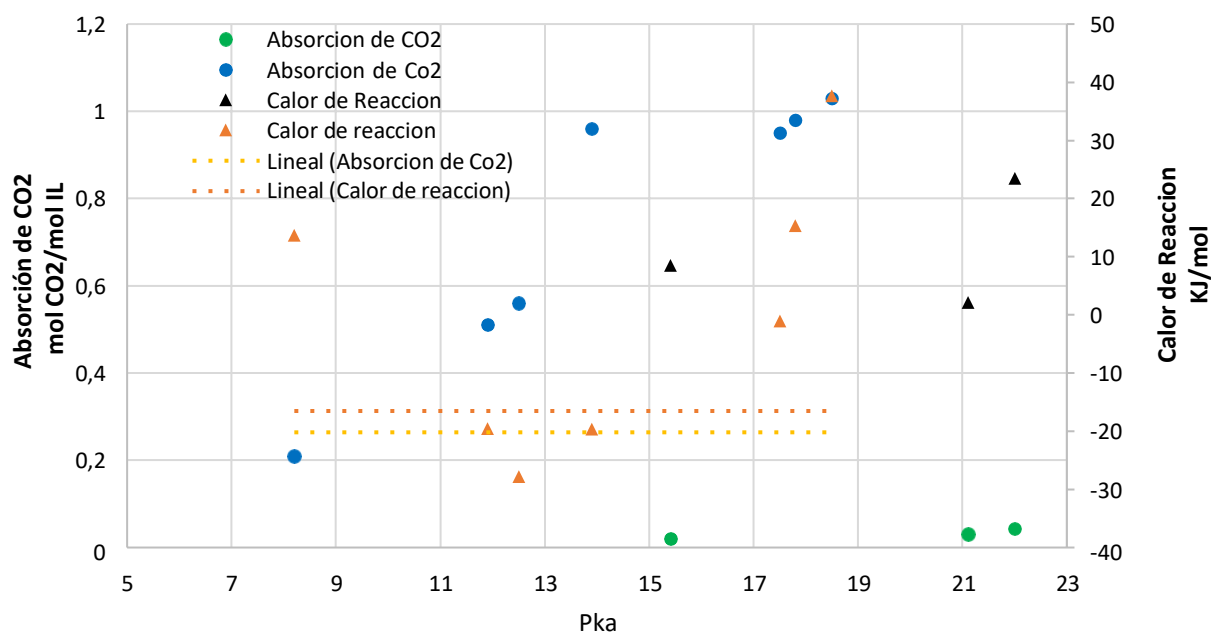
^a Interpolación figura 2 referencia (Wang *. L.-e., 2011). ^b (Ren, 2013). ^c (Cui, 2016)

La Figura 4 presenta los datos de la Tabla 3 de manera gráfica, mostrando la tendencia resultante entre la absorción de CO₂ y el calor de reacción versus el pKa, para los LI considerados en el presente documento. En esta figura, los círculos de color azul representan la absorción de CO₂ estimada para los LI sódicos, mientras que los círculos de color verde representan la absorción estimada para los cloruros de imidazolio. La localización de estos valores de absorción sugiere que la quimisorción es el mecanismo de preferencia en la captura de CO₂, utilizado por los LI que exhiben valores altos de pKa, presumiblemente valores de pKa superiores a 20;

De igual manera, la Figura 4 presenta los calores de absorción de CO₂ por los diferentes LI, estimados al nivel B3LYP/6-31++G(d,p). En esta figura, los triángulos de color naranja representan el calor de absorción para los LI sódicos, mientras que los triángulos de color negro representan la absorción estimada para los cloruros de imidazolio. Según la Figura 4, el calor de absorción de los LI sódicos muestra una tendencia creciente con el incremento en el valor de pKa; el LI [Tetz][Na] no cumple esta tendencia en el calor de absorción, por lo cual la reevaluación de su valor de pKa en DMSO es recomendada para futuros trabajos. Asimismo, el grupo de los cloruros de imidazolio presenta una tendencia creciente del valor del calor de absorción con el pKa; al igual que para la absorción de CO₂, Las tendencias crecientes para los LI sódicos y para los cloruros de imidazolio exhiben diferente pendiente; sin embargo, los valores de calor de absorción para los dos grupos de LI presentan órdenes de magnitud similares. Con esto, los valores calculados para los calores de absorción (quimisorción) no podrían ser utilizados en la explicación de una tendencia para el mecanismo de captura de CO₂, seguido por los dos grupos de LI. Por lo anterior, y con lo presentado arriba, el valor de pKa medido en DMSO aparece como el parámetro determinante en la selección del mecanismo de absorción de CO₂, seguido por los LI. Con la actual importancia en la captura de CO₂ se recomienda considerar en futuros trabajos, un mayor número de líquidos iónicos en la verificación de la anterior afirmación.

Figura 4

Gráfica de la captura de CO_2 y el calor de reacción versus el pK_a .



Por otro lado, la distancia entre los átomos en el enlace carboxilato puede indicar una relación entre el calor de reacción y el mecanismo de absorción de CO_2 . La Tabla 4 presenta los valores de las distancias de enlace entre cada LI y el CO_2 , en el respectivo carboxilato. Por su parte, las Figuras 5 y 6 muestran, respectivamente, las tendencias entre el calor de reacción y la absorción de CO_2 versus la distancia de enlace en los carboxilatos formados por los LI sódicos. Según estas figuras, tanto el calor de reacción como la absorción de CO_2 presentan tendencias sutiles con la variación de la distancia de enlace. La tendencia de la Figura 5 sugiere que el calor de absorción aumenta con la distancia del enlace LI- CO_2 en el carboxilato derivado de los LI

sódicos; sin embargo, los valores reportados por los LI [Na][Triz] y [Na][Ind] se alejan de manera significativa de la tendencia creciente. Por su parte, la tendencia de la Figura 6 sugiere que la absorción de CO₂ disminuye con la distancia del enlace LI-CO₂ en el carboxilato formado por los LI sódicos. No obstante, los puntos correspondientes a los LI [Na][Triz], [Na][Ind] y [Na][Im] presentan una desviación significativa en esta tendencia de disminución; los anteriores LI sódicos presentan una capacidad de absorción de CO₂ elevada, a pesar de reportar una distancia larga en el enlace del respectivo carboxilato. Esto puede deberse a que los anillos de heteroátomos en los anteriores LI sódicos carecen del efecto de resonancia (Teixeira, 2006). En efecto, la carboxilación del anillo aromático reporta una factibilidad baja sin el uso de catalizadores como el AlCl₃ (Cheng, 2015) lo anterior, el efecto de resonancia disminuye la capacidad de absorción de CO₂ por parte de los LI sódicos, lo cual explica la elevada absorción de los LI [Na][Triz], [Na][Ind] y [Na][Im] (carentes del efecto de resonancia en el sitio en donde el CO₂ es capturado), así como la baja absorción de los LI [Na][Bentriz] y [Na][Tetz] (poseen resonancia en el anillo que captura el CO₂). Lo anterior conlleva a la afirmación de que la carencia del efecto de resonancia es determinante en la captura de CO₂ por quimisorción, en lugar de la distancia de enlace en el respectivo carboxilato. Sin embargo, es importante mencionar que los valores de distancias de enlace fueron calculados sin considerar el efecto de la fase líquida en la estructura del carboxilato derivado del respectivo LI sódico.

Tabla 4Distancia de enlace en el carboxilato (LI-CO₂).

Carboxilato	Distancia, Å
[Na] [Pyr-CO ₂]	1,420
[Na] [Im-CO ₂]	1,443
[Na] [Triz-CO ₂]	1,441
[Na] [Tetz-CO ₂]	1,451
[Na] [Oxa-CO ₂]	1,417
[Na] [Ind-CO ₂]	1,428
[Na] [Bentriz-CO ₂]	1,438
[Bmim-CO ₂] [Cl]	1.522
[Dmim-CO ₂] [Cl]	1.488
[Emim-CO ₂] [Cl]	1.495

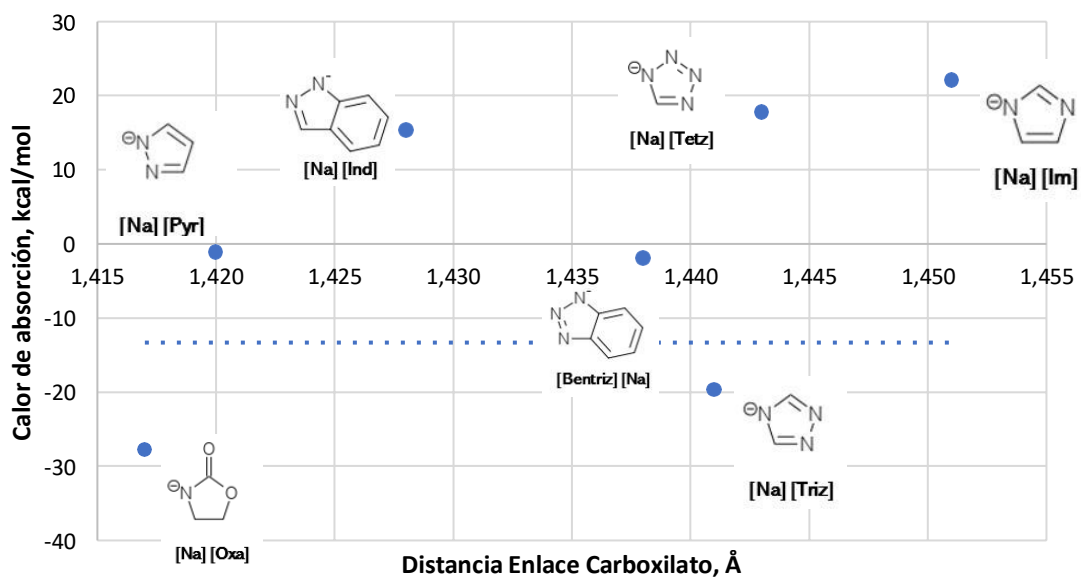
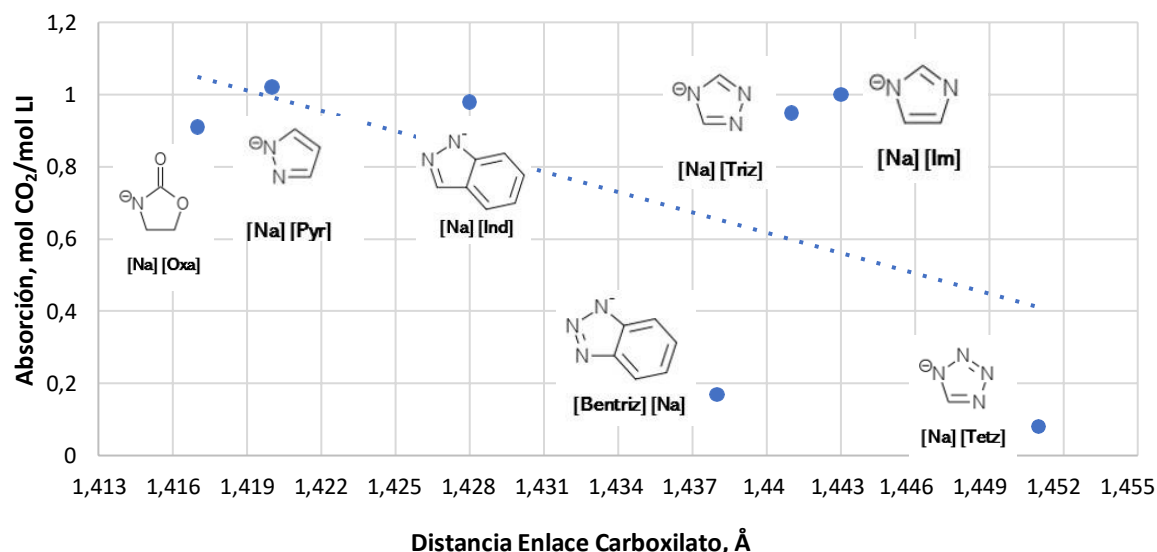
Figura 5Gráfica del calor de reacción versus distancia de enlace en el carboxilato (LI-CO₂) en los LI sódicos.

Figura 6

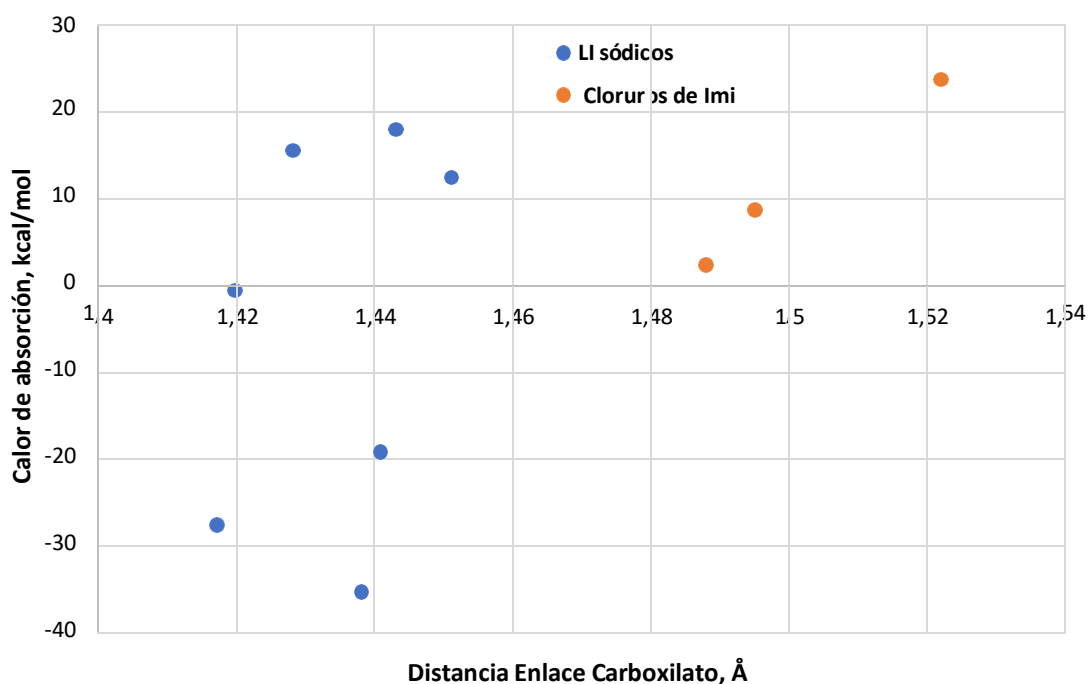
Distancia de enlace versus capacidad de captura de CO_2 por parte de los LI sódicos.



Complementariamente, la Figura 7 presenta las tendencias para los calores de reacción y la absorción de CO_2 versus la distancia de enlace LI- CO_2 en los carboxilatos para los LI sódicos y los cloruros de imidazolio. Según esta figura y la Tabla 4, las distancias en los enlaces LI- CO_2 de los carboxilatos derivados de los cloruros de imidazolio presentan distancias mayores que los respectivos enlaces de los carboxilatos derivados de los LI sódicos. Estas mayores distancias pueden explicar el hecho de que los cloruros de imidazolio reporten absorción de CO_2 , por medio del mecanismo de fisorción. Según lo anterior, para distancias de enlace LI- CO_2 superiores a 1,49 Å (predichas al nivel B3LYP/6-31++G(d,p)), la formación del carboxilato se vuelve no factible o inestable, por lo cual, el mecanismo de captura de CO_2 seguido por los respectivos LI corresponde a la fisorción. También, de la Figura 7 se sigue que, la relación entre la distancia de enlace predicha para los carboxilatos sigue una tendencia lineal con el calor de absorción para los respectivos LI de cloruro de imidazolio.

Figura 8

Distancia de enlace versus capacidad de captura de CO₂ por parte de los LI sódicos y los cloruros de imidazolio.



Resumiendo, los resultados obtenidos sugieren que la absorción de CO₂ por parte de los LI sódicos, con estructura similar a la analizada en el presente documento, dependen de los respectivos valores de pKa en DMSO y de la estructura, particularmente del efecto de resonancia en el anillo de heteroátomos. Asimismo, los resultados obtenidos de los cálculos de geometría al nivel B3LYP/6-31++G(d,p) presentan un límite superior de 1.49 Å, en la distancia de enlace LI–CO₂ en los carboxilatos para el seguimiento del mecanismo de quimisorción para la captura de CO₂. Desde luego, cálculos adicionales incluyendo mayor cantidad de LI son requeridos para la validación de los resultados derivados en el presente documento.

Conclusiones

1. Las estructuras de los líquidos iónicos asumidas en el presente documento correspondieron a los líquidos iónicos de tipo sódico y cloruros de imidazolio. Los de tipo sódico son reportados como LI que capturan CO₂ por medio de quimisorción, mientras que los cloruros de imidazolio son reportados como LI que capturan CO₂ por medio del mecanismo de fisisorción.
2. Los calores de quimisorción de CO₂ calculados para los LI al nivel B3LYP/6-31++G(d,p), mostraron una tendencia de aumento con el valor del pKa del respectivo líquido iónico.
3. Los resultados obtenidos sugieren que la absorción de CO₂ por el mecanismo de quimisorción depende de los respectivos valores de pKa en DMSO y de la estructura del LI sódico, particularmente del efecto de resonancia en el anillo de heteroátomos.
4. Los resultados obtenidos con los cálculos de geometría al nivel B3LYP/6-31++G(d,p) sugieren un límite superior de 1.49 Å, en la distancia de enlace LI–CO₂ en los carboxilatos para el mecanismo de quimisorción en la captura de CO₂. Para valores de distancias mayores de 1.49 Å, el mecanismo de captura de CO₂ seguido por el LI corresponderá al de fisisorción.

Recomendaciones

1. Los factores que conllevan a captura de tipo exotérmico y endotérmico pueden ser analizados en futuros trabajos sobre el tema
2. Comprobar de manera experimental el calor de reacción y la captura de CO₂ de los LI analizados en el presente documento.
3. Cálculos adicionales incluyendo mayor cantidad de LI son requeridos para la validación de los resultados derivados en el presente documento.
4. el [Emim][Cl] es la excepción a la tabla 3 , por lo cual la reevaluación de su valor de pKa en DMSO es recomendada para la verificación de la tendencia en el mecanismo de absorción de CO₂.
5. La inclusión del efecto de la fase líquida en los cálculos estructurales de los carboxilatos es recomendada para futuros trabajos en el tema.
6. El [Emim][Cl] sale del comportamiento esperado, por lo cual una nueva medición de su valor de pKa en DMSO es recomendada para futuros trabajos.

Referencias

(s.f.).

Álamo, C. M. (2017). *Captura de CO₂ mediante operaciones de separación basadas en líquidos iónicos*. Madrid.

Alcalde, M. A. (2018). *intermolecular forces in 1-butyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide+ethanol mixtures*. *Journal of Molecular Liquids*.

Azhary*, H. U. (1997). *Experimental and Theoretical Investigation of the Geometry and Vibrational Frequencies of 1,2,3-Triazole, 1,2,4-Triazole, and Tetrazole Anions*.

Azhary, A. (1999). *A DFT study of the geometries and vibrational spectra of indene and some of its heterocyclic analogues, benzofuran, benzoxazole, benzothiophene, benzothiazole, indole and indazole*. Cairo.

Becke, A. D. (1993). *new mixing of Hartree-Fock and local density-functional theories*". *J. Chem. Phys.*

Borja, D. C. (Enero-Junio de 2015). *Líquidos Iónicos: Métodos de Síntesis y Aplicaciones*.

Boulme`ne, M. P. (2016). *Microscopic investigations of site and functional selectivity of triazole for CO₂ capture and catalytic applications*.

Catalan, J. (1984). *Basicity of Azoles. IV Empirical Relationships between basicity and Ionization Potential For Aromatic five membered rings containing nitrogen or oxygen*. *Departamento de química y física cuántica, facultad de ciencias Instituto de química medica*.

Cheng. (2015). *Carboxylation of Aromatics by CO₂ under "Si/Al Based Frustrated Lewis Pairs" Catalytic System*. *Journal of Materials Science and Chemical*.

Clark, J. C. (1983). *Efficient diffuse function-augmented basis-sets for anion calculations 3. The 3-21+G basis set for 1st-row elements, Li-F,*".

Cohen, J. M. (2011). *Projecting Coral Reef Futures Under Global Warming and Ocean acidification*.

Cui, G. W. (2016). *Active chemisorption sites in functionalized ionic liquids for carbon capture*. .

Cussler, E. (1997). *Diffusion: Mass Transfer in Fluid Systems, 2nd ed.*

DAVID S. SHOLL, J. A. (s.f.). *DENSITY FUNCTIONAL THEORY*. A JOHN WILEY & SONS, INC.,.

Dirac, D. (1930). *Note on Exchange Phenomena in the Thomas Atom*.

Earle, M. J. (2000). "Ionic liquids. Green solvents for the future.

Earth Science Communications Team at NASA's Jet Propulsion Laboratory. (21 de noviembre de 2020). *Global Climate Change, vital signs of the planet*. Obtenido de <https://climate.nasa.gov/vital-signs/carbon-dioxide/>

Eleanor D. Bates, R. D. (2001). *CO₂ Capture by a Task-Specific Ionic Liquid*. Alabama.

- Enslow, J. A. (2012). *The Kinetics of Brønsted Acid-Catalyzed Hydrolysis of Hemicellulose Dissolved in 1-Ethyl-3-Methyl Imidazolium Chloride*. Berkeley, California: The Royal Society of Chemistry.
- fontan. (2005). *principios de la termoquímica*.
- Garriz, A. (2005). Energía, termoquímica y espontaneidad. En A. Garriz, *Manifestaciones de la materia* (pág. 695).
- Gasser, R. P. (1985). *An introduction to chemisorption and catalysis by metals*. New York: Oxford : Clarendon Press .
- Gobierno de Floridablanca. (s.f.). Obtenido de <https://www.floridablanca.gov.co/MiMunicipio/Paginas/Informacion-del-Municipio.aspx>
- Gonzales, P. (2019). *Quimisorción*.
- Gonzalez-Miquel, M. M. (2014). *Excess Enthalpy of Monoethanolamine + Ionic Liquid Mixtures: How Good are COSMO-RS Predictions?* . Journal of Physical Chemistry B,.
- Hanson, E. H. (s.f.).(2010) "*Quantum States of Atoms and Molecules*".
- Holm, T. (1983). *Enthalpy of reaction of Grignard reagents with Bronsted Acids* . Acta chemica Scandinava.
- Institut, O. C. (2006). *Introduction to basis sets*. Suiza.
- J. Sadlej, A. J. (1992). *A theoretical study of the vibrational spectra of imidazole and its different forms*.
- Kubelka, A. A.-A. (s.f.).(1998) *Experimental and Theoretical Investigation of the Geometry and Vibrational Frequencies of 1,2,3-Triazole, 1,2,4-Triazole, and Tetrazole Anions*.
- Kun Dong, †. S. (2006). *Hydrogen Bonds in Imidazolium Ionic Liquids*. Beijing.
- Liu, S. H. (2004). *A Refined Force Field for Molecular Simulation of Imidazolium-Based Ionic Liquids*. Beijing.
- LLAMAS-SAIZ. (1994). *The Geometry of Pyrazole: A Test for Ab Initio Calculations*.
- M.P. Gimeno* M.C. Mayoral, J. A. (Diciembre de 2013). Los líquidos iónicos como una alternativa a la captura de CO₂. *Boletín del Grupo Español del Carbón*, 2-5.
- Mao, †. J. (2005). *Understanding the Mechanism of CO₂ Capture by 1,3 Di-substituted Imidazolium Acetate Based Ionic Liquids*. Pittsburgh, Pennsylvania.
- Märt Lõkov, S. T. (2017). On the basicity of conjugated nitrogen heterocycles in different media. *European journal of Organic Chemistry*, 35.
- MIEHLICH, A. S. (1989). *RESULTS OBTAINED WITH THE CORRELATION ENERGY DENSITY FUNCTIONALS*.
- nnberg, E. N. (2004). Mechanisms of the substitution reactions of phosphoramidites and their congeners. *JOURNAL OF PHYSICAL ORGANIC CHEMISTRY*.
- Noamaan, R. H.-E.-T. (2014). *A structural study on the azide–tetrazole equilibrium in the azidobenzothiazole system. DFT-treatment*. Giza,Egipt.

Relación pKa, Calor de Reacción y Absorción de CO₂ en Líquidos Iónicos

- Oura, K. (. (2003). *Surface science : an introduction*. Berlin; New York; Springer.
- Palomar, C. M.-B. (2020). *Prediction of CO₂ chemical absorption isotherms for ionic liquid design by DFT/COSMO-RS calculations*. Madrid.
- Ren, J. W.-G. (2013). *Potential for Using Simple 1,2,4-Triazole Salt Solutions as Highly Efficient CO₂ Absorbents with Low Reaction Enthalpies*. *Industrial & Engineering Chemistry* .
- Sadlej, A. J. (1992). *A theoretical study of the vibrational spectra of imidazole and its different forms*.
- Seddon, K. (1997). En K. Seddon, *ionic liquids for clean technology* (págs. 351-356).
- Silverstein, S. T. (2020). *pKa values in the undergraduate curriculum: introducing pKa values measured in DMSO to illustrate solvent effects*. ChemTexts.
- Sowmiah. (2009). *On the Chemical Stabilities of Ionic Liquid*. Taiwan.
- Sowmiah, V. S.-C.-H. (2009). *On the Chemical Stabilities of Ionic Liquid*. Taiwan.
- Spivey. (2012). *Heteroaromatic Chemistry*.
- Spivey, A. C. (s.f.)(1999). *Diazoles & diazines: properties, syntheses & reactivity*. London.
- Superficies Solidas: Adsorción y catálisis. (s.f.)(2009) En U. d. Valencia, *Química física avanzada*.
- Technology, N. I. (2013). *Computational chemistry Comparison and Benchmark database*.
- Teixeira. (2006). *Synthesis and Structural Characterization of 1- and 2-Substituted Indazoles: Ester and Carboxylic Acid Derivatives*.
- Wang, *. L.-e. (2011). *Tuning the Basicity of Ionic Liquids for Equimolar CO₂ Capture***.
- Wang, M. H. (2015). *Activation of CO₂ by ionic liquid EMIM-BF₄ in the electrochemical system, a theoretical study*.
- Wang, M. P. (2019). *Ionic Liquids for Chemisorption of CO₂*. china.
- Wasserscheid, P. a. (2008). *Ionic Liquids in Synthesis*.
- Xingxing Lei, Y. X. (2014). *Highly efficient and reversible CO₂ capture through 1,1,3,3-tetramethylguanidinium imidazole ionic liquid†*.
- Zeng, S. Z. (2017). *Ionic-Liquid-Based CO₂ Capture Systems: Structure, Interaction and Process*.
- Zhao, M. B. (2012). *Syntheses and Applications of Ionic Liquids as Solven and Reactants*.
- Zhou, J. M. (2008). *Ab initio calculations of the interaction between thiophene and ionic liquids*. china.

Anexos

Tabla 1a Nombres y abreviaturas

Nombre	Abreviatura
Pyrazole	Pyr
Imidazole	Im
Trizole	Triz
Oxazolidinone	Oxa
Tetrazole	Tetz
Índole	Ind
Bentriazole	Bentriaz
1-butyl-3-methylimidazolium	Bmim
1,3-dimethylimidazolium	Dmim
1-ethyl-3-methylimidazolium	Emim
1-methyl-3-propylimidazolium	Pmim
1,3-diethylimidazolium	Eeim

Tabla 2a: Distancias de átomos

	Pyr- CO ₂		Im- CO ₂		Triz- CO ₂	
C1-C2	1,38	C1-C2	1,378	C1-N1	1,373	N1- N2
C1-C3	1,377	C1-N2	1,349	C1-N2	1,319	N1-C1
C1-H1	1,082	C1-H2	1,082	C1-H1	1,082	C1-H1
C2-H3	1,083	C2-H1	1,083	C2-N3	1,364	C1-N4
C2-N1	1,347	C2-N1	1,346	C2-H2	1,083	N2- N3
C2-H2	1,082	N2-C3	1,349	N3- N2	1,365	N3- N4
N1- N2	1,325	C3-N1	1,348	N3-C3	1,441	N4-C2
N2-C4	1,332	N1-C4	1,372	C3-O1	1,253	C2-O1
C4-O1	1,196	C4-O1	1,22	C3-O2	1,264	C2-O2
C4-O2	1,202	C4-O2	1,348			

	Tetz- CO ₂		Oxa- CO ₂		Ind- CO ₂	
N1-N2	1,377	C1-H1	1,091	C1-C2	1,414	C1-C2

Relación pKa, Calor de Reacción y Absorción de CO₂ en Líquidos Iónicos

N1-C1	1,311	C1-H2	1,097	C1-C3	1,401	C1-C3
C1-H1	1,082	C1-C2	1,533	C2-C6	1,407	C2-C6
C1-N4	1,365	C1-N	1,459	C6-C5	1,388	C6-C5
N2-N3	1,287	C2-H3	1,097	C6-H4	1,087	C6-H4
N3-N4	1,362	C2-H4	1,092	C5-C4	1,412	C5-C4
N4-C2	1,451	C2-O1	1,436	C5-H3	1,086	C5-H3
C2-O1	1,249	O1-C3	1,378	C4-C3	1,387	C4-C3
C2-O2	1,26	C3-O2	1,2	C4-H2	1,087	C4-H2
		C3-N	1,398	C3-H1	1,08	C3-H1
		N-C4	1,417	C1-N2	1,388	C1-N3
		C4-O4	1,276	N2-N1	1,373	N3-N2
		C4-O3	1,257	N1-C7	1,314	N2-N1
				C7-H5	1,084	N1-C2
				C7-C2	1,436	N1-C7
				N2-C8	1,428	C7-O1
				C8-O1	1,257	C7-O2
				C8-O2	1,272	

Bentriz- CO ₂		Bmim- CO ₂		Dmim- CO ₂		Emim- CO ₂
1,407	C1-N1	1,45	C1-N2	1,451	C1-N2	1,345
1,401	C1-N2	1,452	C1-N1	1,452	C1-N1	1,344
1,402	C1-C9	1,484	C1-C6	1,513	C1-C7	1,524
1,391	C9-O1	1,199	C6-O1	1,221	C7-O1	1,219
1,082	C9-O2	1,262	C6-O2	1,346	C7-O2	1,298
1,414	N1-C3	1,408	N1-C3	1,408	N1-C4	1,468
1,087	N1-C4	1,444	C3-C2	1,369	C3-C2	1,361
1,387	C4-H5	1,11	C2-N2	1,409	C2-N2	1,381
1,086	C4-H4	1,11	N2-C5	1,445	N2-C5	1,477
1,085	C4-H3	1,11	C5-H8	1,11	C5-H6	1,093
1,387	C3-C2	1,37	C5-H7	1,11	C5-H7	1,093
1,283	C3-H2	1,082	C5-H6	1,11	C5-C6	1,527
1,383	C2-N2	1,411	N1-C4	1,445	C6-H8	1,092
1,382	C2-H1	1,082	C4-H4	1,11	C6-H10	1,092
1,438	N2-C5	1,449	C4-H5	1,11	C6-H9	1,092
1,255	C5-H7	1,112	C4-H3	1,11	N1-C4	1,468
1,266	C5-H6	1,112			C4-H4	1,09
	C5-C6	1,536			C4-H5	1,09
	C6-H9	1,112			C4-H3	1,09

Relación pKa, Calor de Reacción y Absorción de CO₂ en Líquidos Iónicos

	C6-H8	1,112				
	C7-C8	1,529				
	C7-H11	1,112				
	C8-H12	1,112				
	C8-H13	1,11				
	C8-H14	1,11				