

SOLVENTES EUTÉCTICOS PARA LA CAPTURA DE CO<sub>2</sub>: COMPARACIÓN DE  
DESEMPEÑOS CON LA MONOETANOLAMINA (MEA) POR MEDIO DE SIMULACIÓN  
EN ASPEN HYSYS.

Zuly Samantha Flórez Viachá y Mayra Alejandra Bustos  
Guarín

Trabajo de grado para optar al título de Ingeniero Químico  
Modalidad de proyecto de investigación

Director  
PhD. Giovanni Morales Medina

Universidad Industrial de Santander  
Facultad de Ingenierías Físicoquímicas  
Escuela de Ingeniería Química

2024

### *Dedicatorias*

*A mi madre, Blanca Rocío Vianchá Rodríguez, mi ejemplo de amor incondicional y fortaleza infinita. Has sido mi refugio en los días difíciles y mi mayor inspiración en los momentos de triunfo. Cada una de tus palabras me ha llenado de fuerza y consuelo, haciéndome sentirte cerca, incluso en la distancia. Gracias por tu sacrificio, por tu bondad y por enseñarme a luchar siempre por mis sueños.*

*A mi padre, Luis Miguel Flórez Torres, por ser mi pilar, mi guía y mi ejemplo de esfuerzo incansable. Tus sacrificios y tu apoyo incondicional han sido faros en mi vida, iluminando cada paso que doy. Me has enseñado que, con dedicación, perseverancia y fe, no hay meta inalcanzable. Gracias por impulsarme a confiar en mí misma, por mostrarme que los sueños se construyen con trabajo constante, y por estar siempre a mi lado, en cada triunfo y cada tropiezo.*

*A mi abuelo, Andrés Flórez Molano, quien ha sido la luz que me acompaña en este camino. Tu perseverancia me ha demostrado que, sin importar cuán difícil sea el camino, con gratitud, paciencia y de las manos de Dios siempre se puede seguir adelante. Eres mi ejemplo de humildad, alegría y sabiduría, y has sido mi motor para no rendirme, recordándome siempre que hay belleza en cada instante vivido.*

*A Santiago Gordillo Camelo, por estar a mi lado en los momentos más difíciles. Gracias por motivarme a seguir adelante, sin importar lo complicado que parezca el camino. Me has inspirado a ver más allá de las dificultades y me enseñaste que, tras los días grises, siempre sale el sol. Te amo y te admiro profundamente.*

*A mi hermano, Miguel Andrés Flórez Vianchá, quien vio en mí un potencial que ni siquiera yo conocía. Gracias por haberme encaminado en esta carrera tan hermosa, y por motivarme a ser grande no solo en lo profesional, sino también en lo personal. Has sido mi guía y mi inspiración, y con tu ejemplo me ha mostrado que no hay sueños demasiado grandes ni metas imposibles de alcanzar.*

*Esto es por y para ustedes. Simplemente, gracias.*

***Samantha Flórez***

*A Dios, que sin él nada sería posible, gracias por su sabiduría y fortaleza para enfrentarme a cada reto que me trajo este sueño, gracias por iluminarme en cada desafío, en momentos de duda y de estudio.*

*A mis padres, Milena y Jonny, ustedes son el pilar fundamental de este logro. El hogar que han construido con amor y apoyo incondicional, han sido mi guía constante y mi mayor inspiración.*

*A mi mamá, gracias por sus infinitas enseñanzas, por ser mi refugio en los momentos difíciles, por siempre creer en mí, por su paciencia, por ayudarme a superar los obstáculos y celebrar mis logros más que los suyos.*

*A mi papá, mi primer maestro, gracias por sus sabios consejos, por su confianza inquebrantable, por su comprensión y por sus sacrificios silenciosos que hicieron posible este sueño.*

*A mi hermano Santiago, mi compañero de aventuras y de sueños, por sus innumerables noches en vela acompañándome mientras estudiaba y por motivarme a ser un ejemplo para él.*

*A mis queridas tías y primos, por sus mensajes de aliento y sus muestras de cariño, que siempre me han hecho sentir querido y respaldado.*

*A mis amigos, en especial a Geraldine, Stefany, Valeria, Paula y Sebastián: Gracias por estar conmigo desde el día 1 en esta aventura, todos los momentos y risas compartidas han hecho de la Universidad un lugar más bonito y llevadero.*

*Gracias por compartir conmigo cada paso de este camino, este logro también es de ustedes.*

**Mayra Alejandra Bustos**

### **Agradecimientos**

A Dios, por ser mi guía en todo este proceso, por darme la fortaleza para seguir adelante y por mostrarme que el sacrificio y el trabajo duro siempre tienen sus recompensas.

A mi familia, por ser mi motor y apoyo incondicional en los buenos y malos momentos, por siempre creer en mí y motivarme a continuar, sin importar las adversidades.

Al profesor Giovanni Morales Medina, por ser una guía clave en este proceso, por su paciencia y por brindarnos todo su conocimiento, lo cual ha sido fundamental en nuestro desarrollo.

A la Universidad Industrial de Santander, por ofrecernos una excelente formación tanto profesional como personal, por brindarnos las herramientas para crecer y enfrentar los desafíos de la vida.

A la escuela de Ingeniería Química, por proporcionarnos los recursos y el entorno académico necesario para llevar a cabo este trabajo.

A nuestros profesores de la carrera, quienes a lo largo de nuestra vida académica han compartido su conocimiento y pasión por la ingeniería química, fundamental para realizar esta investigación.

A mis amigos y personas cercanas, que han contribuido a mi crecimiento personal y profesional, gracias por los buenos momentos y por todas las experiencias enriquecedoras compartidas.

**Tabla de contenido**

<b>Introducción .....</b>	<b>10</b>
<b>1. Objetivos.....</b>	<b>12</b>
1.1 Objetivo general .....	12
1.2 Objetivos específicos .....	12
<b>2. Marco conceptual .....</b>	<b>13</b>
<b>3. Marco teórico.....</b>	<b>15</b>
<b>4. Estado del arte.....</b>	<b>18</b>
<b>5. Metodología .....</b>	<b>21</b>
5.1 Fase 1: Selección de un solvente eutéctico .....	21
5.2 Fase 2: Simulación del proceso de absorción de CO <sub>2</sub> con MEA (caso base) .....	22
5.3 Fase 3: Simulación del proceso de absorción de CO <sub>2</sub> con el solvente eutéctico.....	24
<b>6. Resultados.....</b>	<b>25</b>
6.1 Selección del Solvente Eutéctico .....	25
6.2 Simulación del Caso Base.....	28
6.3 Análisis de la Captura con el DES .....	34
<b>7. Conclusiones .....</b>	<b>40</b>
<b>8. Recomendaciones .....</b>	<b>41</b>
<b>Referencias .....</b>	<b>42</b>
<b>Apéndices.....</b>	<b>55</b>

**Lista de figuras**

<b>Figura 1.</b> Estructura química de compuestos que actúan (HBD) y que se han utilizado en combinación con el cloruro de colina (HBA).....	16
<b>Figura 2.</b> Esquema general de la absorción de CO <sub>2</sub> .....	17
<b>Figura 3.</b> Enfoque metodológico aplicado para el desarrollo de la investigación.....	19
<b>Figura 4.</b> Diagrama base del proceso de captura de CO <sub>2</sub> con disolvente MEA .....	28
<b>Figura 5.</b> Perfil de temperatura en la torre absorbedor – MEA .....	31
<b>Figura 6.</b> Perfil de temperatura en la torre regeneradora - MEA .....	32
<b>Figura 7.</b> Perfil de concentración de CO <sub>2</sub> en la torre absorbedora – MEA .....	33
<b>Figura 8.</b> Perfil de concentración de CO <sub>2</sub> en la torre regeneradora – MEA .....	33
<b>Figura 9.</b> Diagrama modificado del proceso de captura de CO <sub>2</sub> con disolvente ChCl:U (1:2) .....	35
<b>Figura 10.</b> Perfil de temperatura en la torre absorbedora – ChCl:U (1:2) .....	37
<b>Figura 11.</b> Perfil de temperatura en la torre regeneradora – ChCl:U (1:2) .....	37
<b>Figura 12.</b> Perfil de Concentración de CO <sub>2</sub> en la torre absorbedora – ChCl:U (1:2) .....	38
<b>Figura 13.</b> Perfil de Concentración de CO <sub>2</sub> en la torre regeneradora - ChCl:U (1:2) .....	39

**Lista de tablas**

<b>Tabla 1</b> Composiciones y condiciones de alimentación del proceso de captura de CO <sub>2</sub> con MEA .....	23
<b>Tabla 2</b> Matriz cualitativa con indicadores para diferentes solventes eutécticos .....	25
<b>Tabla 3</b> Matriz cuantitativa con solventes eutécticos e indicadores.....	28
<b>Tabla 4</b> Resultados obtenidos con la simulación de captura de CO <sub>2</sub> utilizando la MEA como solvente.....	30
<b>Tabla 5</b> Comparación entre el caso base con MEA como solvente y el caso modificado con ChCl:U (1:2).....	36

**Lista de Apéndices**

<b>Apéndice A</b> Configuración de equipos para la simulación de captura de CO <sub>2</sub> con el caso base MEA como disolvente .....	55
<b>Apéndice B.</b> Parámetros introducidos en la simulación para la incorporación del solvente eutéctico ChCl:U (1:2).....	58
<b>Apéndice C</b> Justificación de la matriz de selección del solvente eutéctico según la revisión bibliográfica realizada .....	63
<b>Apéndice D</b> Tablas de corrientes obtenidas en la simulación de captura de CO <sub>2</sub> para el caso base con MEA y el caso modificado con ChCl:U (1:2).....	67
<b>Apéndice E</b> Resultados de la simulación de captura de CO <sub>2</sub> en Aspen HYSYS y comparaciones con la literatura de la variación de propiedades como viscosidad, densidad, tensión superficial y capacidad calorífica.....	69



## Resumen

**Título:** Solventes eutécticos para la captura de CO<sub>2</sub>: comparación de desempeños con la Monoetanolamina (MEA) por medio de simulación en Aspen HYSYS\*

**Autores:** Zuly Samantha Flórez Vianchá, Mayra Alejandra Bustos Guarín\*\*

**Palabras Clave:** Simulación, CO<sub>2</sub>, MEA, Solvente eutéctico, Aspen HYSYS.

**Descripción:** El presente estudio buscó simular un proceso de captura de CO<sub>2</sub> empleando solventes eutécticos (ES por sus siglas en inglés) como una alternativa a las aminas tradicionales en el proceso de endulzamiento de gases. Los ES, son mezclas de compuestos que son fundidos a temperaturas mucho más bajas que sus componentes puros, presentan algunas propiedades interesantes como la alta capacidad de disolución de gases, la biodegradabilidad y baja toxicidad, lo que los convierte en candidatos prometedores en esta aplicación.

Se llevó a cabo la modelación del proceso de endulzamiento de gas natural utilizando el simulador Aspen HYSYS V.14. El modelo inicial empleó una solución acuosa de monoetanolamina (MEA) al 30% en peso como solvente de referencia. Posteriormente, tras una revisión bibliográfica, se seleccionó un solvente eutéctico como alternativa a la MEA. La selección se basó en criterios como solubilidad, costo, disponibilidad, impacto ambiental, consumo energético y condiciones de desorción. Se modificó la simulación realizada previamente con la MEA y se introdujo el solvente eutéctico seleccionado en solución acuosa al 30%. Los resultados de la simulación evidenciaron que el ES seleccionado, en este caso, cloruro de colina: urea en proporción 1:2, logró una captura de CO<sub>2</sub> del 100% molar, superando en un 17.58% la eficiencia de la MEA. Adicionalmente, el proceso con DES presentó un consumo energético menor comparado con la MEA, este fue de 3.653 GJ por tonelada de CO<sub>2</sub> capturado, demostrando así su potencial como alternativa viable en el proceso de endulzamiento de gas natural.

---

\*Trabajo de grado.

\*\*Facultad de Ingenierías Físicoquímicas. Escuela de Ingeniería Química. Ingeniería Química. Director: Giovanni Morales Medina. PhD en Ingeniería Química.

### Abstract

**Title:** Eutectic solvents for CO<sub>2</sub> capture: comparison of performances with Monoethanolamine (MEA) through simulation in Aspen HYSYS\*

**Authors:** Zuly Samantha Flórez Vianchá, Mayra Alejandra Bustos Guarín\*\*

**Keywords:** Simulation, CO<sub>2</sub>, MEA, Eutectic solvent, Aspen HYSYS.

**Description:** The present study sought to simulate a CO<sub>2</sub> capture process using eutectic solvents (ES) as an alternative to traditional amines in the gas sweetening process. ES, are mixtures of compounds that are melted at much lower temperatures than their pure components, present some interesting properties such as high gas dissolution capacity, biodegradability and low toxicity, which makes them promising candidates in this application.

Modeling of the natural gas sweetening process was carried out using the Aspen HYSYS V.14 simulator. The initial model used a 30 wt% aqueous solution of monoethanolamine (MEA) as the reference solvent. Subsequently, after a literature review, a eutectic solvent was selected as an alternative to MEA. The selection was based on criteria such as solubility, cost, availability, environmental impact, energy consumption and desorption conditions. The simulation previously carried out with the MEA was modified and the selected eutectic solvent was introduced in a 30% aqueous solution. The simulation results showed that the selected ES, in this case, choline chloride: urea in a 1:2 ratio, achieved a CO<sub>2</sub> capture of 100% molar, exceeding the efficiency of the MEA by 17.58%. Additionally, the process with DES presented a lower energy consumption compared to MEA, this was 3,653 GJ per ton of CO<sub>2</sub> captured, thus demonstrating its potential as a viable alternative in the natural gas sweetening process.

---

\* Degree work.

\*\* Faculty of Physicochemical Engineering, School of Chemical Engineering, Chemical Engineering. Director: Giovanni Morales Medina. PhD in Chemical Engineering.

## Introducción

Desde el pasado siglo, el aumento antropogénico de la concentración atmosférica de dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) ha conllevado a problemas medioambientales preocupantes debido a su impacto en el cambio climático (Rozas et al., 2024). Los informes de diferentes organizaciones han mostrado una tendencia de incremento en las emisiones de CO<sub>2</sub> desde la década de 1960, con un aumento neto anual del 2.11%; se estima que, de continuar esta tendencia, las concentraciones de CO<sub>2</sub> alcanzarán las 1,200 ppm en los próximos 53 años (Foorginezhad & Ji, 2024), provocando una serie de impactos severos en los sistemas climáticos, ecológicos y socioeconómicos a nivel global (Olivo, M. de L., & Soto-Olivo, A. 2010).

Una parte importante de las emisiones de CO<sub>2</sub> proviene de los procesos industriales y de la quema de combustibles fósiles en los sectores de energía y transporte (BBVA, 2024). Una alternativa para la reducción de estas emisiones es la captura de CO<sub>2</sub>, por medio de los denominados solventes eutécticos (ES, por sus siglas en inglés), los cuales presentan diversas ventajas en comparación con los solventes de uso industrial.

Tradicionalmente, las aminas se han usado en la absorción o captura de CO<sub>2</sub> por su eficiencia y bajos costos. Sin embargo, la literatura reporta que el uso de aminas presenta diversos problemas tecnológicos como corrosión, un elevado consumo energético y un requerimiento de reposición por su regeneración (Bharadvaja et al., 2020; Ghenni et al., 2024; Gouedard et al., 2012; Pinto et al., 2019). Además, las aminas presentan un alto grado de toxicidad y volatilidad, lo cual conlleva a contaminación de cuerpos de agua, del aire y del suelo (Ali et al., 2019; Mehra et al., 2021; Naidu et al., 2021; Prabhune & Dey, 2023; Rozas et al., 2024). Los ES, por otra parte, presentan afinidad por el CO<sub>2</sub>, son de bajo costo, biodegradables y tienen baja toxicidad, por lo cual los ES son clasificados como solventes verdes (Deviet al.,

2020; Biswas et al., 2023a). Por lo anterior, los ES corresponden a una alternativa ante el uso de las aminas en el proceso industrial de captura de CO<sub>2</sub>. Una evaluación de la factibilidad técnica de la captura de CO<sub>2</sub> con ES a nivel industrial puede ser desarrollada con base en resultados de simulación en programas comerciales como Aspen HYSYS. Este simulador permite modelar y simular diferentes condiciones operativas, ajustando parámetros y variables para observar y evaluar el desempeño de distintos procesos (AULA21, 2024; Gutiérrez et al., 2019; Mestre-Escudero et al., 2020a, 2020b; Rincón Ocampo & Mejía Díaz, 2023). Los resultados y las comparaciones basadas en simulaciones pueden ser utilizadas como soporte en la toma de decisiones a nivel industrial y también en la elección de las mejores condiciones de escalado.

Con lo mencionado anteriormente, en la presente investigación se muestran los resultados más relevantes de una evaluación por simulación con Aspen HYSYS, de la captura de CO<sub>2</sub> con ES, comparando los desempeños con los reportados por un solvente tradicional (MEA, monoetanolamina). La pregunta de investigación correspondió a ¿en cuáles condiciones operacionales resulta viable a nivel técnico la aplicación de solventes eutécticos en el proceso de absorción de CO<sub>2</sub> en comparación con la MEA?

## 1. Objetivos

### 1.1 Objetivo general

Desarrollar una comparación por medio de simulación en Aspen Hysys de la captura de CO<sub>2</sub>, evaluando el potencial de un solvente eutéctico como alternativa al uso de la monoetanolamina (MEA).

### 1.2 Objetivos específicos

- Definir solventes eutécticos útiles en la captura de CO<sub>2</sub>, teniendo en cuenta reportes de literatura con información de costos, disponibilidad, afinidad de absorción, impacto ambiental y energía de regeneración, estableciendo un solvente eutéctico adecuado para la simulación.
- Codificar una simulación en Aspen Hysys del proceso de captura de CO<sub>2</sub> con MEA, validando los resultados de la simulación con reportes de la literatura.
- Modificar y ejecutar la simulación del caso base para la captura del CO<sub>2</sub> con el solvente eutéctico seleccionado, comparando los resultados obtenidos con respecto a la simulación con MEA.

## 2. Marco conceptual

**Absorción:** el proceso de absorción es una operación de transferencia de materia en la que un gas se pone en contacto con un líquido para disolver selectivamente uno o más componentes del gas en el líquido. La absorción de gases es una operación unitaria que implica disolver uno o más componentes solubles de una mezcla gaseosa en un líquido. Este proceso se emplea cuando se desea transferir componentes volátiles de una mezcla gaseosa a un líquido (McCabe, W. L., Smith, J. C., Harriott, 1991)

**Aminas:** Las aminas son compuestos químicos orgánicos que se utilizan en soluciones acuosas para eliminar gases ácidos, como el dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) y el sulfuro de hidrógeno (H<sub>2</sub>S), de gases industriales. Estas sustancias se emplean en procesos de tratamiento de gas para reducir su impacto ambiental al eliminar componentes no deseados. Algunas aminas comunes utilizadas en estos procesos son la Monoetanolamina (MEA), Dietanolamina (DEA), Diisopropanolamina (DIPA), Metildietanolamina (MDEA) y Diglicolamina (DGA). La utilización eficiente de aminas en la captura de CO<sub>2</sub> es esencial para reducir las emisiones y mitigar el impacto ambiental de las actividades industriales (Erdmann et al., 2012)

**Captura de CO<sub>2</sub>:** La captura de CO<sub>2</sub> es un proceso fundamental para reducir las emisiones de gases de efecto invernadero y combatir el cambio climático. Esta tecnología implica recolectar el dióxido de carbono de fuentes como plantas de energía o fábricas en lugar de que se emita a la atmósfera. Se puede emplear como materia prima en industrias alimentarias, farmacéuticas y para producir compuestos químicos como gas de síntesis, metano, metanol, entre otros (Ana Caballero, 2023)

**Desorción:** Se denomina desorción, desabsorción o stripping a la operación unitaria cuya finalidad es eliminar o recuperar uno o varios componentes minoritarios de una corriente

líquida por transferencia a una corriente gaseosa (McCabe, W. L., Smith, J. C., Harriott, 1991).

**Emisiones de CO<sub>2</sub>:** Las emisiones de CO<sub>2</sub>, también conocidas como dióxido de carbono, son liberaciones de este gas a la atmósfera, lo que genera un impacto significativo en el planeta debido al efecto invernadero que provocan (Agencia de protección ambiental de Estados Unidos [EPA], 2024). Dichas emisiones han aumentado de manera significativa en los últimos años, La Comisión Europea ha propuesto objetivos clave para 2030, como una reducción de al menos un 55% de las emisiones de gases de efecto invernadero con respecto a 1990 (Repsol S.A, n.d.), Colombia por otro lado asumió el reto de reducir las emisiones de gases efecto invernadero (GEI) un 51% al 2030 para alcanzar la carbononeutralidad al 2050 (Ministerio de Ambiente y Desarrollo Sostenible, 2022)

**Solventes eutécticos:** Los solventes eutécticos son fluidos compuestos generalmente por dos o tres componentes, son económicos, no tóxicos, renovables y biodegradables, capaces de auto asociarse a través de interacciones de enlaces de hidrógeno. Estos solventes forman un líquido cercano a la composición eutéctica; es decir, la relación molar de los componentes presenta un punto de fusión más bajo (punto eutéctico) que los compuestos puros respectivos. Los solventes eutécticos profundos se consideran una alternativa prometedora a los solventes orgánicos tradicionales debido a su menor toxicidad, alta biodegradabilidad y su origen renovable, lo que los convierte en una opción más sostenible y respetuosa con el medio ambiente (Aragón Tobar, 2022; César & Palacio, 2021b)

**Programa Aspen Hysys:** El programa Aspen HYSYS es un simulador de procesos químicos Desarrollado por AspenTech que se utiliza para modelar matemáticamente procesos químicos, desde operaciones unitarias hasta plantas químicas completas y refinerías. Este software es capaz de realizar cálculos fundamentales de ingeniería química, incluyendo balances

de masa y energía, equilibrio líquido-vapor, transferencia de calor y masa, cinética química, fraccionamiento y caída de presión. Aspen HYSYS se utiliza ampliamente en la industria y la academia para simulaciones en estado estacionario y dinámico, diseño de procesos, modelado de rendimiento y optimización.

### 3. Marco teórico

Los SE son mezclas líquidas formadas por la combinación de dos o más sólidos que crean una mezcla eutéctica, caracterizada por tener un punto de fusión más bajo que los puntos de fusión de sus componentes individuales. Generalmente, estas mezclas están compuestas por uno o más compuestos con puentes de hidrógeno o Donantes de Enlaces de hidrógeno (HBD) y uno o más compuestos con centros nucleofílicos o Aceptores de Enlaces de Hidrógeno (HBA). Diferentes tipos de solventes eutécticos han sido ensayados a escala laboratorio para la captura del CO<sub>2</sub>. Estos están formados por una molécula donadora de enlaces de hidrógeno (HBD) y una o más moléculas aceptoras de enlaces de hidrógeno (HBA) (César & Palacio, 2021a). La formación de fuertes interacciones basadas en enlaces de hidrógeno (HBD – HBA) hace que las mezclas tengan propiedades eutécticas, es decir, con un punto de fusión inferior al de los componentes individuales, así mismo, los solventes eutécticos tienen una capacidad de captura de CO<sub>2</sub> que aumenta con la presión y disminuye con la temperatura, lo que facilita la captura de CO<sub>2</sub> a bajas temperaturas (Leron & Li, 2013).

Los ES se pueden clasificar en cinco categorías principales: ES tipo I compuestos por sales de amonio cuaternario y cloruros metálicos, similares a los compuestos de haluros metálicos y sales de imidazolio, ES tipo II formados por sales de amonio cuaternario e hidratos de cloruro metálico, ES tipo III compuestos de cloruro de colina y HBD como alcoholes, amidas, carbohidratos, etc., conocidos por su capacidad para solvatar especies de metales de transición, ES tipo IV hechos de

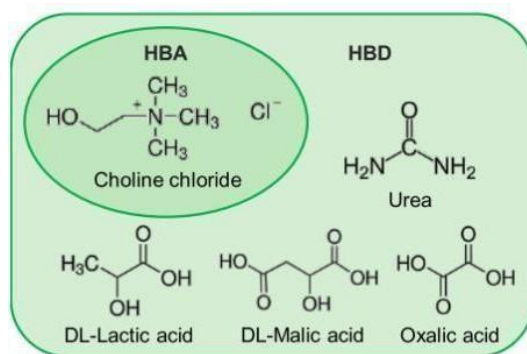


cloruro metálico con HBD (Prabhune & Dey, 2023) y ES tipo V una nueva clase emergente que consiste en HBD y HBA moleculares no iónicos, donde los enlaces de hidrógeno son predominantes.

La **Figura 1** ilustra un ejemplo de la estructura química de compuestos que actúan como donadores de enlaces de hidrógeno (HBD) y que se han utilizado en combinación con el cloruro de colina, que actúa como aceptor de enlaces de hidrógeno (HBA). Una ventaja importante de estos solventes es la capacidad de ajustar y mejorar las propiedades termofísicas de los ES mediante diferentes combinaciones de HBA y HBD, variando las relaciones de concentración molar y utilizando cosolventes. Esto permite adaptar los ES para satisfacer las necesidades específicas de diversos procesos (Prabhune & Dey, 2023).

### Figura 1

*Estructura química de compuestos que actúan (HBD) y que se han utilizado en combinación con el cloruro de colina (HBA)*



**Nota.** Adaptado de (Mowinckel Corpas Álvaro, 2021).

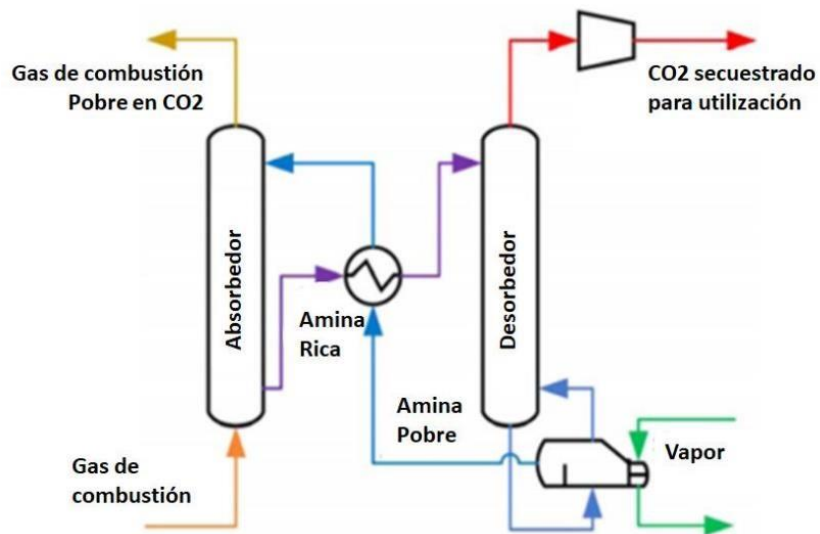
Por otro lado, la captura de dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) es una técnica esencial para mitigar las emisiones de gases de efecto invernadero y combatir el cambio climático. Existen dos métodos principales para la captura de CO<sub>2</sub>: la absorción física y la absorción química. En la absorción física, el CO<sub>2</sub> se disuelve en un solvente sin una reacción química significativa,

basándose principalmente en la solubilidad del gas en el solvente. En contraste, la absorción química implica una reacción química entre el CO<sub>2</sub> y el solvente, formando compuestos que pueden ser posteriormente separados y regenerados.

El sistema convencional de captura de CO<sub>2</sub> con solventes se compone de dos torres: la torre de absorción y la torre regeneradora. Este sistema es presentado en la **Figura 2**. En la torre de absorción, la corriente gaseosa rica en CO<sub>2</sub> (gases de combustión) es puesta en contacto físico con la solución de solvente (amina). La solución de amina ingresa por la parte superior, mientras el gas ingresa por la inferior. En su contacto, la amina absorbe el CO<sub>2</sub> de la corriente gaseosa. La solución de amina sale de la torre, rica en CO<sub>2</sub>, mientras la corriente gaseosa sale por la parte superior. En la torre regeneradora, la solución de amina rica se recupera y reacondiciona para reutilizarla de nuevo en la torre de absorción (Gutiérrez et al., 2019).

### Figura 2

*Esquema general de la absorción de CO<sub>2</sub>.*



*Nota.* Adaptado de (Ooi et al., 2020).

Este proceso puede ser aplicado con éxito en diversos contextos. Según la ley colombiana 2169 de 2021, por medio de la cual se impulsa el desarrollo bajo en carbono del

país mediante el establecimiento de metas y medidas mínimas en materia de carbono neutralidad y resiliencia climática y se dictan otras disposiciones, se tiene una meta de reducir un 51% las emisiones de efecto invernadero (GEI) con respecto al escenario de referencia a 2030 de la NDC, lo que representa un máximo de emisiones de 169.55 millones de tCO<sub>2</sub> en 2030. Por lo anterior, la captura de CO<sub>2</sub> se presenta como una vía de alcanzar esta reducción en las GEI establecidas en el marco regulatorio colombiano.

#### **4. Estado del arte**

(Sarmad et al., 2017; Smith et al., 2014; y Q. Zhang et al., 2012) realizaron investigaciones experimentales en laboratorio y emplearon software especializado para analizar los resultados. En sus estudios, los autores llevaron a cabo una comparación entre solventes eutécticos y líquidos iónicos en el contexto de la captura de CO<sub>2</sub>. Los hallazgos sugieren que los solventes eutécticos presentan propiedades favorables, tales como un menor costo de preparación, biodegradabilidad y características más ecológicas en comparación con los líquidos iónicos. Sin embargo, los estudios no incluyen simulaciones relacionadas con la captura de CO<sub>2</sub> utilizando estos solventes, ni se realiza una comparación directa entre los solventes eutécticos y la MEA, que es el solvente tradicionalmente utilizado en los procesos de captura de CO<sub>2</sub>.

Por otro lado, (Martínez-Lomovskoi et al. 2023) diseñaron y optimizaron un proceso de captura de carbono postcombustión (PCC) experimentalmente, así como una simulación basada en los modelos integrados del simulador Aspen Plus, utilizando un disolvente eutéctico compuesto por cloruro de colina/urea (1:2). Los autores consideraron cuatro casos de estudio que abarcaban diferentes tipos de combustibles fósiles utilizados en centrales eléctricas: carbón, gas natural, gas asociado y biogás, y establecieron un problema de optimización multiobjetivo que integraba objetivos económicos y ambientales. Como resultado, el proceso de captura de

carbono con DES logró una tasa de recuperación del 95% y una pureza molar del 95% del CO<sub>2</sub> capturado en todos los casos estudiados. Al comparar este proceso con uno basado en MEA optimizado de manera similar, encontraron una reducción del 171,8% en el impacto ambiental al tratar gases de combustión de una planta a base de carbón. Sin embargo, el consumo de energía para el proceso con DES fue ligeramente mayor, alcanzando 6,62 MJ/kgCO<sub>2</sub> en comparación con los 6,40 MJ/kgCO<sub>2</sub> del proceso basado en MEA. Estos resultados mostraron que, aunque el DES requería más energía, su menor impacto ambiental lo posicionaba como una alternativa más sostenible para la captura de CO<sub>2</sub> en plantas de energía a carbón.

(Ma et al., 2018) desarrollaron un proceso para la mejora del biogás utilizando una solución acuosa de cloruro de colina/urea (ChCl/Urea) en una proporción molar 1:2 como solvente absorbente para capturar CO<sub>2</sub>, simulando el proceso en Aspen Plus. El objetivo fue reducir el consumo de energía y optimizar el proceso frente a alternativas convencionales como el uso de agua pura. Los resultados mostraron que para una planta de biogás con una capacidad de 242,3 m<sup>3</sup>/h, la utilización total de energía con agua pura como solvente fue de 60,1 kW. Con la adición de ChCl/Urea (1:2) al 30%, la energía utilizada disminuyó a 50,5 kW lo que representó una reducción del 16%. No obstante, al aumentar el porcentaje de solvente mayor al 70% se observó un aumento de la energía requerida.

El estudio también mostró que la energía eléctrica de los equipos (bomba, compresor y soplador) se redujo en un 27%, pasando de 48.2 kW a 35.2 kW. Asimismo, se alcanzó una recuperación del solvente del 99,05%, lo que respalda la eficiencia del proceso. Comparado con otros métodos como la absorción con aminas.

De igual manera (Romero-García et al., 2024) estudiaron el uso del cloruro de colina y urea (ChCl: U) en una proporción 1:2 como solvente sustentable para la captura de dióxido de

carbono (CO<sub>2</sub>) en procesos postcombustión. El objetivo principal fue evaluar la viabilidad de este solvente, bajo los principios de la química verde, como alternativa al proceso convencional que emplea la (MEA). El estudio demostró que el uso de este solvente permite una captura eficiente del CO<sub>2</sub>, logrando una recuperación superior al 96% y una pureza de más del 95%, con una reducción significativa del impacto ambiental y de los costos energéticos. Comparado con el proceso convencional que utiliza MEA, se observó una disminución del 13.97% en el impacto ambiental y una reducción del 25.38% en el consumo energético, lo que se tradujo en una disminución del 32.11% en los costos globales de equipo. y servicios, y un ahorro del 21.13% en los costos de operación.

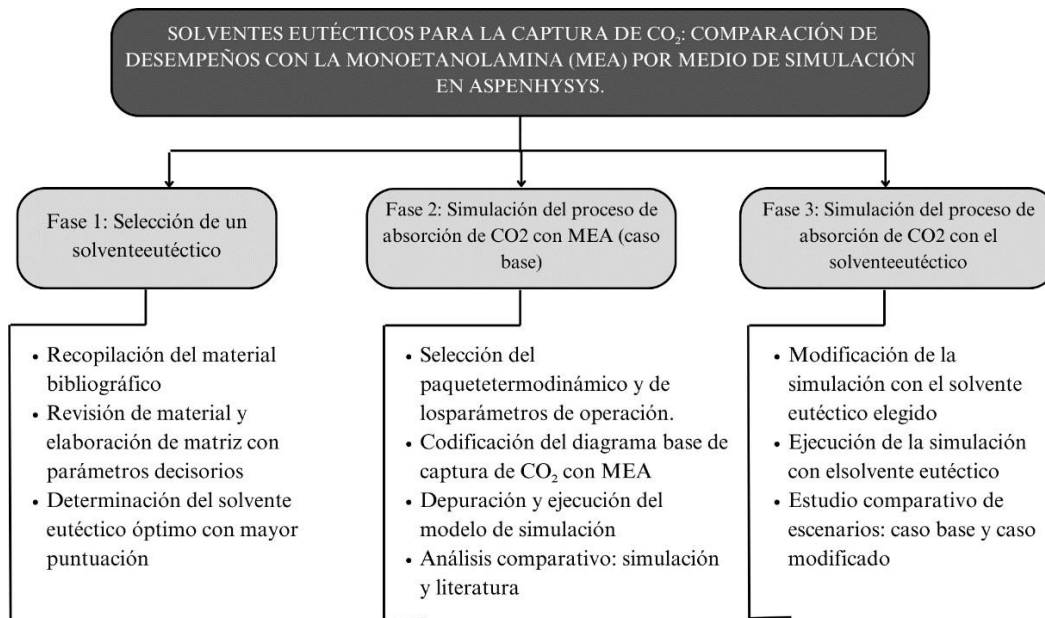
Los anteriores documentos corresponden a un soporte sobre la factibilidad y el potencial de los ES como alternativas sostenibles a las aminas tradicionalmente utilizadas, como la MEA, en los procesos de captura de CO<sub>2</sub>. Los estudios abordados destacan las ventajas de los ES, además, se demuestra que los ES pueden conducir a una reducción significativa del impacto ambiental medido con el método Eco-indicator 99 en comparación con las aminas tradicionales, lo que refuerza su viabilidad como opción para la captura de CO<sub>2</sub>. Asimismo, los documentos resaltan la factibilidad de la aplicación de herramientas computacionales, como simuladores, en el análisis de la captura de CO<sub>2</sub> y en la comparación de resultados con otros solventes. Este enfoque metodológico no solo permite predecir rendimientos, sino que también facilita la evaluación de los resultados bajo diferentes condiciones operativas. Los estudios de (Martínez-Lomovskoi et al. 2023; Ma et al., 2018 y Romero-García et al., 2024) fueron llevados a cabo con el simulador Aspen Plus. Dada la carencia de estudios con otro simulador, el presente trabajo se enfocó en la simulación y análisis de los resultados obtenidos con el simulador Aspen HYSYS.

## 5. Metodología

Las etapas metodológicas propuesta para la consecución de los objetivos específicos son presentadas en la siguiente figura.

**Figura 3**

*Enfoque metodológico aplicado para el desarrollo de la investigación.*



### 5.1 Fase 1: Selección de un solvente eutéctico

#### Actividad 1: Recopilación del material bibliográfico

Una búsqueda en la literatura disponible sobre solventes eutécticos fue efectuada en las bases de datos de Web of Science, Science Direct, Scopus y Springer. Las palabras clave empleadas fueron “Eutectic solvents” y “CO<sub>2</sub> capture”.

#### Actividad 2: Revisión de material y elaboración de matriz con parámetros decisorios

Una matriz cuantitativa para evaluar los solventes DES más reportada fue desarrollada con la literatura encontrada. La matriz cuantitativa consideró los indicadores: afinidad con el CO<sub>2</sub> (5 puntos a los solventes con una solubilidad cercana a la de la MEA, 0.5 mol CO<sub>2</sub>/mol solvente), costo (5 puntos para precios entre 10-50 USD, 2.5 puntos para precios entre 50-100 USD y 1

punto para precios superiores), disponibilidad comercial (5 puntos para alta, 2.5 para media y 1 para baja), impacto ambiental y en la salud (5 puntos a los solventes con bajo impacto en ambos indicadores, 2.5 puntos a aquellos con uno de los indicadores en nivel medio y el otro en nivel alto, y 1 punto a los solventes con alto impacto en ambos indicadores), y energía de regeneración (1 punto a los solventes para los que no se encontró información específica, 5 para el de menor cantidad de energía y 1 punto al que requería la mayor cantidad de energía). Los valores de los indicadores fueron sumados para cada ES; el solvente con la puntuación total más alta fue seleccionado como el más adecuado para la simulación de captura de CO<sub>2</sub>.

## 5.2 Fase 2: Simulación del proceso de absorción de CO<sub>2</sub> con MEA (caso base)

La simulación de la absorción de CO<sub>2</sub> utilizando MEA como solvente fue desarrollada en el programa Aspen HYSYS V14.0, con licencia académica para la UIS. La simulación se basó en el archivo desarrollado por Rincón Ocampo & Mejía Díaz (2023), aplicada al proceso de captura de CO<sub>2</sub> con líquidos iónicos. El respectivo PFD fue modificado por eliminación del separador *flash* de la simulación.

### Actividad 1: Selección del paquete termodinámico y de los parámetros de operación.

Se estableció una lista de componentes que incluyó Agua (H<sub>2</sub>O), Dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>), Monoetanolamina (MEA), Metano (CH<sub>4</sub>), Etano (C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>), Propano (C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>), Nitrógeno (N<sub>2</sub>) y Ácido sulfhídrico (H<sub>2</sub>S). Para la simulación del proceso de absorción de CO<sub>2</sub> se eligió el paquete termodinámico "Acid Gas - Chemical Solvents", recomendado por la herramienta "Methods Assistant". Este paquete está específicamente diseñado para modelar la eliminación de gases ácidos como el CO<sub>2</sub> y el H<sub>2</sub>S mediante solventes químicos, como las aminas, permitiendo una representación de los equilibrios líquido-vapor influyente en el proceso de absorción de CO<sub>2</sub>.

Para la selección de los parámetros de operación y el flujo de gas con contenido de CO<sub>2</sub>, se utilizó como referencia el documento de Akinola et al. (2019) sobre la eliminación de CO<sub>2</sub> del gas natural utilizando MEA; este documento también fue considerado por la investigación de (Rincón Ocampo & Mejía Díaz, 2023).

### Actividad 2: Codificación del PFD de captura de CO<sub>2</sub> con MEA

La codificación del PFD fue realizado con base en la información presentada en el **Apéndice A**. El PFD incluyó torre absorbadora, válvulas, intercambiadores de calor, torre regeneradora, flujo de “make up”, enfriador y bomba. Las corrientes de alimentación de disolvente y de gas agrio en el absorbedor se muestran a continuación.

**Tabla 1**

*Composiciones y condiciones de alimentación del proceso de captura de CO<sub>2</sub> con MEA*

<b>Especificaciones</b>	<b>Unidad</b>	<b>Valor</b>
<b>Corriente 1 (Disolvente)</b>		
Temperatura	°C	38.36
Presión	Bar	68.60
Flujo	kgmole/h	5289
MEA	% peso	30
H <sub>2</sub> O	% peso	67.73
CO <sub>2</sub>	% peso	2.27
<b>Corriente 2 (Gas agrio)</b>		
Temperatura	°C	35
Presión	Bar	69
Flujo	kgmole/h	1245
CH <sub>4</sub>	% molar	73.76
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	% molar	03.93
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	% molar	0.93
H <sub>2</sub> O	% molar	1.22
N <sub>2</sub>	% molar	0.16
CO <sub>2</sub>	% molar	20



---

H <sub>2</sub> S	% molar	0.00
------------------	---------	------

---

*Nota.* Adaptado de (Rincón & Mejía, 2023).

### **Actividad 3: Depuración y ejecución del modelo de simulación**

Se procedió a la ejecución de la simulación, realizando una revisión de la configuración de cada equipo y verificando que todos operaran de manera adecuada, conforme a los parámetros establecidos para el proceso.

### **Actividad 4: Análisis comparativo: simulación y literatura**

Se realizó una comparación de los resultados obtenidos mediante el simulador con los datos disponibles en la literatura. Esta evaluación permitió validar la precisión del modelo desarrollado.

## **5.3 Fase 3: Simulación del proceso de absorción de CO<sub>2</sub> con el solvente eutéctico**

### **Actividad 1: Modificación de la simulación con el SE elegido**

El SE fue definido como un componente hipotético con ayuda de parámetros escalares de la mezcla y correlaciones dependientes de la temperatura para las propiedades de viscosidad, tensión superficial y capacidad calorífica (Ma et al., 2018; Romero-García et al., 2024) (**Apéndice B**); los resultados de la predicción de estas propiedades en Aspen Hysys fueron comparados con la literatura. El paquete termodinámico utilizado fue el paquete NRTL-RK, el cual combina el método No Aleatorio de Dos Líquidos (NRTL) con la ecuación de estado de Redlich-Kwong (RK), lo que permite representar el equilibrio en sistemas no ideales (Ma et al., 2018; Romero-García et al., 2024). El modelo NRTL-RK ha sido utilizado en simulaciones con SE reportando una adecuada representación de los equilibrios de fase (Ma et al., 2018; Romero-García et al., 2024; Usman et al., 2021).

### Actividad 2: Ejecución de la simulación con el SE

La ejecución de la simulación con el SE requirió ajustes en el PFD, tales como la adición de elementos “set” y “spreadsheet” para el cálculo del solvente y el agua de reposición. También, el “solver” del absorbedor fue definido como el denominado *sparce continuation solver*; en comparación con el de la MEA el cual utilizaba *HYSIM inside – out*.

### Actividad 3: Estudio comparativo de escenarios: caso base y caso modificado

Los resultados obtenidos en el caso base, que utilizaba MEA, fueron comparados con el caso modificado con el SE. Los principales parámetros evaluados incluyeron la absorción de CO<sub>2</sub> y el consumo energético del proceso. Este análisis permitió identificar las ventajas y desventajas del uso del solvente eutéctico en comparación con la MEA en el proceso de captura de CO<sub>2</sub>.

## 6. Resultados

### 6.1 Selección del Solvente Eutéctico

En la **Tabla 2** se presentan cuatro SE, cada uno compuesto por una molécula aceptora de enlaces de hidrógeno (HBA) y una molécula donadora de enlaces de hidrógeno (HBD), con proporciones variables de estas. Las combinaciones de HBA - HBD y la variación de la concentración molar permiten mejorar las propiedades de estos solventes y adaptarlos para satisfacer las necesidades específicas de diversos procesos (Prabhune & Dey, 2023).

**Tabla 2**

*Matriz cualitativa con indicadores para diferentes solventes eutécticos*

Solvente eutéctico	SE 1: ChCl: U (Relina)	SE 2: ChCl: EG (Etalina)	SE 3: ChCl: Gly (Glicelina)	SE 4: ChCl: MEA
--------------------	------------------------	--------------------------	-----------------------------	-----------------

<b>HBA</b>	Cloruro de colina	Cloruro de colina	Cloruro de colina	Cloruro de colina
<b>HBD</b>	Urea	Etilenglicol	Glicerol	MEA
<b>Relación molar HBA: HBD</b>	1:2	1:2	1:2	1:5
<b>Solubilidad / Afinidad con el CO<sub>2</sub> en fracción molar P: [0.1-6] Mpa T: [298-353] K</b>	0.126 - 0.48	0.083 - 0.452	0.113 - 0.545	0.0044- 0.5
<b>Costo USD/Kg</b>	Cloruro de colina: 98.69 Urea: 15.96	Cloruro de colina: 98.69 Etilenglicol: 54.48	Cloruro de colina: 98.69 Glicerol: 51.59	Cloruro de colina: 98.69 MEA: 250
<b>Disponibilidad</b>	Alta	Alta	Alta	Alta
<b>Impacto ambiental y en la salud</b>	Ambiental: Bajo Salud: Bajo	Ambiental: Medio Salud: Alto	Ambiental: Bajo Salud: Bajo	Ambiental: Alto Salud: Alto
<b>Condiciones de desorción y Cantidad de energía y</b>	P: [0.1 -1.5] Mpa T: [373.15 – 473.15] K E: 0.92 GJ ton CO <sub>2</sub> -1	NI (no hay información)	NI (no hay información)	P: [0.1 -1.5] Mpa T: [373.15 – 473.15] K E: 4,04 GJ ton CO <sub>2</sub> -1
<b>Referencias</b>	(Alioui et al., 2020a; Biswas et al., 2023a; Fan et al., 2016; Huan et al., 2022; Isaifan & Amhamed, 2018; Leron &	(Alioui et al., 2020b; Biswas et al., 2023a; Grupo PCC, 2022; Hayler & Perkin,	(Ali et al., 2019; Alioui et al., 2020b; Biswas et al., 2023a; Huanget al., 2017; Jamshaid & Ahmed, 2022; Leron & Li,	(Adeyemi et al., 2017; Ali et al., 2019; Galindo et al., 2012; Huang et al., 2017; Mahi et al., 2019; Naseem

	Li, 2013; Ma et al., 2018; Romero-García et al., 2024)	2022; Leron & Li, 2013)	2013; Sze et al., 2014)	et al., 2020; Sakwattanapong et al., 2005; Y. Zhang et al., 2014)
--	--	-------------------------	-------------------------	---

El cloruro de colina se ha estudiado ampliamente en los últimos años y se ha utilizado como HBA en la preparación de distintos SE, de hecho, el cloruro de colina conurea fue descubierto en 2003, por el cual se les dio el nombre de SE después de estudiar sus puntos de fusión (Huang et al., 2017). Algunos estudios han demostrado que estos solventes basados en sales de colina son candidatos prometedores para la separación de CO<sub>2</sub>, ya que tienen una alta solubilidad en CO<sub>2</sub> (Adeyemi et al., 2017; Haider et al., 2018; Huan et al., 2022). Además, los SE basados en colina se consideran más ecológicos y benignos para la separación de CO<sub>2</sub> que las aminas tradicionales y los líquidos iónicos convencionales debido a su biodegradabilidad, no toxicidad y bajo precio (K. Zhang et al., 2018).

En la búsqueda de literatura se encontraron más solventes eutécticos, sin embargo, la información sobre estos era escasa. Es por esto, que el cloruro de colina fue considerado en la presente investigación como el aceptor de enlaces de hidrógeno (HBA) para todos los solventes eutécticos presentados en la matriz, mientras que los donadores de enlaces de hidrógeno (HBD) varían, siendo la urea, el etilenglicol, el glicerol o glicerina, y la Monoetanolamina, los seleccionados para ser evaluados mediante los indicadores: afinidad con el CO<sub>2</sub>, costo, disponibilidad comercial, impacto ambiental y en la salud, y cantidad de energía necesaria para la regeneración del solvente.

Con la información obtenida en la Tabla 2 se diligenció la Tabla 3, la cual es una matriz cuantitativa en la que se asignaron valores a diferentes indicadores (ver Metodología). Para más

información sobre el contenido bibliográfico presente en la matriz y su respectiva justificación consulte el **Apéndice C**.

**Tabla 3**

*Matriz cuantitativa con solventes eutécticos e indicadores*

Solvente eutéctico	SE 1: ChCl:U (Relina)	SE 2: ChCl:E (Etalina)	SE 3: ChCl:Gly (Glicelina)	SE 4: ChCl:MEA
<b>Solubilidad</b>	5	5	5	5
<b>Costo USD/Kg</b>	5	5	3	1
<b>Disponibilidad</b>	5	2,5	2,5	5
<b>Impacto ambiental y en la salud</b>	5	25	5	1
<b>Condiciones de desorción y Cantidad de energía</b>	5	1	1	1
<b>Puntaje total</b>	25	16	16,5	13

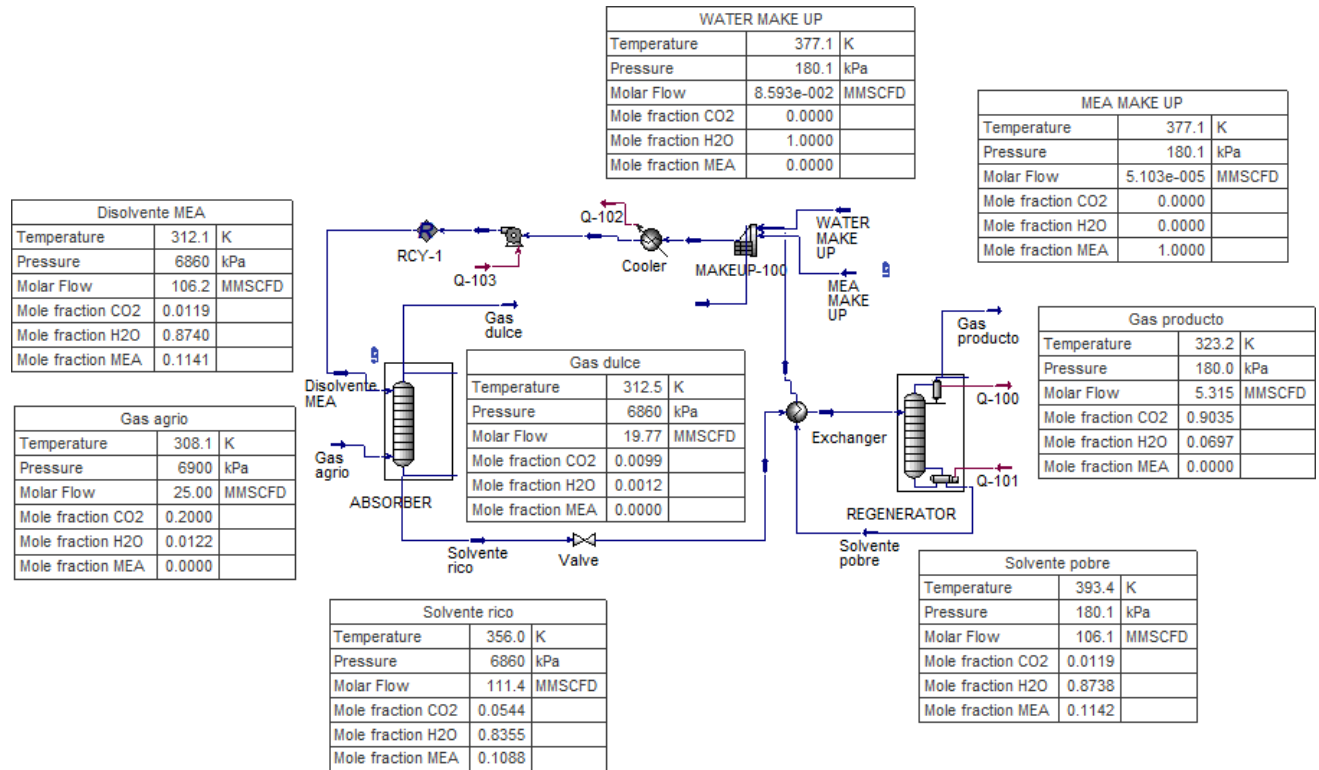
Según la **Tabla 3** o matriz de indicadores, el SE con mayor puntuación y por lo tanto seleccionado para la simulación y el análisis de la captura de CO<sub>2</sub> fue el cloruro de colina con urea (SE1), obteniendo una puntuación total de 25.

## 6.2 Simulación del Caso Base

En la **Figura 4** se muestra el PFD de la simulación realizada con la MEA como solvente, en convergencia. En la figura también se muestran las condiciones de entrada y salida de las corrientes de proceso. En el **Apéndice D** se detallan los datos de cada corriente.

**Figura 4**

Diagrama base del proceso de captura de CO<sub>2</sub> con disolvente MEA



Como se observa en la **Figura 4**, el gas agrio con una composición del 20% molar de CO<sub>2</sub> es tratado mediante una solución acuosa de MEA en un proceso de absorción a contracorriente. A medida que el gas asciende en el absorbedor, el CO<sub>2</sub> es disuelto en la MEA acuosa, reduciendo su concentración en la fase gaseosa a 0.99% mol. Las condiciones de la corriente de salida del gas (gas dulce) son 312.5 K, 68.60 bar y un flujo de 19.77 MMSCFD.

Por otro lado, la corriente líquida (solvente rico), que corresponde a la MEA cargada con CO<sub>2</sub>, sale por la parte inferior del absorbedor. Esta corriente presenta una composición del 5.44% mol de CO<sub>2</sub>, una temperatura de 356 K, una presión de 68.60 bar y un flujo de 111.4 MMSCFD.

El porcentaje de absorción de CO<sub>2</sub> reportado por la simulación fue del 82.42% en peso, lo cual es consistente con los resultados obtenidos por (Rincón Ocampo & Mejía Díaz, 2023) . La **Tabla 4** resume los resultados obtenidos en el presente documento. Las diferencias respecto al trabajo de (Akinola et al., 2019) se deben principalmente a datos faltantes no descritos por estos autores, relacionados con las configuraciones de las torres; estos datos fueron asumidos en el presente documento. Por otra parte, los resultados obtenidos con la simulación son similares a los reportados por (Rincón Ocampo & Mejía Díaz, 2023), quienes también trabajaron el sistema propuesto por (Akinola et al., 2019).

**Tabla 4**

*Resultados obtenidos con la simulación de captura de CO<sub>2</sub> utilizando la MEA como solvente*

<b>Variable</b>	<b>Este trabajo</b>	<b>Rincón Ocampo y Mejía Díaz. 2023</b>	<b>Akinola et al. 2019</b>	<b>Unidades</b>
<b>Solvente pobre</b>	120 171	120 223	122 931	Kg/h
<b>Carga de CO<sub>2</sub> en amina rica</b>	0.5004	0.498	0.59	kmol CO <sub>2</sub> /kmol solvente
<b>Carga de CO<sub>2</sub> en amina pobre</b>	0.1042	0.102	0.18	kmol CO <sub>2</sub> /kmol solvente
<b>L/G</b>	4.390	4.389	4.37	Kg/kg
<b>Requerimiento energético de la bomba</b>	0.3844	0.394	0.12	GJ/t CO <sub>2</sub>
<b>Requerimiento neto energético del proceso</b>	4.600	4.591	4.5	GJ/t CO <sub>2</sub>
<b>Temperatura del solvente rico</b>	82.88	83.825	80	°C
<b>Temperatura del rehervidor</b>	120.2	120.2	120	°C
<b>Solvente de reposición</b>	5.810	6.588	33.28	Kg/t CO <sub>2</sub>

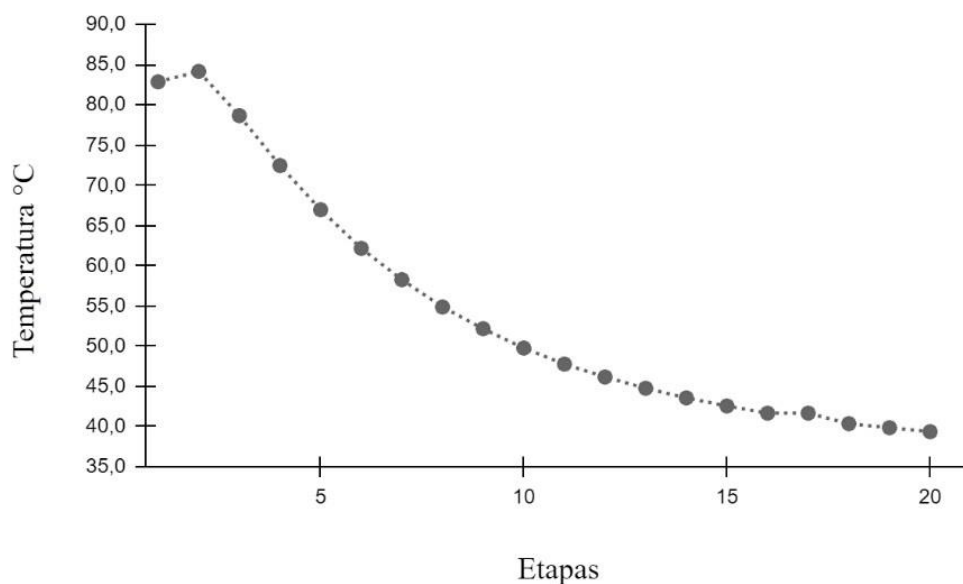
<b>Agua de enfriamiento</b>	2894.06	2874.77	1958.59	t/h
-----------------------------	---------	---------	---------	-----

### 6.2.1 Perfiles de Temperatura en las Torres

En la **Figura 5** se observa la variación de la temperatura a lo largo de las distintas etapas de la torre absorbente según resultados de simulación. Con esta figura, en el fondo de la torre, se registra la temperatura más alta, alcanzando un valor máximo cercano a los 85 °C. Este pico de temperatura corresponde al punto en el que se produce la mayor liberación de calor debido a la reacción entre el CO<sub>2</sub> y el MEA. A medida que el proceso avanza y el gas asciende por la torre, la temperatura desciende gradualmente. Este comportamiento se debe a la transferencia de calor entre el gas absorbido y el solvente, así como a la disipación de energía a lo largo de las etapas superiores. Finalmente, en las etapas superiores, la temperatura alcanza su valor mínimo en 40 °C.

#### Figura 5

*Perfil de temperatura en la torre absorbedora - MEA*

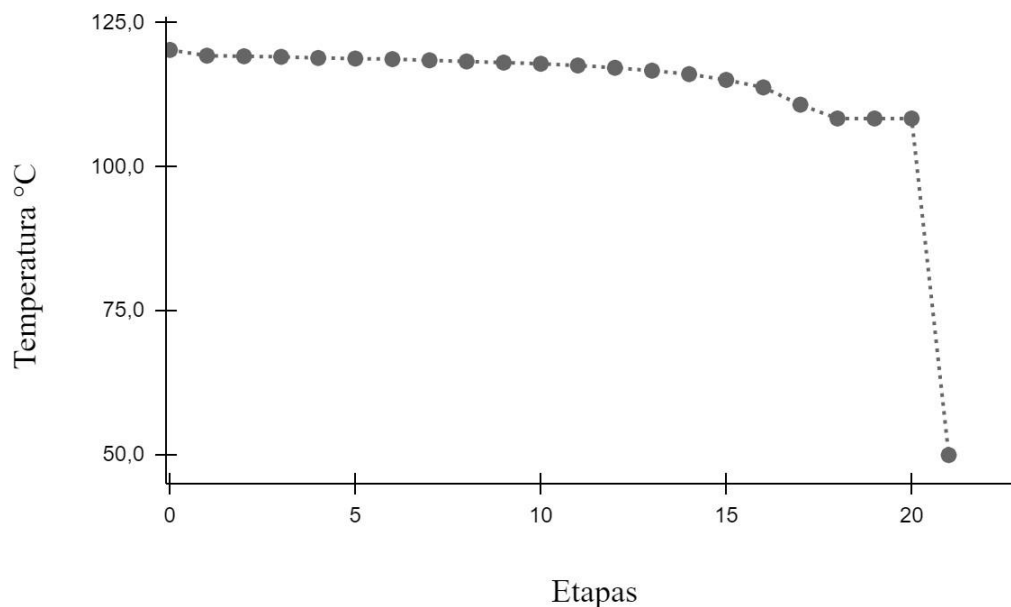




La **Figura 6** presenta el perfil de temperatura a lo largo de las etapas de la torre regeneradora. La etapa 0 corresponde al rehervidor y presenta la temperatura más alta, cercana a los 120 °C. Este proporciona el calor necesario para la desorción del gas. A medida que avanzan las etapas, la temperatura permanece relativamente constante, con una ligera disminución conforme el proceso de desorción se completa y la concentración de CO<sub>2</sub> disminuye. La última etapa corresponde al condensador, para el cual se establece una temperatura 50 °C, requerida para disminuir las pérdidas de MEA por evaporación. Es importante mencionar que los perfiles obtenidos para las torres en la simulación con MEA coinciden con diferentes reportes de literatura, relacionados con el endulzamiento de gas natural (Reyes et al., 2023; Rincón Ocampo & Mejía Díaz, 2023).

### Figura 6

*Perfil de temperatura en la torre regeneradora - MEA*



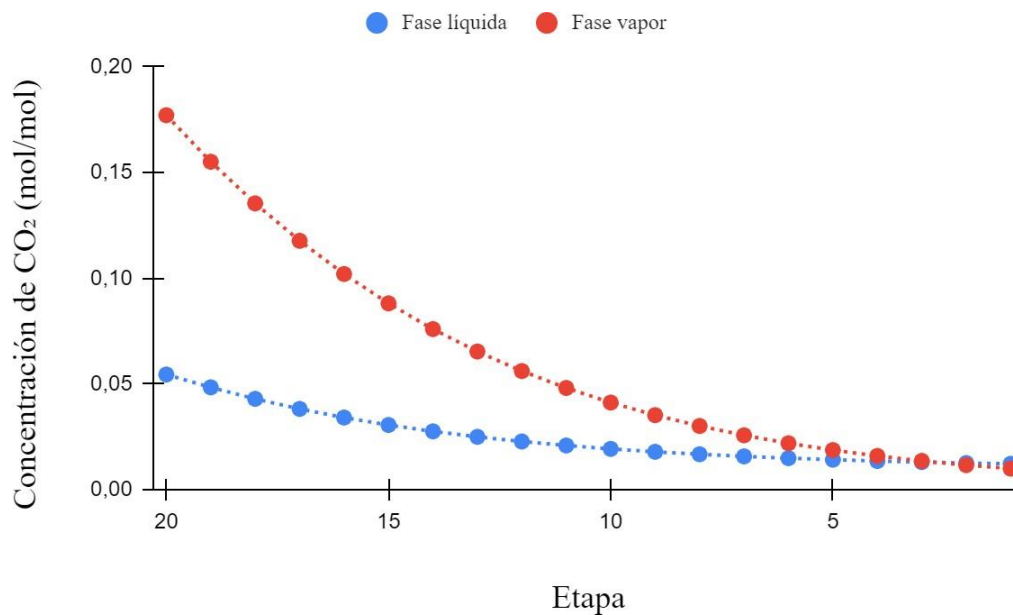
### 6.2.2 Perfiles de concentración en las torres para la simulación de captura de CO<sub>2</sub> con MEA

Las **Figura 7** y **Figura 8** ilustran el comportamiento de la concentración de CO<sub>2</sub> en las fases líquida y gaseosa para las torres absorbedora y regeneradora. En la torre absorbedora, la

concentración de CO<sub>2</sub>, tanto en el gas como en la solución acuosa, disminuye desde el fondo hacia la parte superior, lo que evidencia un proceso de absorción química a contracorriente (**Figura 7**). En la torre regeneradora (destilación), la mayor concentración de CO<sub>2</sub> en la fase vapor se registra en la parte superior, como resultado del proceso de desorción del CO<sub>2</sub> retenido en el solvente (**Figura 8**). El punto de concentración máxima coincide con la etapa del condensador, donde el CO<sub>2</sub> alcanza un valor del 92,83% peso. Los datos de los perfiles de concentración para la captura con MEA coinciden con los resultados presentados en la literatura (Erdmann et al., 2012; Rincón Ocampo & Mejía Díaz, 2023).

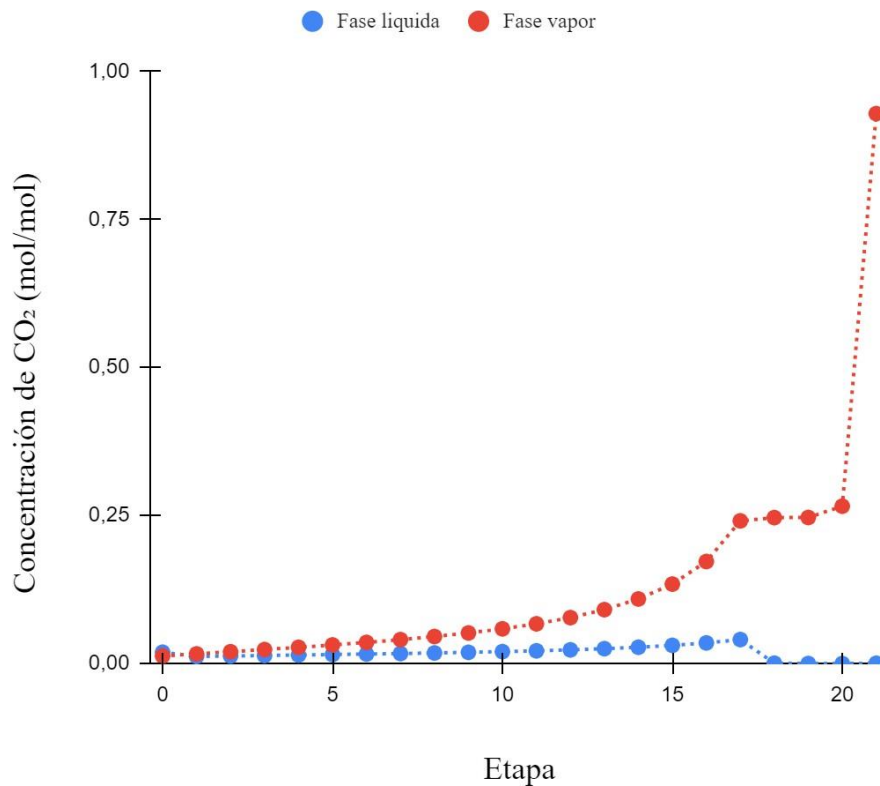
### Figura 7

*Perfil de concentración de CO<sub>2</sub> en la torre absorbedora - MEA*



### Figura 8

*Perfil de concentración de CO<sub>2</sub> en la torre regeneradora - MEA*



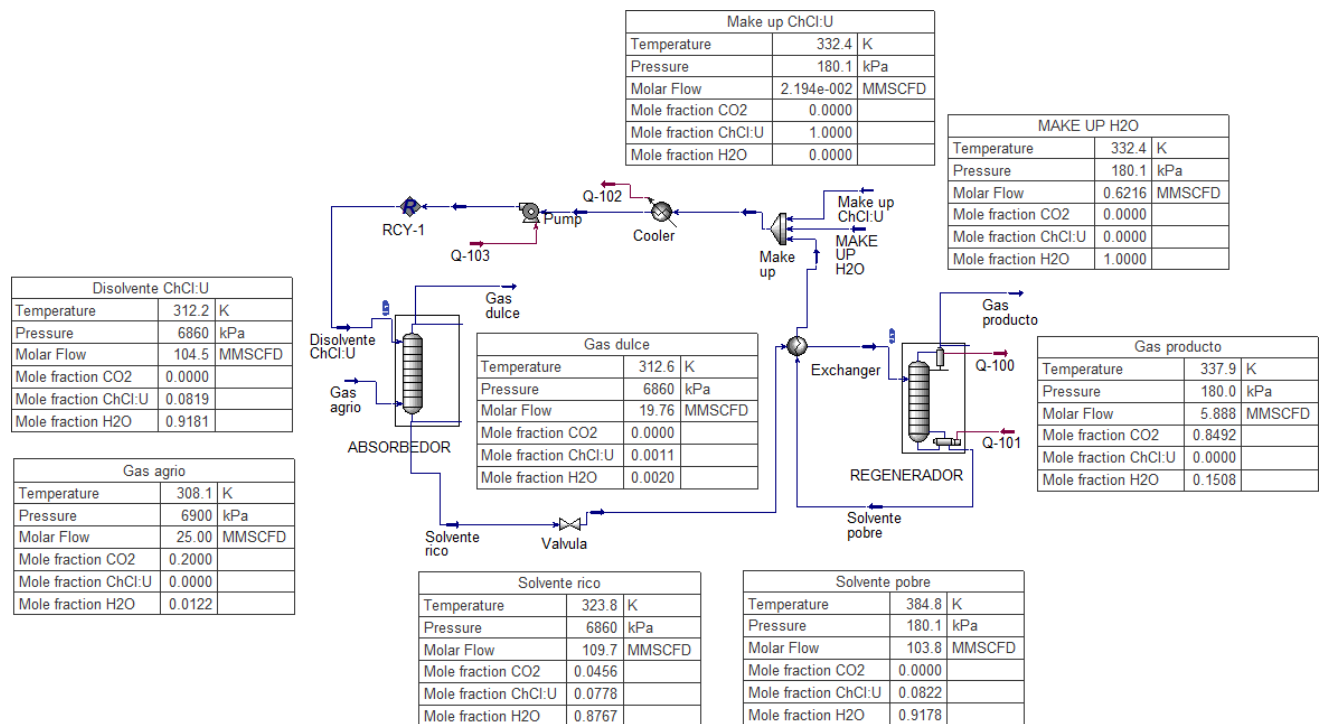
### 6.3 Análisis de la Captura con el DES

En el **Apéndice E**, se detallan los valores obtenidos en el simulador para las propiedades del solvente en función de la temperatura. Los perfiles de variación para la densidad, la viscosidad, la tensión superficial y la capacidad calorífica reproducidos por Aspen HYSYS presentan concordancia con los reportados en la literatura (**Apéndice E**).

Tal como se menciona en la Actividad 1 de la sección 5.3 de la metodología, el diagrama de Flujo de Proceso (PFD) desarrollado en la sección 6.2 fue modificado para incluir la mezcla eutéctica de cloruro de colina y urea (ChCl: U) en una proporción de 1:2 al 30% en solución acuosa, como fluido absorbente. En la **Figura 9**, se presenta el PFD modificado, junto con las condiciones de entrada y salida del proceso.

**Figura 9**

Diagrama modificado del proceso de captura de CO<sub>2</sub> con ChCl:U (1:2)



Según los datos de la **Figura 9**, el gas agrio que ingresa con un flujo de 10.959,99 kg/h y una composición molar de 20% de CO<sub>2</sub>, es endulzado por tratamiento con la mezcla ChCl:U hasta una reducción de la concentración de CO<sub>2</sub> de un 0.00% mol (temperatura de 312.6 K, presión de 68.60 bar y flujo de 19.76 MMSCFD). Por otro lado, en la corriente de solvente rico presenta un flujo de 10.959,99 kg/h, una concentración de CO<sub>2</sub> de 4.56% mol, a una temperatura de 323.8 K, una presión de 68.60 bar y un flujo de 109.7 MMSCFD. Estos resultados indican un porcentaje de absorción de CO<sub>2</sub> del 100%.

La **Tabla 5** compara los resultados entre el caso base con MEA y el caso modificado con ChCl:U, obtenidos por la simulación desarrollada en Aspen HYSYS. Según esta tabla, la captura con el SE ChCl:U presenta una mayor absorción de CO<sub>2</sub> y un menor requerimiento energético. El requerimiento de energía en el enfriador (Cooler, **Figura 4** y **Figura 9**) disminuye de 30.35 GJ/h

con el uso de MEA a 9.504 con el uso del SE, representando una disminución del 68.6%, así mismo, la energía de la bomba, la energía del proceso y el agua de enfriamiento disminuyen 73.8 %, 20.5% y 36.7% respectivamente. Sin embargo, el uso de este SE reporta un mayor requerimiento de solvente, así como agua de reposición o make up.

**Tabla 5**

*Comparación entre el caso base con MEA como solvente y el caso modificado con ChCl:U (1:2)*

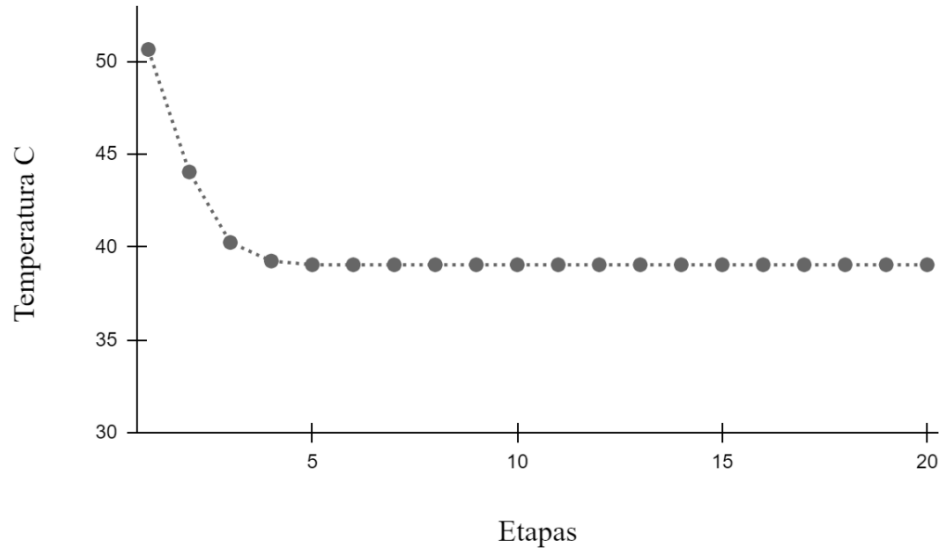
Variable	Caso MEA	Caso modificado ChCl:U	Unidades
Porcentaje de absorción de CO <sub>2</sub>	82.42	100	%
<i>Duty cooler</i>	30.35	9.504	GJ/h
Requerimiento energético de la bomba	0.3844	0.1004	GJ/t CO <sub>2</sub>
Requerimiento energético del proceso	4.600	3.653	GJ/t CO <sub>2</sub>
Porcentaje de solvente regenerado	100	99.99	%
<i>Make up</i> de solvente	4.3126e-005	2.629e-002	kg/s
<i>Make up</i> de Agua	0.02234	0.1549	kg/s
Agua de enfriamiento	803.90	508.49	kg/s

### 6.3.1 Perfiles de Temperatura en las Torres

Como se observa en la **Figura 10**, el perfil de temperatura de la torre absorbadora resultante de la simulación de la captura de CO<sub>2</sub> con el SE resulta inferior al obtenido con el uso de la MEA acuosa. Esto se debe a que la captura con SE es realizada por medio de un modelo de absorción física, mientras la captura con MEA envuelve un modelo de absorción química. La temperatura es más elevada en el fondo (etapas 1 a 4) como resultado de la liberación del calor de disolución del CO<sub>2</sub> en el SE. Después de la etapa #5, la temperatura es estabilizada debido a la absorción de calor sensible y latente por parte del SE.

**Figura 10**

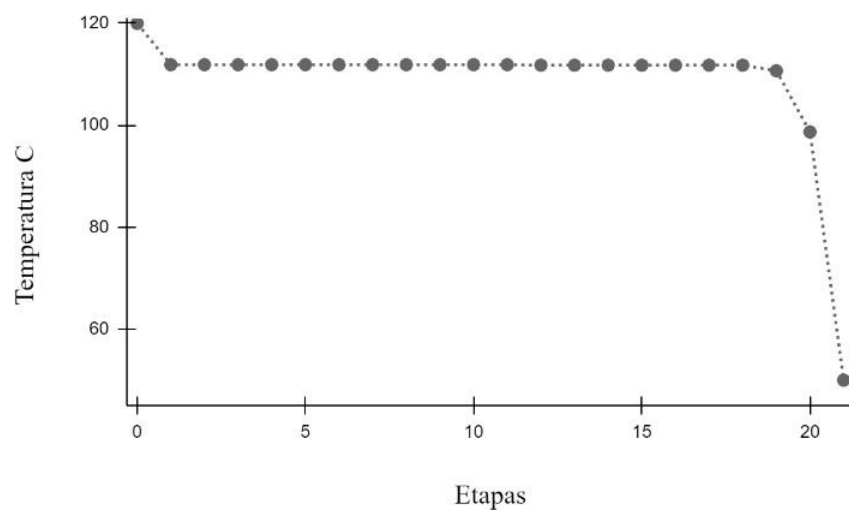
*Perfil de temperatura en la torre absorbedora – ChCl: U (1:2)*



Según la **Figura 11**, en la torre regeneradora el perfil de temperatura resultante de la simulación con el SE es similar al perfil de la simulación con MEA (caso base). La torre en operación con ChCl: U exhibe regiones de estabilidad térmica; se presenta un comportamiento constante de la temperatura hasta la etapa 18 como se observa en la **Figura 11**.

**Figura 11**

*Perfil de temperatura en la torre regeneradora – ChCl: U (1:2)*

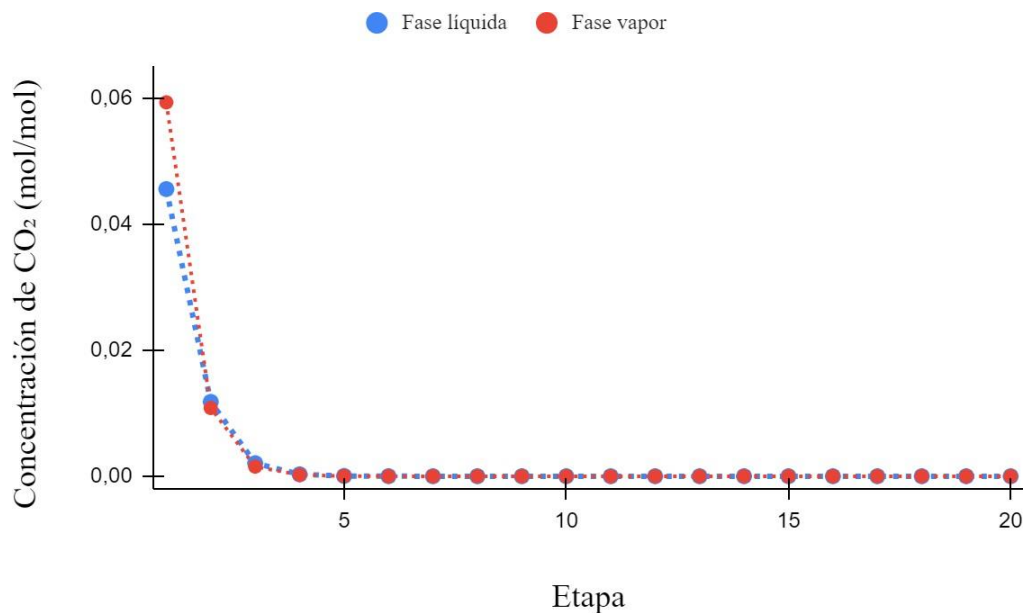


### 6.3.2 Perfiles de Concentración

La **Figura 12** exhibe los perfiles de concentración para la captura con solución acuosa de ChCl: U, según los resultados de simulación. Con esta figura es posible afirmar que las concentraciones de CO<sub>2</sub> permanecen cercanos a cero a partir de la etapa 5. Comparando con los resultados obtenidos con MEA (**Figura 7**) es posible mencionar que el tamaño de la torre es menor para el caso de captura con ChCl: U; i.e. el número de etapas requeridas para alcanzar una captura satisfactoria de CO<sub>2</sub> con ChCl: U es inferior al requerido por la MEA.

#### Figura 12

*Perfil de Concentración de CO<sub>2</sub> en la torre absorbadora – ChCl:U (1:2)*

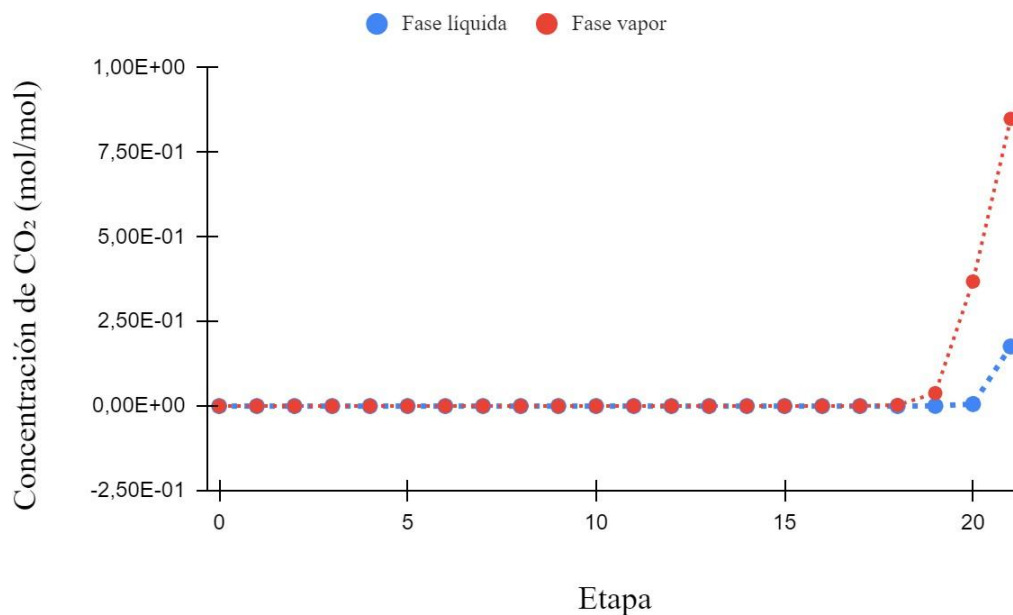


Asimismo, en la **Figura 13** se puede observar que el perfil de concentración en la torre regeneradora, exhibiendo valores cercanos a cero para etapas inferiores a la #18. En la fase líquida, la concentración de CO<sub>2</sub> es casi cero en todas las etapas, alcanzando su valor más alto en el condensador. Por otro lado, en la fase vapor, la concentración aumenta a partir de la etapa 18, logrando su punto máximo también en el condensador. Esta tendencia se debe a la

liberación rápida del CO<sub>2</sub> con la elevación de la temperatura. Al igual que para la torre absorbedora, la simulación muestra que la torre regeneradora del SE ChCl: U rico en CO<sub>2</sub> requiere un menor número de platos para una operación efectiva. Basado en lo anterior, una validación experimental de los resultados obtenidos por simulación en Aspen HYSYS de la captura de CO<sub>2</sub> con ChCl: U en solución acuosa es requerida para el diseño y el escalamiento del proceso industrial.

### Figura 13

*Perfil de Concentración de CO<sub>2</sub> en la torre regeneradora - ChCl: U (1:2)*



Finalmente, para responder la pregunta de investigación planteada, los resultados de las simulaciones realizadas en Aspen HYSYS muestran que la mezcla de cloruro de colina con urea en una relación de 1:2 puede operar bajo condiciones similares a una unidad industrial con MEA. Estas condiciones corresponden a: temperatura del solvente de 312.15 K, presión de 6860 kPa y un flujo de 34.15 kg/s. Asimismo, para el caso de captura con ChCl:U las condiciones de operación de la torre absorbente y la regeneradora presentan bajas temperaturas



y mayores eficiencias que para el caso base con la MEA, presentando mayor absorción de CO<sub>2</sub>. Por otro lado, al analizar los perfiles de concentración, se evidencia que las torres industriales que operan con MEA pueden estar sobredimensionadas para la operación con ChCl:U, ya que la concentración de CO<sub>2</sub> en el absorbedor es casi cero después de la etapa 5, y en el regenerador, se aproxima a cero entre las etapas 1 y 18.

## 7. Conclusiones

Los solventes eutécticos reportados en la literatura revisada para la captura de CO<sub>2</sub>, coinciden en el uso del cloruro de colina (ChCl) para la formación de solventes eutécticos. Al comparar parámetros clave como costos, disponibilidad, afinidad de absorción, impacto ambiental y energía requerida para la regeneración, se concluyó que el solvente eutéctico ChCl:Urea en proporción 1:2 reportó la mayor puntuación. Esto se debe a que cumple de manera óptima con estos criterios, destacándose por su bajo costo, disponibilidad, alta capacidad de captura de CO<sub>2</sub>, menor impacto ambiental y mayor eficiencia energética en el proceso de regeneración.

Los resultados obtenidos con la simulación base en Aspen HYSYS del proceso de captura de CO<sub>2</sub> con MEA fueron validados comparándolos con reportes de la literatura, encontrando una alta concordancia entre los datos simulados y los valores publicados en estudios previos.

Al contrastar los desempeños por simulación en Aspen HYSYS de la captura de CO<sub>2</sub> es posible concluir que, el solvente eutéctico ChCl:U en solución acuosa mostró una mayor eficiencia que la obtenida con el uso de la MEA.

Según las simulaciones, la operación del proceso de captura con el solvente eutéctico ChCl:U en solución acuosa reportó un menor consumo energético comparado con el uso de MEA, tanto en

el proceso general como en los equipos asociados, como la bomba y el enfriador.

La simulación de la captura de CO<sub>2</sub> con ChCl:U en solución acuosa sugiere que la operación requiere un mayor flujo de las corrientes de reposición, tanto de solvente como de agua, comparado con el caso con MEA. No obstante, los resultados de simulación indican que la alta eficiencia en la absorción y en la regeneración del solvente eutéctico, así como su menor impacto ambiental, sugieren que la mezcla ChCl:U en solución acuosa corresponde a una alternativa industrial para la captura de CO<sub>2</sub>.

## **8. Recomendaciones**

Para futuras investigaciones, se recomienda ampliar la gama de solventes eutécticos utilizados en el proceso, así como llevar a cabo un estudio económico que incluya los costos de capital, operación y mantenimiento.

Adicionalmente, se sugiere realizar ensayos con el mismo solvente eutéctico, pero en proporciones alternativas, a fin de optimizar su rendimiento.

Es fundamental evaluar la viabilidad de escalar el proceso a nivel industrial, empleando el solvente eutéctico seleccionado, considerando tanto los aspectos técnicos como económicos inherentes a una implementación a gran escala fundamentados en resultados experimentales.

### Referencias

- Abraham, T. W., & Höfer, R. (2012). Lipid-Based Polymer Building Blocks and Polymers. *Polymer Science: A Comprehensive Reference: Volume 1-10*, 1–10, 15–58. <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-53349-4.00253-3>
- Adeyemi, I., Abu-Zahra, M. R. M., & Alnashef, I. (2017). Experimental Study of the Solubility of CO<sub>2</sub> in Novel Amine Based Deep Eutectic Solvents. *Energy Procedia*, 105, 1394–1400. <https://doi.org/10.1016/J.EGYPRO.2017.03.519>
- Agencia de protección ambiental de Estados Unidos [EPA]. (2024, May 30). Emisiones de dióxido de carbono | US EPA. <https://espanol.epa.gov/la-energia-y-el-medioambiente/emisiones-de-dioxido-de-carbono>
- Ainai, Y., Taniguchi, A., Yokoyama, C., & Kodama, D. (2023). Density, Viscosity, and CO<sub>2</sub> Solubility of a Deep Eutectic Solvent Comprising Choline Chloride and Ethylene Glycol. *Journal of Chemical and Engineering Data*, 68(9), 2283–2295. <https://doi.org/10.1021/ACS.JCED.3C00222>
- Akinola, T. E., Oko, E., & Wang, M. (2019). Study of CO<sub>2</sub> 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>
- Ali, H., Khan, E., & Ilahi, I. (2019). Environmental Chemistry and Ecotoxicology of Hazardous Heavy Metals: Environmental Persistence, Toxicity, and Bioaccumulation. *Journal of Chemistry*, 2019(1), 6730305. <https://doi.org/10.1155/2019/6730305>

Alioui, O., Benguerba, Y., & Alnashef, I. M. (2020a). Investigation of the CO<sub>2</sub>-solubility in deep eutectic solvents using COSMO-RS and molecular dynamics methods. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2020.113005>

Ana Caballero. (2023, April 27). Captura de carbono: ¿qué es y cómo funciona? <https://climate.selectra.com/es/huella-carbono/captura>

Aragón Tobar, C. F. (2022). Evaluación de la aplicación de disolventes eutécticos profundos basados en cloruro de colina para la lixiviación de metales (Cu, Pb, Fe y Zn) provenientes de un concentrado polimetálico. ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL.

AULA21. (2024). Qué es la simulación de procesos industriales y cómo se realiza. <https://www.cursosaula21.com/que-es-la-simulacion-de-procesos-industriales/>

BBVA. (2024, August 28). ¿Qué es el dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) y cómo impacta en el planeta? <https://www.bbva.com/es/sostenibilidad/que-es-el-dioxido-de-carbono-co2-y-como-impacta-en-el-planeta/>

Betancourt Aguilar, C., Silva Campos, C. N., de Mello Prado, R., & Castellanos Gonzáles, L. (n.d.). GLYCERIN AS BYPRODUCT OF BIODIESEL PRODUCTION, ITS CHARACTERISTICS, APPLICATIONS AND SOIL USE. <https://doi.org/10.13140/RG.2.1.4329.2403>

Bharadvaja, A., Kaur, S., & Baluja, K. L. (2020). Electron-impact cross-sections of atmospherically relevant amines from intermediate to 5000 eV energy range. *Pramana - Journal of Physics*, 94(1). <https://doi.org/10.1007/S12043-020-1923-Z>

- Biswas, R., Metya, A. K., Abebe, K. M., Gedf, S. A., & Melese, B. T. (2023a). Carbon dioxide solubility in choline chloride-based deep eutectic solvents under diverse conditions. *Journal of Molecular Modeling*, 29(8), 1–13. <https://doi.org/10.1007/S00894-023-05643-Z/TABLES/7>
- Blamis. (2024). Etilenglicol P.A. Emsure® Reag. Ph Eur,Reag. Usp (11). <https://blamis.com.co/etilenglicol-p-a-emsurer-reag-ph-eur-reag-usp-11>
- César, P., & Palacio, T. (2021a). Síntesis, propiedades, caracterización y aplicaciones químicas de novedosos disolventes eutécticos profundos: DES (Deep Eutectic Solvents).TDX (Tesis Doctorals En Xarxa). <https://www.tdx.cat/handle/10803/673075>
- Droguería Cosmopolita. (2024). UREA PURA [500 g], Cosmotienda. <https://www.cosmotienda.com/tienda/urea-pura-500-p-3634.html>
- Dubois, L., & Thomas, D. (2018). Comparison of various configurations of the absorption-regeneration process using different solvents for the post-combustion CO<sub>2</sub> capture applied to cement plant flue gases. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 69, 20–35. <https://doi.org/10.1016/J.IJGGC.2017.12.004>
- El Establo Colombia. (2024). UREA AGRICOLA 46-0-0 50KG - El Establo Colombia. <https://elestablocolombia.com/tienda/producto/urea-agricola-46-0-0-50kg/>
- Erdmann, E., Ruiz, L. A., Martínez, J., Gutierrez, J. P., & Tarifa, E. (2012). Endulzamiento de gas natural con aminas. Simulación del proceso y análisis de sensibilidad paramétrico natural gas sweetening with amines. Process simulation and parametric Sensitivity analysis. In *av. Cien. Ing* (vol. 3, issue 4). Octubre/diciembre. [http://www.exeedu.com/publishing.cl/av\\_cienc\\_ing/89](http://www.exeedu.com/publishing.cl/av_cienc_ing/89)

- Fan, W., Liu, Y., & Wang, K. (2016). Detailed experimental study on the performance of Monoethanolamine, Diethanolamine, and Diethylenetriamine at absorption/regeneration conditions. *Journal of Cleaner Production*, 125, 296–308. <https://doi.org/10.1016/J.JCLEPRO.2016.03.144>
- Fisher Scientific. (2024a). Cloruro de colina, +99 %, Thermo Scientific Chemicals | Fisher Scientific. <https://www.fishersci.es/shop/products/choline-chloride-99-thermo-scientific/10715561>
- Foorginezhad, S., & Ji, X. (2024). Development of Monoethanolamine Chloride-Ethylene Diamine Deep Eutectic Solvent for Efficient Carbon Dioxide Capture. *Separation and Purification Technology*, 347, 127593. <https://doi.org/10.1016/J.SEPPUR.2024.127593>
- Fu, D., Wang, L. M., Zhang, P., & Mi, C. L. (2016). Solubility and viscosity for CO<sub>2</sub> capture process using MEA promoted DEAE aqueous solution. *The Journal of Chemical Thermodynamics*, 95, 136–141. <https://doi.org/10.1016/J.JCT.2015.12.001>
- Galindo, P., Schäffer, A., Brechtel, K., Unterberger, S., & Scheffknecht, G. (2012). Experimental research on the performance of CO<sub>2</sub>-loaded solutions of MEA and DEA at regeneration conditions. *Fuel*, 101, 2–8. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2011.02.005>
- Gardenianaturals.(2024).Monoetanolamina. <https://www.gardenianaturals.com.mx/productos/monoetanolamina-2final/>
- Gheni, S. A., Ali, M. M., Ta, G. C., Harbin, H. J., & Awad, S. A. (2024). Toxicity, Hazards, and Safe Handling of Primary Aromatic Amines. *ACS Chemical Health and Safety*, 31(1), 8–

21. [https://doi.org/10.1021/ACS.CHAS.3C00073/SUPPL\\_FILE/HS3C00073\\_SI\\_001](https://doi.org/10.1021/ACS.CHAS.3C00073/SUPPL_FILE/HS3C00073_SI_001).

PDF

Gouedard, C., Picq, D., Launay, F., & Carrette, P. L. (2012). Amine degradation in CO<sub>2</sub> capture.

I. A review. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 10, 244–270.

<https://doi.org/10.1016/J.IJGGC.2012.06.015>

Grupo PCC. (2022, April 22). Etilenglicol - propiedades y usos | Grupo PCC.

<https://www.products.pcc.eu/es/blog/propiedades-y-usos-del-etilenglicol/>

Gutierrez, J. P., Erdmann, E., & Manca, D. (2019). Optimal Design of a Carbon Dioxide

Separation Process with Market Uncertainty and Waste Reduction. *Processes* 2019, Vol.

7, Page 342, 7(6), 342. <https://doi.org/10.3390/PR7060342>

Haider, M. B., Jha, D., Marriyappan Sivagnanam, B., & Kumar, R. (2018). Thermodynamic and

Kinetic Studies of CO<sub>2</sub> Capture by Glycol and Amine-Based Deep Eutectic

Solvents. *Journal of Chemical and Engineering Data*, 63(8), 2671–

2680. [https://doi.org/10.1021/ACS.JCED.8B00015/ASSET/IMAGES/LARGE/2018-](https://doi.org/10.1021/ACS.JCED.8B00015/ASSET/IMAGES/LARGE/2018-00015K_0015.JPEG)

[00015K\\_0015.JPEG](https://doi.org/10.1021/ACS.JCED.8B00015/ASSET/IMAGES/LARGE/2018-00015K_0015.JPEG)

Hayler, H. J., & Perkin, S. (2022). The eutectic point in choline chloride and ethylene glycol

mixtures. *Chemical Communications*, 58(91), 12728–

12731. <https://doi.org/10.1039/D2CC04008E>

Hizaddin, H. F., Hadj-Kali, M. K., Alnashef, I. M., Mjalli, F. S., & Hashim, M. A. (2015).

Prediction of CO<sub>2</sub> solubility in ionic liquids using the PSRK model. *The Journal of*

*Supercritical Fluids*, 100, 184–193. <https://doi.org/10.1016/J.SUPFLU.2015.02.009>

Huan, Q., Zhang, Y., Wibowo, H., Xu, Z., Kanchanatip, E., Zhong, L., & Yan, M. (2022). Study

on regeneration characteristics of choline chloride-monoethanolamine deep eutectic solvent after capturing CO<sub>2</sub> from biogas. *Separation and Purification Technology*, 302, 122064. <https://doi.org/10.1016/J.SEPPUR.2022.122064>

Huang, Z., Jiang, B., Yang, H., Wang, B., Zhang, N., Dou, H., Wei, G., Sun, Y., & Zhang, L. (2017). Investigation of glycerol-derived binary and ternary systems in CO<sub>2</sub> capture process. *Fuel*, 210, 836–843. <https://doi.org/10.1016/J.FUEL.2017.08.043>

Isaifan, R. J., & Amhamed, A. (2018). Review on Carbon Dioxide Absorption by Choline Chloride/Urea Deep Eutectic Solvents. *Advances in Chemistry*, 2018, 1–6. <https://doi.org/10.1155/2018/2675659>

Jamshaid, S., & Ahmed, D. (2022). Optimization of ultrasound-assisted extraction of valuable compounds from fruit of *Melia azedarach* with glycerol-choline chloride deep eutectic solvent. *Sustainable Chemistry and Pharmacy*, 29, 100827. <https://doi.org/10.1016/J.SCP.2022.100827>

Leron, R. B., & Li, M. H. (2013). Solubility of carbon dioxide in a choline chloride–ethylene glycol based deep eutectic solvent. *Thermochimica Acta*, 551, 14–19. <https://doi.org/10.1016/J.TCA.2012.09.041>

Liu, F., Chen, W., Mi, J., Zhang, J. Y., Kan, X., Zhong, F. Y., Huang, K., Zheng, A. M., & Jiang, L. (2019). Thermodynamic and molecular insights into the absorption of H<sub>2</sub>S, CO<sub>2</sub>, and CH<sub>4</sub> in choline chloride plus urea mixtures. *Aiche Journal*, 65(5). <https://doi.org/10.1002/AIC.16574>

Ma, C., Xie, Y., Ji, X., Liu, C., & Lu, X. (2018). Modeling, simulation and evaluation of biogas upgrading using aqueous choline chloride/urea. *Applied Energy*, 229, 1269–1283.



<https://doi.org/10.1016/J.APENERGY.2017.03.059>

Mahi, M. R., Mokbel, I., Negadi, L., Dergal, F., & Jose, J. (2019). Experimental solubility of carbon dioxide in monoethanolamine, or diethanolamine or N-methyldiethanolamine(30 wt%) dissolved in deep eutectic solvent (choline chloride and ethylene glycolsolution). *Journal of Molecular Liquids*, 289,

111062.<https://doi.org/10.1016/J.MOLLIQ.2019.111062>

Martínez-Lomovskoi, A., Romero-García, A. G., Sánchez-Ramírez, E., & Segovia- Hernández, J. G. (2023). Design and multi-objective optimization of a CO<sub>2</sub> capture plant using deep eutectic solvents. *Chemical Engineering Research and Design*, 192, 570– 581.

<https://doi.org/10.1016/J.CHERD.2023.03.006>mccabe, W. L., Smith, J. C., Harriott, P.

(1991). Operaciones unitarias en ingeniería química. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 1905.

Mehra, S., Singh, M., & Chadha, P. (2021). Adverse impact of textile dyes on the aquatic environment as well as on human beings. *Toxicology International*, 28(2), 165–176.

<https://doi.org/10.18311/TI/2021/V28I2/26798>

Mestre-Escudero, R., Puerta-Arana, A., & González-Delgado, Á. D. (2020a). Assessment of a sour water treatment unit using process simulation, parametric sensitivity, and exergy analysis. *ACS Omega*, 5(37), 23654–23661.

<https://doi.org/10.1021/ACSOMEGA.0C02300>/ASSET/IMAGES/MEDIUM/AO0C02300\_M008.GIF

Mestre-Escudero, R., Puerta-Arana, A., & González-Delgado, Á. D. (2020b). Process Simulation and Exergy Analysis of a Mercaptan Oxidation Unit in a Latin American Refinery. *ACS Omega*, 5(34), 21428–21436.

[https://doi.org/10.1021/ACSOMEGA.0C01791/ASSET/IMAGES/MEDIUM/AO0C01791\\_M011.GIF](https://doi.org/10.1021/ACSOMEGA.0C01791/ASSET/IMAGES/MEDIUM/AO0C01791_M011.GIF)

Ministerio de ambiente y desarrollo sostenible. (2022, January 28). En promedio, un colombiano emite al año 1,6 toneladas de CO<sub>2</sub> -. <https://www.minambiente.gov.co/en-promedio-un-colombiano-emite-al-ano-16-toneladas-de-co2/>

Mowinckel Corpas Álvaro. (2021). Escuela técnica superior de ingenieros industriales y de telecomunicación universidad de cantabria trabajo fin de grado tratamiento de celulosa dissolving mediante el

Uso de disolventes eutécticos (dissolving cellulose treatment by using deep eutectic solvents). <https://doi.org/10.1007/s10570-020-03465-3>

Naidu, R., Biswas, B., Willett, I. R., Cribb, J., Kumar Singh, B., Paul Nathanail, C., Coulon, F., Semple, K. T., Jones, K. C., Barclay, A., & John Aitken, R. (2021). Chemical pollution: A growing peril and potential catastrophic risk to humanity. *Environment International*, 156, 106616. <https://doi.org/10.1016/j.envint.2021.106616>

Naseem, Z., Zahid, M., Hanif, M. A., & Shahid, M. (2020). Environmentally friendly extraction of bioactive compounds from *Mentha arvensis* using deep eutectic solvent as green extraction media. *Polish Journal of Environmental Studies*, 29(5), 3749–3757. <https://doi.org/10.15244/pjoes/114235>

Pinto, D. D. D., Zahraee, Z., Buvik, V., Hartono, A., & Knuutila, H. K. (2019). Vapor Liquid Equilibrium Measurements of Two Promising Tertiary Amines for CO<sub>2</sub> Capture. *Processes* 2019, Vol. 7, Page 951, 7(12), 951. <https://doi.org/10.3390/PR7120951>

Prabhune, A., & Dey, R. (2023). Green and sustainable solvents of the future: Deep eutectic

solvents. *Journal of Molecular Liquids*, 379, 121676.

<https://doi.org/10.1016/J.MOLLIQ.2023.121676>

Repsol S.A. (n.d.). Cómo reducir el CO<sub>2</sub>: medidas para disminuir las emisiones | Repsol.

Retrieved September 8, 2024, from <https://www.repsol.com/es/sostenibilidad/ejes-sostenibilidad/cambio-climatico/reduccion-del-co2/index.cshtml>

Rey, A., Gouedard, C., Ledirac, N., Cohen, M., Dugay, J., Vial, J., Pichon, V., Bertomeu, L., Picq, D., Bontemps, D., Chopin, F., & Carrette, P. L. (2013). Amine degradation in CO<sub>2</sub> capture. 2. New degradation products of MEA. Pyrazine and alkylpyrazines: Analysis, mechanism of formation and toxicity. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 19, 576–583. <https://doi.org/10.1016/J.IJGGC.2013.10.018>

Rincón Ocampo, E., & Mejía Díaz, R. (2023). Simulación en Aspen HYSYS del proceso de captura de CO<sub>2</sub> con mezclas de monoetanolamina (MEA) y líquidos iónicos. Universidad industrial de Santander.

<https://noesis.uis.edu.co/handle/20.500.14071/15252>

Robertson, E. P. (2007). Analysis of CO<sub>2</sub> Separation from Flue Gas, Pipeline Transportation, and Sequestration in Coal. <http://www.inl.gov>

Romero-García, A. G., Ramírez-Márquez, C., Sánchez-Ramírez, E., Ponce-Ortega, J. M., González-Campos, J. B., De Blasio, C., & Segovia-Hernández, J. G. (2024). Implementation of the Deep Eutectic Solvent, Choline Urea Chloride (1:2), to Evaluate the Sustainability of its Application During CO<sub>2</sub> Capture. *Process Integration and Optimization for Sustainability*, 8(3), 741–758. <https://doi.org/10.1007/S41660-023-00383-2/FIGURES/10>

- Rozas, S., Gutiérrez, A., Atilhan, M., Bol, A., & Aparicio, S. (2024). Understanding the CO<sub>2</sub> capture potential of tetrapropylammonium-based multifunctional deep eutectic solvent via molecular simulation. *Journal of Molecular Liquids*, 393, 123416. <https://doi.org/10.1016/J.MOLLIQ.2023.123416>
- Sakwattanapong, R., Aroonwilas, A., & Veawab, A. (2005). Behavior of reboiler heat duty for CO<sub>2</sub> capture plants using regenerable single and blended alkanolamines. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 44(12), 4465–4473. <https://doi.org/10.1021/IE050063W>
- Sarmad, S., Mikkola, J. P., & Ji, X. (2017). Carbon Dioxide Capture with Ionic Liquids and Deep Eutectic Solvents: A New Generation of Sorbents. *Chemsuschem*, 10(2), 324–352. <https://doi.org/10.1002/CSSC.201600987>
- Shirdel, S., Valand, S., Fazli, F., Winther-Sørensen, B., Aromada, S. A., Karunarathne, S., & Øi, L. E. (2022). Sensitivity Analysis and Cost Estimation of a CO<sub>2</sub> Capture Plant in Aspen HYSYS. *Chemengineering* 2022, Vol. 6, Page 28, 6(2), 28. <https://doi.org/10.3390/CHEMENGINEERING6020028>
- Smith, E. L., Abbott, A. P., & Ryder, K. S. (2014). Deep Eutectic Solvents (dese) and Their Applications. In *Chemical Reviews* (Vol. 114, Issue 21, pp. 11060–11082). American Chemical Society. <https://doi.org/10.1021/cr300162p>
- Sze, L. L., Pandey, S., Ravula, S., Pandey, S., Zhao, H., Baker, G. A., & Baker, S. N. (2014). Ternary deep eutectic solvents tasked for carbon dioxide capture. *ACS Sustainable Chemistry and Engineering*, 2(9), 2117–2123. [https://doi.org/10.1021/SC5001594/SUPPL\\_FILE/SC5001594\\_SI\\_001.PDF](https://doi.org/10.1021/SC5001594/SUPPL_FILE/SC5001594_SI_001.PDF)

Tierragro Colombia. (2024). Urea Granulada 50 Kg | Fertilizantes Agro |.

<https://www.tierragro.com/products/urea-granulada-50-kl-nutrimon-fertilizantes-agro>

Ulises Alvarez, D., Ángel, M., Ramírez, A., Elisa Domínguez Vargas, A., Daniel, L.,

Alvarado, L., Margarta, V., Montejo, R., Segovia Hernández, E., & Segovia Hernández,

J. G. (2022). Diseño de un proceso sostenible para la captura de CO<sub>2</sub> utilizando líquidos

eutécticos profundos. *JÓVENES EN LA CIENCIA*, 16,

1–12.

[https://www.jovenesenlaciencia.ugto.mx/index.php/jovenesenlaciencia/article/view/3](https://www.jovenesenlaciencia.ugto.mx/index.php/jovenesenlaciencia/article/view/3509)

509

Usman, M. A., Fagoroye, O. K., Ajayi, T. O., & Kehinde, A. J. (2021). ASPEN plus simulation

of liquid–liquid equilibria data for the extraction of aromatics from waste tyrepyrolysis

gasoline using organic and deep eutectic solvents: a comparative study. *Applied*

*Petrochemical Research* 2021 11:1, 11(1), 113–122. [https://doi.org/10.1007/S13203-](https://doi.org/10.1007/S13203-020-00262-8)

020-00262-8

Wang, C., Wang, Z., & Leng, X. (2023). Simulation and comprehensive study of an optimum

process for CO<sub>2</sub> capture from flue gas; technical, economic, and environmental

analyses. *Alexandria Engineering Journal*, 74, 121–

138. <https://doi.org/10.1016/J.AEJ.2023.04.066>

Wibowo, H., Liao, W., Zhou, X., Yu, C., Rahim, D. A., Hantoko, D., Qun, H., & Yan, M.

(2020). Study on the effect of operating parameters towards CO<sub>2</sub> absorption behavior

of choline chloride – Monoethanolamine deep eutectic solvent and its aqueous

solutions. *Chemical Engineering and Processing - Process Intensification*, 157,

108142. <https://doi.org/10.1016/J.CEP.2020.108142>

Yadav, A., & Pandey, S. (2014). Densities and viscosities of (choline chloride + urea) deep eutectic solvent and its aqueous mixtures in the temperature range 293.15 K to 363.15K. *Journal of Chemical and Engineering Data*, 59(7), 2221–2229.

[https://doi.org/10.1021/JE5001796/ASSET/IMAGES/MEDIUM/JE-2014-001796\\_0007.GIF](https://doi.org/10.1021/JE5001796/ASSET/IMAGES/MEDIUM/JE-2014-001796_0007.GIF)

Zhang, K., Hou, Y., Wang, Y., Wang, K., Ren, S., & Wu, W. (2018). Efficient and Reversible Absorption of CO<sub>2</sub> by Functional Deep Eutectic Solvents. *Energy and Fuels*, 32(7), 7727–7733.

[https://doi.org/10.1021/ACS.ENERGYFUELS.8B01129/ASSET/IMAGES/LARGE/E F-2018-01129R\\_0014.JPEG](https://doi.org/10.1021/ACS.ENERGYFUELS.8B01129/ASSET/IMAGES/LARGE/E F-2018-01129R_0014.JPEG)

Zhang, Q., De Oliveira Vigier, K., Royer, S., & Jérôme, F. (2012). Deep eutectic solvents: syntheses, properties and applications. *Chemical Society Reviews*, 41(21), 7108–7146.  
<https://doi.org/10.1039/C2CS35178A>

Zhang, Y., Ji, X., & Lu, X. (2014). Application of choline-based deep eutectic solvents in CO<sub>2</sub> capture and separation. *Huagong Xuebao/CIESC Journal*, 65(5), 1721–1728.  
<https://doi.org/10.3969/J.ISSN.0438-1157.2014.05.023>

Olivo, M. De L., & Soto-Olivo, A. (2010). Comportamiento de los gases de efecto invernadero y las temperaturas atmosféricas con sus escenarios de incremento potencial. *Universidad, ciencia y tecnología*, 14(57), 221–230  
[https://ve.scielo.org/scielo.php?Script=sci\\_arttext&pid=S1316-48212010000400002](https://ve.scielo.org/scielo.php?Script=sci_arttext&pid=S1316-48212010000400002)

Devi, B. K., Naraparaju, S., Soujanya, C., & Gupta, S. D. (2020). Green chemistry and green solvents: An overview. *Current Green Chemistry*, 7(3), 314–325.

<https://www.eurekaselect.com/article/108012>

Ooi, Z. L., Tan, P. Y., Tan, L. S., & Yeap, S. P. (2020). Amine-based solvent for CO<sub>2</sub> absorption and its impact on carbon steel corrosion: A perspective review. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 28(5), 1357–1367. [https://www-sciencedirect-](https://www-sciencedirect-com.bibliotecavirtual.uis.edu.co/science/article/pii/S1004954120301002)

[com.bibliotecavirtual.uis.edu.co/science/article/pii/S1004954120301002](https://www-sciencedirect-com.bibliotecavirtual.uis.edu.co/science/article/pii/S1004954120301002)

**Apéndices****Apéndice A****Configuración de equipos para la simulación de captura de CO<sub>2</sub> con el caso base MEA como disolvente****Tabla A1.***Parámetros internos de la torre absorbedora*

<b>Especificación</b>	<b>Unidad</b>	<b>Valor</b>
Presión	kpa	6860
Damping	-	1
Numero de etapas	-	20
Altura de la torre	m	6
Dimensión del empaque	-	250 Y
Material del empaque	-	Metal
Tipo de empaque	-	Packed FLEXIPAC

**Tabla A2.***Parámetros internos de la torre a regeneradora.*

<b>Especificación</b>	<b>Unidad</b>	<b>Valor</b>
Presión de la cima	kpa	180
Presión del fondo	kpa	180.1
Caída de presión	kpa	0.1
Damping	-	0.050
Numero de etapas	-	20
Altura de la torre	m	6
Condensador	-	Full reflux



**Tabla A3.**

Temperatura de alimentación	°C	100
Temperatura del condensador	°C	50
Temperatura del rehervidor	°C	120
Reflujo	-	2.5
Dimensión del empaque	-	250 Y
Material del empaque	-	Metal
Tipo de empaque	-	Packed FLEXIPAC

*Configuración de la válvula proceso de captura de CO<sub>2</sub> con MEA.*

Parámetro	Unidad	Valor
Presión de entrada	kpa	6860
Presión de salida	kpa	2000
Delta P	kpa	4860
Apertura de la válvula	%	50
Damping	-	0.95

**Tabla A4.**

*Configuración del separador Flash proceso de captura de CO<sub>2</sub> con MEA.*

Parámetro	Unidad	Valor
Presión de entrada	kpa	2000
Delta P	kpa	1380

**Tabla A5.**

*Configuración del intercambiador de calor proceso de captura de CO<sub>2</sub> con MEA.*

Parámetro	Unidad	Valor
Temperatura salida lateral	°C	100

**Tabla A6.***Configuración del Make up proceso de captura de CO<sub>2</sub> con MEA.*

<b>Parámetro</b>	<b>Unidad</b>	<b>Valor</b>
Concentración MEA	%	30
Flujo total	kg/s	34.15

**Tabla A7.***Configuración del Enfriador proceso de captura de CO<sub>2</sub> con MEA.*

<b>Parámetro</b>	<b>Unidad</b>	<b>Valor</b>
Delta P	kpa	0
Temperatura de salida	°C.	38

**Tabla A8.***Configuración de la bomba proceso de captura de CO<sub>2</sub> con MEA.*

<b>Parámetro</b>	<b>Unidad</b>	<b>Valor</b>
Presión de salida	kpa	6860
Temperatura de entrada	°C.	38
Eficiencia	%	75

**Apéndice B.****Parámetros introducidos en la simulación para la incorporación del solvente eutéctico****ChCl: U (1:2)****Tabla B1.***Parámetros escalares para la mezcla de cloruro de colina – Urea (1:2)*

Parámetro	Unidad	Valor
<b>Peso molecular</b>	g/mol	86.58
<b>Temperatura de ebullición</b>	K	445.6
<b>Temperatura crítica</b>	K	644.4
<b>Presión crítico</b>	Bar	49.35
<b>Volumen crítico</b>	cm <sup>3</sup> /mol	254.37
<b>Densidad</b>	g/ cm <sup>3</sup>	1.189
<b>Factor acéntrico</b>	ohmio	0.661

**Figura B1**

*Solvente eutéctico cloruro de colina – urea (1:2) introducido en la simulación como componente hipotético*

The screenshot shows a software window titled "ChCl:U\*" with a tabbed interface. The "Critical" tab is selected. Below the tabs, there are two sections: "Base Properties" and "Critical Properties". Each section contains a table of properties with their values.

ID	Critical	Point	TDep	UserProp	Type
Base Properties					
Molecular Weight				86.58	
Normal Boiling Pt [K]				445.6	
Ideal Liq Density [g/cm3]				1.189	
Critical Properties					
Temperature [K]				644.4	
Pressure [kPa]				4935	
Volume [m3/kgmole]				0.2544	
Acentricity				0.6610	

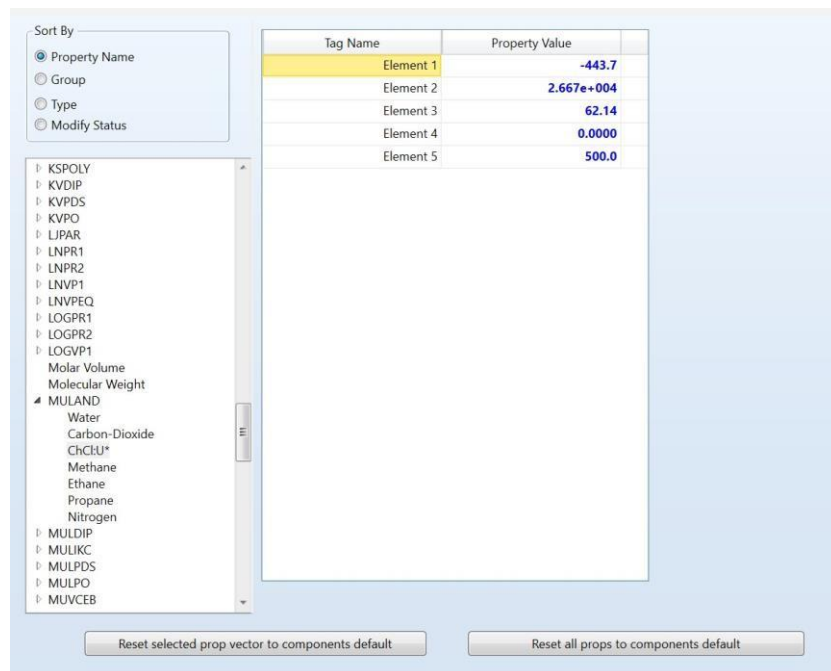
**Tabla B2**

*Correlaciones dependientes de la temperatura para la mezcla de cloruro de colina – Urea (1:2)*

Propiedad	Tipo de ecuación	Unidad	Valores
<b>Viscosidad</b>	Andrade	Mpa/s	A1: -443.4
			A2: 26670
			A3: 62.14
<b>Capacidad calorífica</b>	IK- CAPE	J/mol-K	A1: 247.4
			A2: -0.5633
			A3: 0.00114
<b>Tensión superficial</b>	DIPPR	N/m	A1: 92.44
			A2: 0.6043
			A3: 0

**Figura B2**

*Modificación de la viscosidad en el simulador Aspen HYSYS para la simulación de captura de CO<sub>2</sub> con ChCl:U como solvente*



**Figura B3**

*Modificación de la tensión superficial en el simulador Aspen HYSYS para la simulación de captura de CO<sub>2</sub> con ChCl:U como solvente*

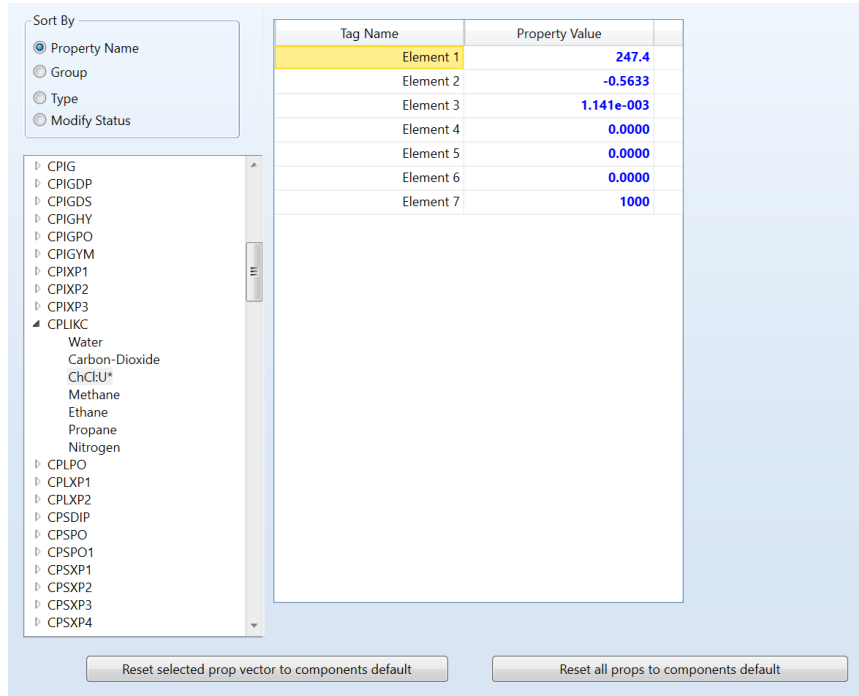
The screenshot displays the Aspen HYSYS software interface for modifying properties. On the left, there is a 'Sort By' menu with options: Property Name (selected), Group, Type, and Modify Status. Below this is a tree view of components, including MUVPDS, MUVPO, MUVSUT, NATOM, NOATOM, OMGCTD, PCGLY, PDSNEL, PLPO, PLXANT, PSANT, PSEUDO, RACKET, Rackett Parameter Zra, Radius of Gyration, RHOM, RKTZRA, SG, SIGDIP (expanded to show Water, Carbon-Dioxide, ChCl:U\*, Methane, Ethane, Propane, Nitrogen), and SIGPDS. The main area is a table with two columns: 'Tag Name' and 'Property Value'. The table contains seven rows, with 'Element 1' highlighted in yellow. The values are: Element 1 (9.244e-002), Element 2 (0.6043), Element 3 (0.0000), Element 4 (0.0000), Element 5 (0.0000), Element 6 (0.0000), and Element 7 (1000). At the bottom, there are two buttons: 'Reset selected prop vector to components default' and 'Reset all props to components default'.

Tag Name	Property Value
Element 1	9.244e-002
Element 2	0.6043
Element 3	0.0000
Element 4	0.0000
Element 5	0.0000
Element 6	0.0000
Element 7	1000

**Figura B4**

*Modificación de la capacidad calorífica en el simulador Aspen HYSYS para la simulación*

*de captura de CO<sub>2</sub> con ChCl:U como solvente*



Sort By

- Property Name
- Group
- Type
- Modify Status

Tree View:

- ▷ CPIG
- ▷ CPIGDP
- ▷ CPIGDS
- ▷ CPIGHY
- ▷ CPIGPO
- ▷ CPIGYM
- ▷ CPIXP1
- ▷ CPIXP2
- ▷ CPIXP3
- ▲ CPLIKC
  - Water
  - Carbon-Dioxide
  - ChCl:U\*
  - Methane
  - Ethane
  - Propane
  - Nitrogen
- ▷ CPLPO
- ▷ CPLXP1
- ▷ CPLXP2
- ▷ CPSDIP
- ▷ CPSPO
- ▷ CPSPO1
- ▷ CPSXP1
- ▷ CPSXP2
- ▷ CPSXP3
- ▷ CPSXP4

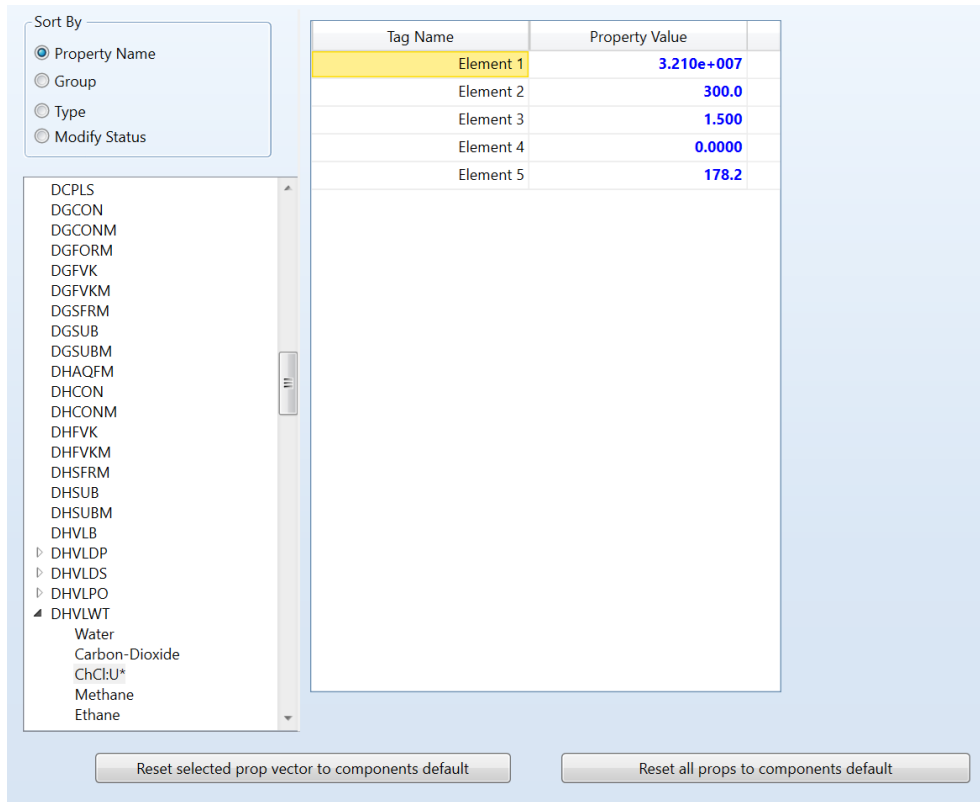
Tag Name	Property Value
Element 1	247.4
Element 2	-0.5633
Element 3	1.141e-003
Element 4	0.0000
Element 5	0.0000
Element 6	0.0000
Element 7	1000

Buttons:

- Reset selected prop vector to components default
- Reset all props to components default

**Figura B5**

*Modificación del calor de vaporización en el simulador Aspen HYSYS para la simulación de captura de CO<sub>2</sub> con ChCl:U como solvente*

**Table B3**

Coefficientes binarios NRTL para el ChCl: U (1:2)

Componente i	H <sub>2</sub> O	CO <sub>2</sub>
Componente j	ChCl:U (1:2)	ChCl:U (1:2)
<b>A<sub>ij</sub></b>	-0,48	-4,48
<b>B<sub>ij</sub></b>	134,90	3032,59
<b>C<sub>ij</sub></b>	0,20	0,2

**Nota.** Adaptado de Ma et al., 2018.

**Table B4**

*Coefficientes binarios HENRY para el ChCl:U (1:2)*

Componente i	CO <sub>2</sub>
Componente j	ChCl:U (1:2)
A <sub>ij</sub>	242,95
B <sub>ij</sub>	-3055,05
C <sub>ij</sub>	-47,00
D <sub>ij</sub>	0,13

**Nota.** Adaptado de (Ma et al., 2018).

## Apéndice C

### Justificación de la matriz de selección del solvente eutéctico según la revisión

#### bibliográfica realizada

Como se observa en la Tabla 2 los solventes eutécticos evaluados son: SE1 (Solvente Eutéctico 1), compuesto por cloruro de colina y urea, conocido como relina; SE2 (Solvente Eutéctico 2), formado por cloruro de colina y etilenglicol, denominado etalina; SE3 (Solvente Eutéctico 3), que consiste en cloruro de colina y glicerol, conocido como glicelina; y SE4 (Solvente Eutéctico 4), compuesto por cloruro de colina y monoetanolamina. La relación molar para estos solventes es de 1: con excepción del SE4, cuya relación molar es de 1:5.

En términos de la afinidad para el SE1 (Isaifan & Amhamed, 2018 y Liu et al., 2019) mencionan que la relina tiene una alta capacidad para absorber selectivamente el CO<sub>2</sub> de mezclas de gases y (Alioui et al., 2020a; Huang et al., 2017) mencionan que la glicelina tiene mayor solubilidad que la relina pero también es más volátil. Así mismo (Alioui et al., 2020a;



Biswas et al., 2023b; Sze et al., 2014) midieron la solubilidad en CO<sub>2</sub> del SE1, SE2 y SE3 dentro un rango de presiones de hasta 6 Mpa y 298.15K a 343.15K de temperaturas y encontraron que las solubilidades estuvieron en un rango entre 0.126 a 0.48, 0.083 a 0.452 y 0.113 a 0.545 mol CO<sub>2</sub>/mol solvente respectivamente, también encontraron que la solubilidad del CO<sub>2</sub> mejora con el aumento de la presión y se reduce con el aumento de la temperatura. Para el SE4 (Adeyemi et al., 2017; Mahi et al., 2019) describen que este solvente tiene un gran potencial como un absorbente de CO<sub>2</sub> eficiente, y (Fan et al., 2016; Huan et al., 2022; Wibowo et al., 2020) realizaron pruebas de solubilidad con rangos de temperatura de [313.15 - 353]K y con presiones de [0.1 – 6] Mpa y las solubilidades estuvieron entre [0.044 – 0.448 mol] CO<sub>2</sub>/mol solvente y mencionan que los valores teóricos de esta afinidad son de hasta 0.5 mol CO<sub>2</sub>/mol solvente, estos autores también concluyeron que la solubilidad aumenta con el aumento de la presión y la disminución de la temperatura. Todos los solventes evaluados presentaron solubilidades similares, alcanzando casi 0.5 mol CO<sub>2</sub>/mol solvente siendo esta la solubilidad comúnmente presentada por los líquidos iónicos y las aminas tradicionales (Fu et al., 2016; Hizaddin et al., 2015). Los resultados, en orden de mayor a menor solubilidad, fueron: SE3, SE4, SE1 y SE2.

Respecto a los costos, se encontró que el precio del cloruro de colina es de 98.69 USD/kg con una pureza del 99%. Los precios para la urea, etilenglicol, glicerina y monoetanolamina (MEA) son 15.96, 54.48, 51.59 y 250 USD/kg, respectivamente, con una pureza del 99%. El precio más alto corresponde a la monoetanolamina, mientras que el más bajo es el de la urea; Cabe destacar que estos precios varían según el grado de pureza del compuesto (Blamis, 2024; DrogueríaCosmopolita, 2024; El Establo Colombia, 2024; Fisher Scientific, 2024a, 2024b; Gardenia Naturals, 2024; Tierragro Colombia, 2024).

Por otro lado, la disponibilidad comercial de todos los solventes se presenta como alta, ya que estos son utilizados en diferentes campos industriales. Por ejemplo, la urea se emplea como fertilizante, el etilenglicol como anticongelante, el glicerol en cosméticos y alimentos, y la monoetanolamina (MEA) en la absorción de gases. Estos solventes tienen una alta demanda en sus respectivos sectores (Abraham & Höfer, 2012; Ainai et al., 2023; Alioui et al., 2020b; Leron & Li, 2013; Yadav & Pandey, 2014). Asimismo, diversos estudios (Fan et al., 2016; Isaifan & Amhamed, 2018; Romero-García et al., 2024; Yadav & Pandey, 2014) mencionan que la obtención y síntesis del cloruro de colina es fácil, lo que contribuye a su amplia disponibilidad y uso en la industria.

La evaluación del impacto ambiental y en la salud de los solventes utilizados es un componente crucial en la selección de materiales para procesos industriales. En este ámbito, para el SE1 y SE3 se ha reportado un bajo impacto ambiental y en la salud. Estudios como los de (Betancourt Aguilar et al., n.d.; Huang et al., 2017; Isaifan & Amhamed, 2018; Jamshaid & Ahmed, 2022; Romero-García et al., 2024; Yadav & Pandey, 2014), mencionan que el SE1 y el SE3 no son tóxicos, y destacan su biodegradabilidad y biocompatibilidad. Sin embargo, se debe tener en cuenta que el glicerol, componente del SE3, es altamente higroscópico, lo que significa que en grandes cantidades puede absorber o ceder agua del ambiente, afectando la humedad del suelo y otros ecosistemas. En cuanto al SE2, se ha reportado un impacto ambiental medio y alto para la salud. Resúmenes de salud pública de la Agencia para Sustancias Tóxicas y el Registro de Enfermedades (ATSDR) y la Biblioteca Nacional de Medicina indican que el etilenglicol en grandes cantidades puede afectar seriamente la salud, ya que es tóxico y la exposición a altas concentraciones de etilenglicol puede dañar los riñones, el sistema nervioso, los pulmones y el corazón. Además, el impacto ambiental del etilenglicol es

considerable, ya que puede liberarse al entorno cuando se desechan productos que lo contienen. En el aire, este se degrada en aproximadamente 10 días, y en agua y suelo se degrada en semanas. Para el SE4, se encontró que el impacto ambiental y en la salud es alto. (Rey et al., 2013) menciona que, durante el proceso de regeneración, la monoetanolamina (MEA) puede degradarse térmicamente y oxidativamente, formando subproductos como amoníaco, aldehídos y ácidos orgánicos, que pueden ser tóxicos y contribuir a la contaminación del agua y del suelo si no se gestionan adecuadamente. Asimismo, la exposición a vapores de MEA puede causar irritación en los ojos, la piel y las vías respiratorias. Además, la MEA es tóxica si se inhala o se ingiere en grandes cantidades, pudiendo causar efectos adversos en el sistema nervioso central, el hígado y los riñones. La MEA también puede volatilizarse y escapar al ambiente durante el proceso de captura de CO<sub>2</sub>, contribuyendo a la contaminación del aire (Leron & Li, 2013).

Por último, para el indicador de cantidad de energía en la desorción no se encontró información para el SE2 y SE3, esto debido a que no ha sido estudiado en profundidad para la captura de CO<sub>2</sub>. Para el SE1 y SE4 (K. Zhang et al., 2018) reportan que el uso de energía del SE1 es menor en comparación al del SE4 como se observa en la Tabla 2. De manera similar, (Romero-García et al., 2024) encontraron que el SE1 requirió un 25.38% menos de energía en comparación con el proceso tradicional basado en la absorción de aminas. Por su parte, (Li et al. 2019) mencionan que, aunque la mezcla de cloruro de colina con MEA redujo la cantidad de energía utilizada en la regeneración en comparación con el uso de la MEA en solución acuosa para la captura de CO<sub>2</sub>, sigue siendo una cantidad significativa de energía la que se emplea en el proceso.

**Apéndice D**

**Tablas de corrientes obtenidas en la simulación de captura de CO<sub>2</sub> para el caso base con MEA y el caso modificado con ChCl: U (1:2)**

**Tabla D1**

*Datos de las corrientes del proceso de captura de CO<sub>2</sub> con MEA en Aspen HYSYS*

CORRIENTE	TEMPERATURA (K)	PRESIÓN (BAR)	FLUJO MOLAR (MMSCFD)	FRACCIÓN MOLAR DE CO <sub>2</sub>	FRACCIÓN MOLAR DE H <sub>2</sub> O	FRACCIÓN MOLAR DE MEA
DISOLVENTE MEA	312.1	68.60	106.2	0.0119	0.8740	0.1141
GAS AGRIO	308.1	69.00	25.00	0.2	0.0122	0.0000
GAS DULCE	312.5	68.60	19.77	0.0099	0.0012	0.0000
SOLVENTE RICO	356.0	68.60	111.4	0.0544	0.8355	0.1088
5	356.7	20.00	111.4	0.0544	0.8355	0.1088
6	373.1	20.00	111.4	0.0544	0.8355	0.1088
SOLVENTE POBRE	393.4	1.801	106.1	0.0119	0.8738	0.1142
8	377.1	1.801	106.1	0.0119	0.8738	0.1142
GAS PRODUCTO	323.2	1.800	5.315	0.9035	0.0697	0.0000
MAKE UP MEA	377.1	1.801	5.103E-5	0.0000	1.0000	0.0000
MAKE UP H <sub>2</sub> O	377.1	1.801	0.08593	0.0122	0.8735	0.1143
12	377.1	1.801	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000
13	377.1	1.801	106.2	0.0119	0.8740	0.1141
14	311.1	1.801	106.2	0.0119	0.8740	0.1141
15	312.1	68.60	106.2	0.0119	0.8740	0.1141

**Tabla D2**Datos de las corrientes del proceso de captura de CO<sub>2</sub> con ChCl:U (1:2) en Aspen HYSYS

CORRIENTE	TEMPERATURA (K)	PRESIÓN (BAR)	FLUJO MOLAR (MMSCFD)	FRACCIÓN MOLAR DE CO <sub>2</sub>	FRACCIÓN MOLAR DE H <sub>2</sub> O	FRACCIÓN MOLAR DE CHCL: U
DISOLVENTE	312.2	68.60	104.5	0.0000	0.9181	0.0819
GAS AGRIO	308.1	69.00	25.00	0.2	0.0122	0.000
GAS DULCE	312.6	68.60	19.76	0.0000	0.0020	0.0011
SOLVENTE RICO	323.8	68.60	109.7	0.0456	0.8767	0.0778
5	324.8	20.00	109.7	0.0456	0.8767	0.0778
6	373.1	20.00	109.7	0.0456	0.8767	0.0778
SOLVENTE POBRE	384.8	1.801	103.8	0.0000	0.9178	0.0822
8	332.4	1.801	103.8	0.0000	0.9178	0.0822
GAS PRODUCTO	337.9	1.800	5.888	0.8492	0.1508	0.0000
MAKE UP ES	332.4	1.801	0.02194	0.000	0.000	1.000
MAKE UP H <sub>2</sub> O	332.4	1.801	0.6216	0.000	1.000	0.000
12	332.4	1.801	104.5	0.000	0.9181	0.0819
13	311.3	1.801	104.5	0.000	0.9181	0.0819
14	312.2	68.60	104.5	0.000	0.9181	0.0819

**Apéndice E**

**Resultados de la simulación de captura de CO<sub>2</sub> en Aspen HYSYS y comparaciones con la literatura de la variación de propiedades como viscosidad, densidad, tensión superficial y**

**Figura E1**

*Resultados de la simulación en Aspen HYSYS de la variación de la viscosidad con la temperatura para el ChCl: U (1:2)*

Temperature [K]	Pressure [kPa]	Phases	Viscosity [mPa-s]
308.1	101.3	L	349.034
312.1	101.3	L	256.604
316.1	101.3	L	192.050
320.1	101.3	L	146.210
324.1	101.3	L	113.142
328.1	101.3	L	88.9291
332.1	101.3	L	70.9488
336.1	101.3	L	57.4180
340.1	101.3	L	47.1074
344.1	101.3	L	39.1577
348.1	101.3	L	32.9604

**Figura E2**

*Resultados de la simulación en Aspen HYSYS de la variación de la densidad con la temperatura para el ChCl:U (1:2)*

Temperature [K]	Pressure [kPa]	Phases	Mass Density [g/cm <sup>3</sup> ]
298.1	101.3	L	1.19531
301.6	101.3	L	1.19104
305.1	101.3	L	1.18676
308.6	101.3	L	1.18246
312.1	101.3	L	1.17814
315.6	101.3	L	1.17381
319.1	101.3	L	1.16946
322.6	101.3	L	1.16510
326.1	101.3	L	1.16071
329.6	101.3	L	1.15631
333.1	101.3	L	1.15189

**Figura E3**

*Resultados de la simulación en Aspen HYSYS, de la variación de la tensión superficial con la temperatura para el ChCl: U (1:2)*

Temperature [K]	Pressure [kPa]	Phases	Surface Tension [mN/m]
305.1	101.3	L	62.7307
308.8	101.3	L	62.3276
312.3	101.3	L	61.9228
315.9	101.3	L	61.5162
319.5	101.3	L	61.1079
323.1	101.3	L	60.6977
326.8	101.3	L	60.2858
330.3	101.3	L	59.8720
333.9	101.3	L	59.4563
337.5	101.3	L	59.0387
341.1	101.3	L	58.6191

**Figura E4**

*Resultados de la simulación en Aspen HYSYS de la variación de la capacidad calorífica con la temperatura para el ChCl:U (1:2)*

Results			
Temperature [K]	Pressure [kPa]	Phases	Molar Heat Capacity [J/gmole-K]
303.1	100.0	L	181.741
306.6	100.0	L	182.363
310.1	100.0	L	182.975
313.6	100.0	L	183.576
317.1	100.0	L	184.166
320.6	100.0	L	184.745
324.1	100.0	L	185.312
327.6	100.0	L	185.868
331.1	100.0	L	186.411
334.6	100.0	L	186.942
338.1	100.0	L	187.461



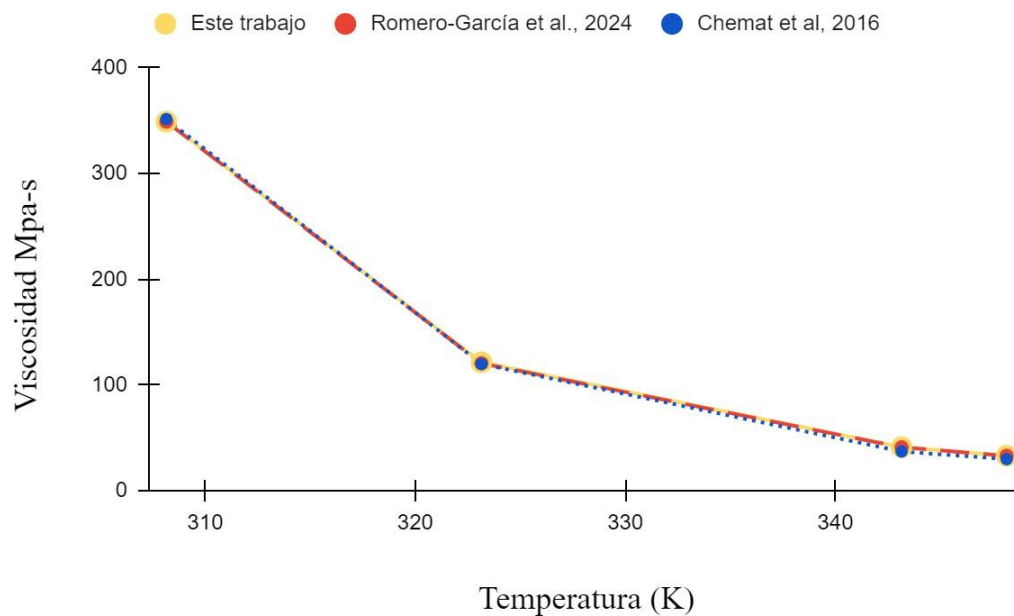
**Tabla E1**

*Comparación de la variación de la viscosidad con la temperatura obtenida por el simulador y la literatura*

Viscosidad (Mpa-s)			
Temperatura (K)	Este trabajo	Romero-García et al., 2024	Chemat et al, 2016
308.15	349.034	349.03	351.46
323.15	121.408	120.45	119.81
343.15	41.1451	40.96	37.039
348.15	32.9604	32.96	29.79

**Figura E5**

*Gráfica de la comparación variación de la viscosidad con la temperatura obtenida por el simulador y la literatura*



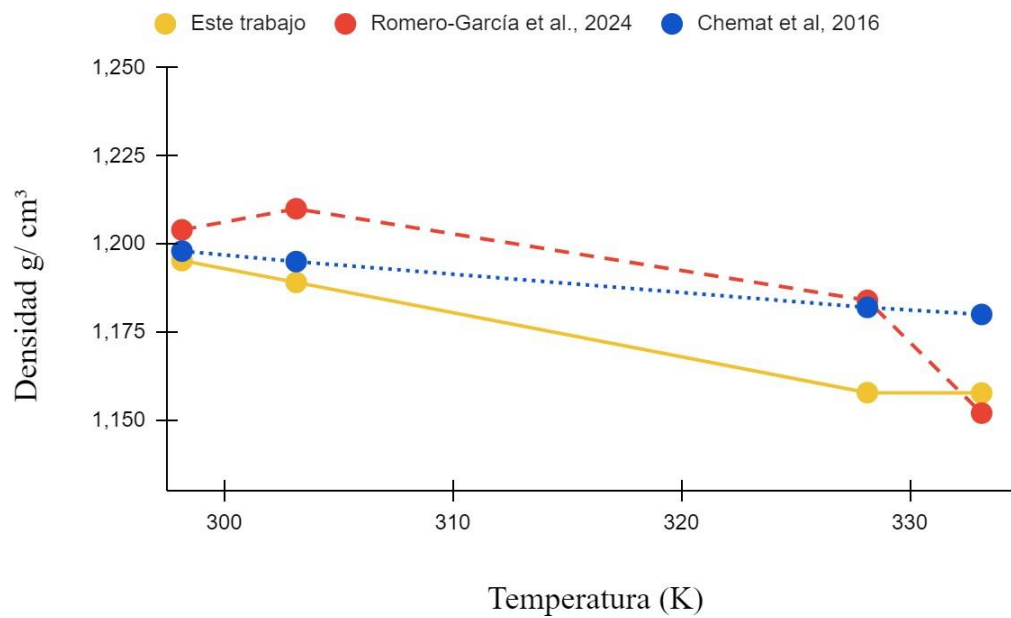
**Tabla E2**

*Comparación de la variación de la densidad con la temperatura obtenida por el simulador y la literatura*

Densidad (g/cm <sup>3</sup> )			
Temperatura (K)	Este trabajo	Romero-García et al., 2024	Chemat et al, 2016
298.15	1.1953	1.204	1.198
303.15	1.1891	1.210	1.195
328.15	1.1578	1.184	1.182
333.15	1.1577	1.152	1.180

**Figura E6**

*Comparación de la variación de la densidad con la temperatura*



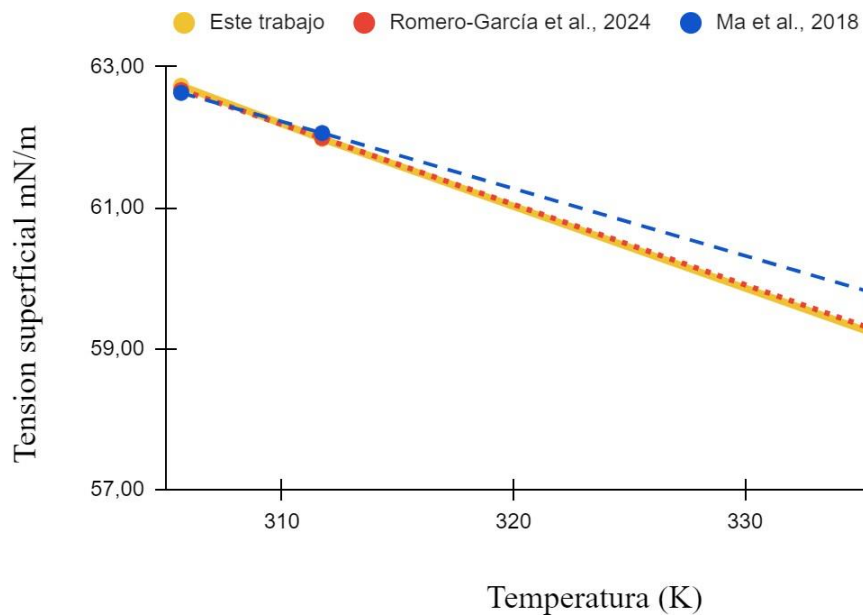
**Tabla E3.**

*Comparación de la variación de la tensión superficial con la temperatura obtenida por el simulador y la literatura.*

Tensión superficial (mN/m)			
Temperatura (K)	Este trabajo	Romero-García et al., 2024	Ma et al., 2018
<b>305.65</b>	62.7307	62.67	62.63
<b>311.74</b>	61.9774	61.99	62.06
<b>335.76</b>	59.1936	59.25	59.77
<b>341.74</b>	58.6191	58.55	59.29

**Figura E7**

*Gráfica de la Comparación de la variación de la tensión superficial con la temperatura obtenida por el simulador y la literatura.*



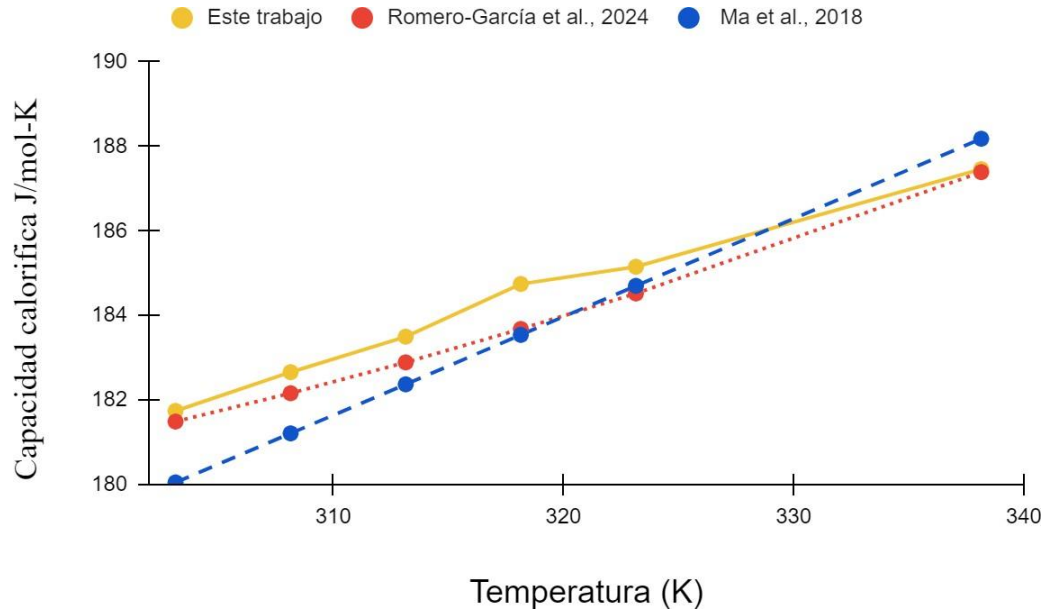
**Tabla E4.**

*Comparación de la variación de la tensión superficial con la temperatura obtenida por el simulador y la literatura.*

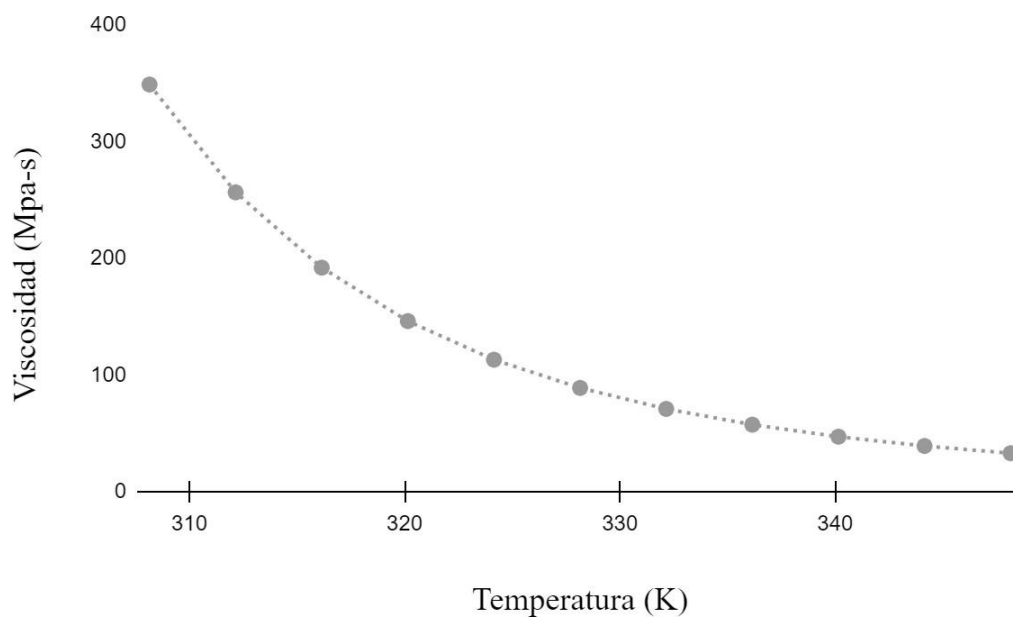
<b>Capacidad calorífica (J/mol-K)</b>			
<b>Temperatura (K)</b>	<b>Este trabajo</b>	<b>Romero-García et al., 2024</b>	<b>Ma et al., 2018</b>
<b>303.15</b>	181.741	181.49	180.05
<b>308.15</b>	182.658	182.16	181.21
<b>313.15</b>	183.498	182.89	182.37
<b>318.15</b>	184.745	183.68	183.54
<b>323.15</b>	185.152	184.52	184.70
<b>338.15</b>	187.461	187.39	188.18

**Figura E8**

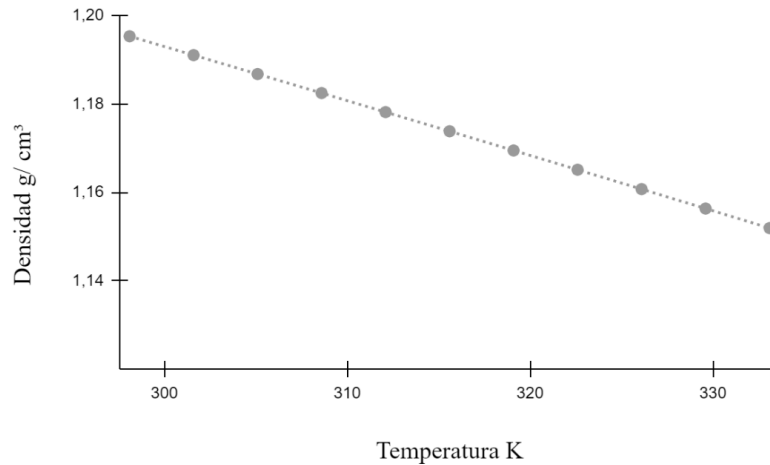
*Gráfica de la Comparación de la variación de la tensión superficial con la temperatura obtenida por el simulador y la literatura.*

**Figura E9**

Gráfica de la viscosidad vs temperatura para el ChCl: U (1:2) con datos obtenidos por el simulador

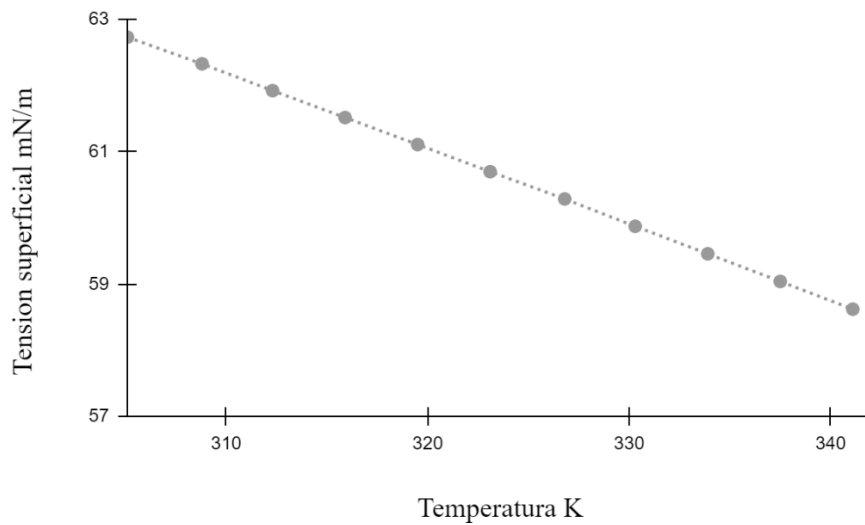
**Figura E10**

*Gráfica de la Densidad vs temperatura para el ChCl: U (1:2) con datos obtenidos por el simulador*



**Figura E11**

*Gráfica de la tensión superficial vs temperatura para el ChCl: U (1:2) con datos obtenidos por el simulador*



**Figura E12**

*Gráfica de la capacidad calorífica vs temperatura para el ChCl: U (1:2) con datos obtenidos por el simulador*

