

Análisis de separación y captura de SO₂ utilizando líquidos porosos utilizando Dinámica Molecular

Pablo Collado, Manuel M. Piñeiro, Martín Pérez-Rodríguez

CINBIO, Universidade de Vigo, Departamento de Física Aplicada

E-mail: pablo.collazo.diaz@uvigo.gal

Palabras clave: líquido poroso; SO₂; criptofano-111; dinámica molecular.

En este estudio se analiza desde una perspectiva teórica utilizando Dinámica Molecular con modelos atomísticos el encapsulamiento de SO₂ gaseoso en diferentes condiciones de temperatura y características de simulación en un líquido poroso de Tipo II [1,2], compuesto por moléculas de criptofano-111 disperso en diclorometano. El SO₂ gaseoso tiende a ocupar las cavidades del criptofano-111 con una gran selectividad a lo largo de toda la simulación. La influencia de los cambios de temperatura o condiciones de la simulación parecen no afectar a la cantidad de absorción de SO₂ por parte del líquido poroso. Se realizó un seguimiento con respecto al tiempo de la absorción de cada molécula encontrando un llenado casi lineal. Es reseñable la incapacidad de abandonar la cavidad del criptofano-111 por parte del SO₂ una vez ha accedido a ella. Se realizaron a su vez estudios estructurales de función de distribución radial comparativa entre las diferentes simulaciones, encontrando un comportamiento semejante en todas ellas. Los resultados obtenidos muestran la posibilidad de la obtención de un método renovable de separación y almacenamiento de SO₂ a través de este líquido poroso.

Referencias.

- [1] O'Reilly N, Giri N, James SL. Porous liquids. Chemistry - A European Journal. 2007;13(11):3020–5. doi:10.1002/chem.200700090
- [2] Collado P, Piñeiro MM, Pérez-Rodríguez M. Molecular simulation of CO₂ and H₂ encapsulation in a nanoscale porous liquid. Nanomaterials. 2023;13(3):409. doi:10.3390/nano13030409