

Líquidos iónicos para  
limpiar el aire que  
respiramos

Pedro Navarro Santos  
José Luis Rivera Rojas




# Líquidos iónicos para limpiar el aire que respiramos



**Como citar este artículo:** Navarro-Santos P y Rivera-Rojas JL. 2023. Líquidos iónicos para limpiar el aire que respiramos. Revista Ciencia y Naturaleza 01 (1025): 00-00.



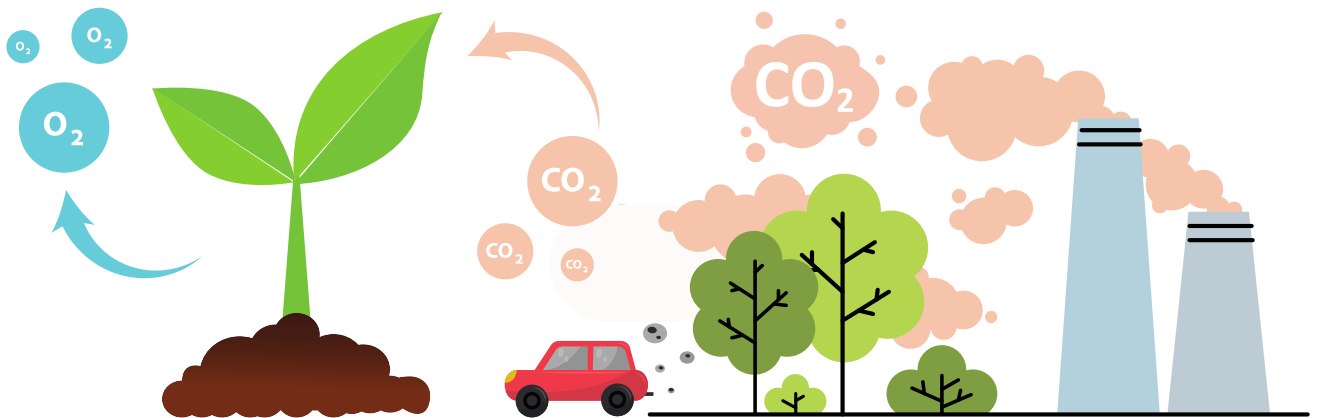


## *El efecto del CO<sub>2</sub> en la atmósfera*

**A**l hablar de dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>), lo primero que pensamos es en contaminación, en particular en la quema de combustibles y los problemas ambientales que genera, sin olvidar que el CO<sub>2</sub> que se genera está directamente relacionado con el aumento de temperatura del planeta.



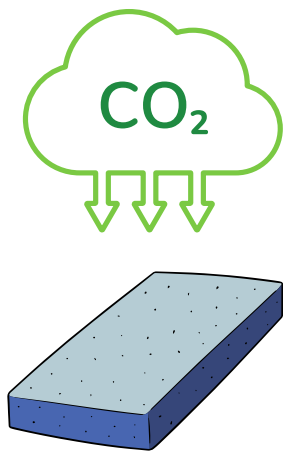
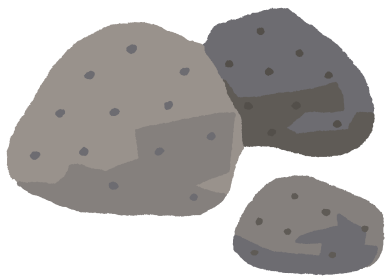
A diario, en nuestro entorno y alrededor de todas las manchas urbanas del mundo, se queman grandes cantidades de combustibles, con la finalidad de obtener energía en sus diferentes formas. En los últimos siglos, hemos quemado tanto combustible que hemos logrado cambiar la composición de la atmosfera, es decir, hemos alterado sensiblemente el aire que respiramos.



En realidad, la producción de  $\text{CO}_2$  , no solo tiene consecuencias ambientales negativas, también hay positivas, la energía que se obtiene de la quema de combustibles sirve para hacer funcionar muchas de las máquinas y dispositivos que empleamos en nuestra vida diaria. Además, mucho del  $\text{CO}_2$  producido no se acumula en la atmosfera, lo utilizan las plantas en la tierra y los océanos para producir el oxígeno que respiramos. El proceso por el cual se podría decir que se alimentan las plantas es llamado **fotosíntesis**. Este proceso toma como alimento el  $\text{CO}_2$  y agua, produce azúcares y oxígeno, los cuales, el oxígeno es expulsado al aire, y los azúcares son luego transformados para formar diversos componentes dentro de las plantas.



Nuestra atmósfera está constituida principalmente por oxígeno (20.95%) y nitrógeno (78.08%). Usando mediciones tomadas en 2018, se ha encontrado que, desde el comienzo de la era industrial a la actualidad, la concentración de  $\text{CO}_2$  casi se ha duplicado (pasando de una concentración de alrededor de 280 a 415 partes por millón), aún con este aumento, la cantidad presente de  $\text{CO}_2$  en la atmosfera se encuentra en concentraciones muy pequeñas, menores a 0.1% del aire en la actualidad. A pesar de su baja concentración, el  $\text{CO}_2$  tiene la propiedad de retener mucho más calor que el oxígeno o nitrógeno, alterando así toda la atmósfera y, como consecuencia, genera los problemas ambientales asociados al cambio climático, como el efecto invernadero con su calentamiento global, el derretimiento de los polos, la subida del nivel del mar con la perdida de tierras, entre otros.

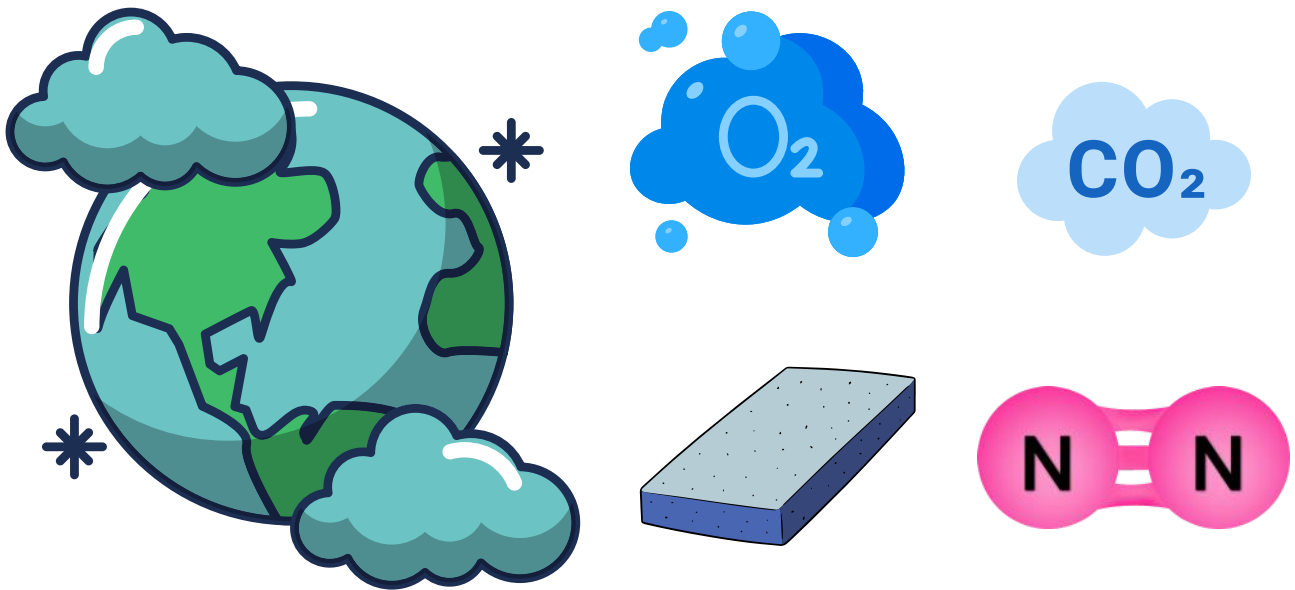


### *Capturando $\text{CO}_2$*

En vista de lo anterior, los científicos se han enfocado en capturar el  $\text{CO}_2$  mediante el uso de nuevos materiales. En un primer paso, se pensó en replicar a la naturaleza, capturando y almacenando el  $\text{CO}_2$  en los poros o huecos muy pequeños que contienen las superficies de muchos materiales tanto de origen natural o sintetizados en laboratorio para mejorar sus capacidades de almacenar  $\text{CO}_2$ .



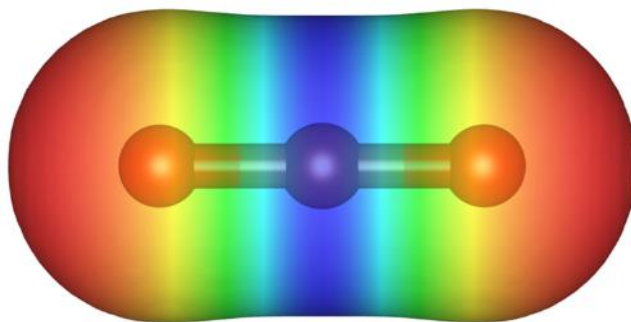
Residuos de minería que contienen silicatos de magnesio como la olivina y la serpetina capturan y almacenan  $\text{CO}_2$  en sus poros, una vez que los poros están saturados con  $\text{CO}_2$ , estos materiales se pueden almacenar en minas fuera de servicio. Un tipo de mineral llamado "zeolita", pueden capturar y almacenar cantidades considerables de  $\text{CO}_2$  y lo pueden liberar fácilmente para que se pueda almacenar en tanques en forma más o menos pura para su posterior aprovechamiento.



El problema de la captura de  $\text{CO}_2$  en los materiales porosos, es que estos materiales también capturan oxígeno y nitrógeno, por lo que, la búsqueda de materiales que puedan capturar  $\text{CO}_2$  de forma más efectiva y económicamente viable está en auge. La consideración económica para resolver este problema es importante, ya que solo serán viables aquellos procesos que puedan obtener algún provecho económico del  $\text{CO}_2$  capturado. Sin un beneficio económico, sería muy difícil que una compañía o gobierno promueva este tipo de iniciativas dados los enormes costos en equipo y operación de este tipo de procesos.

## La estructura del CO<sub>2</sub>

Desde el punto de vista químico, el CO<sub>2</sub> posee una estructura simétrica donde el átomo central es el carbono y se encuentra entre dos átomos de oxígeno a la misma distancia, formando una estructura lineal (Figura 1).



**Figura 1. Potencial electrostático molecular del CO<sub>2</sub>.** Las zonas azules representan regiones deficientes de densidad electrónica y las rojas representan regiones donde la molécula tiene exceso de carga electrónica y es donde se encuentran sus pares de electrones libres. Las regiones en amarillo o verde representan zonas mínimamente deficientes o abundantes en carga electrónica.

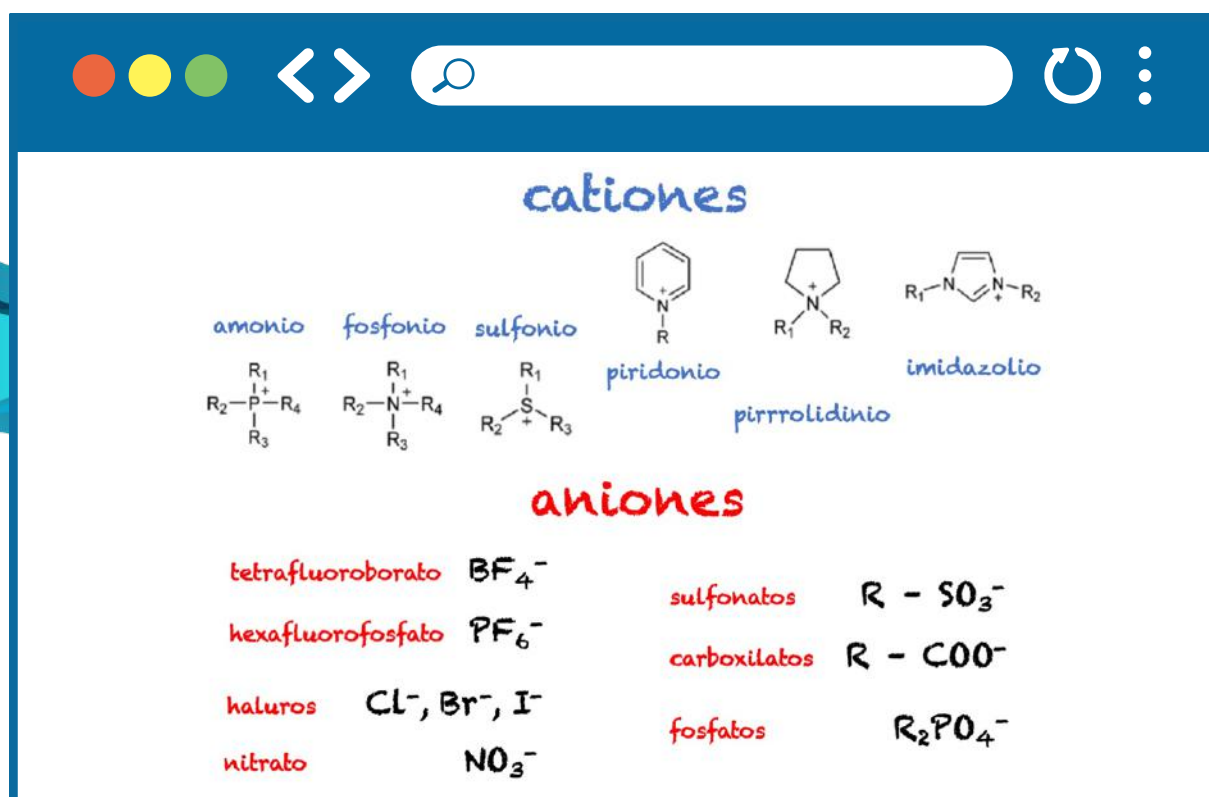
La estructura de la molécula de CO<sub>2</sub> tienen regiones características, con regiones donde los electrones prefieren (o no prefieren) navegar, y producen exceso o deficiencia de carga electrónica. En el CO<sub>2</sub> la región central del carbono es deficiente en carga electrónica, mientras que hay exceso en la parte externa de los oxígenos. Por esta razón se ha pensado que un buen material para capturar CO<sub>2</sub> debería contener también regiones características que atraigan las zonas ricas y pobres en carga electrónica en el CO<sub>2</sub>, respectivamente.

Los aniones y cationes son iones, compuestos que han perdido (cationes) o ganado (aniones) electrones a través de alguna reacción química, esto hace que sean deficientes (cationes) o ricos (aniones) en carga electrónica. Un catión podría atraer las regiones donde hay exceso de carga electrónica en el CO<sub>2</sub> (oxígenos), mientras que un anión atraería las regiones donde hay deficiencia en carga electrónica, como la región central del carbono; el resto de la estructura de CO<sub>2</sub> es mínimamente deficiente o abundante en carga electrónica y no será atraída particularmente por algún ion.



## Los líquidos iónicos

Los líquidos iónicos son un tipo de material que ha sido investigado recientemente y como su nombre lo indica, están formados por pares de iones (cationes y aniones) que están en fase líquida, al menos a temperatura (25°C) y presión ambiente (1 atmosfera). Los líquidos iónicos están constituidos mayoritariamente por iones con unas cuantas impurezas, y contienen tantos aniones como cationes para mantener el líquido estable. En la Figura 2 se muestran algunas familias de iones y cationes junto con su nombre científico, que se pueden combinar para formar múltiples líquidos iónicos, con propiedades diferentes.



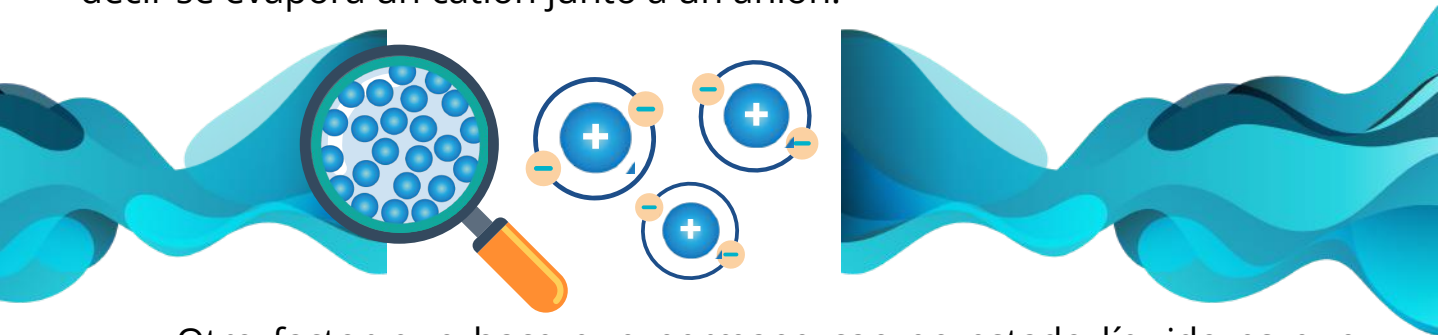
**Figura 2. Estructuras de familias de aniones y cationes.** Se pueden conjuntar para formar líquidos iónicos. Los grupos R pueden representar átomos de hidrógeno o cadenas de hidrocarburos de tamaños diversos.





Existen otros sistemas más simples formados por iones y que conocemos en forma habitual, por ejemplo, las sales inorgánicas como la sal común o sal de cocina (cloruro de sodio). Al igual que los líquidos iónicos, las sales inorgánicas pueden coexistir en forma líquida, pero se requieren temperaturas muy altas, a miles de grados centígrados, comúnmente encontrados en ambientes extremos como el sol, o en los motores de combustión de los cohetes espaciales, su estado sólido hace que las sales inorgánicas sean poco útiles a condiciones ambientales.

Los líquidos iónicos mantienen su estado líquido a temperatura ambiente debido a que las mezclas de cationes y aniones en los líquidos iónicos producen atracciones muy fuertes entre los pares de iones. Incluso más fuertes que las que presentan los líquidos de compuestos puros como las del agua y los alcoholes. Cuando los líquidos iónicos se logran evaporar a temperaturas altas, se evaporan por pares de iones, es decir se evapora un catión junto a un anión.

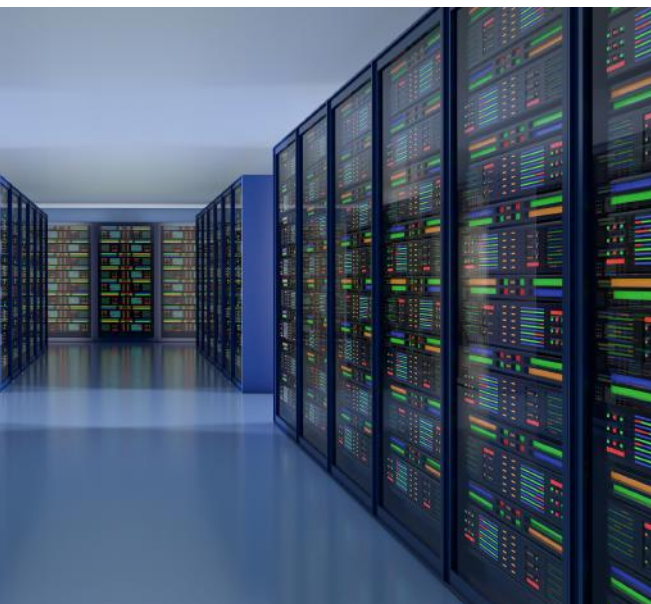


Otro factor que hace que permanezcan en estado líquido es que están formados por cationes y aniones con tamaños de estructura diferente, con cationes muy grandes conteniendo decenas de átomos y pequeños aniones conteniendo unos cuantos átomos, o viceversa. El ion más pequeño permanece cerca del ion más grande debido a las fuertes interacciones entre ellos, pero la diferencia en tamaños hace que el ion pequeño no se encuentre en una posición fija, sino que anda bailando cerca del ion grande. Estos dos factores hacen que las mezclas de iones no se acomoden para formar estructuras muy ordenadas como las que se presentan en los sólidos.



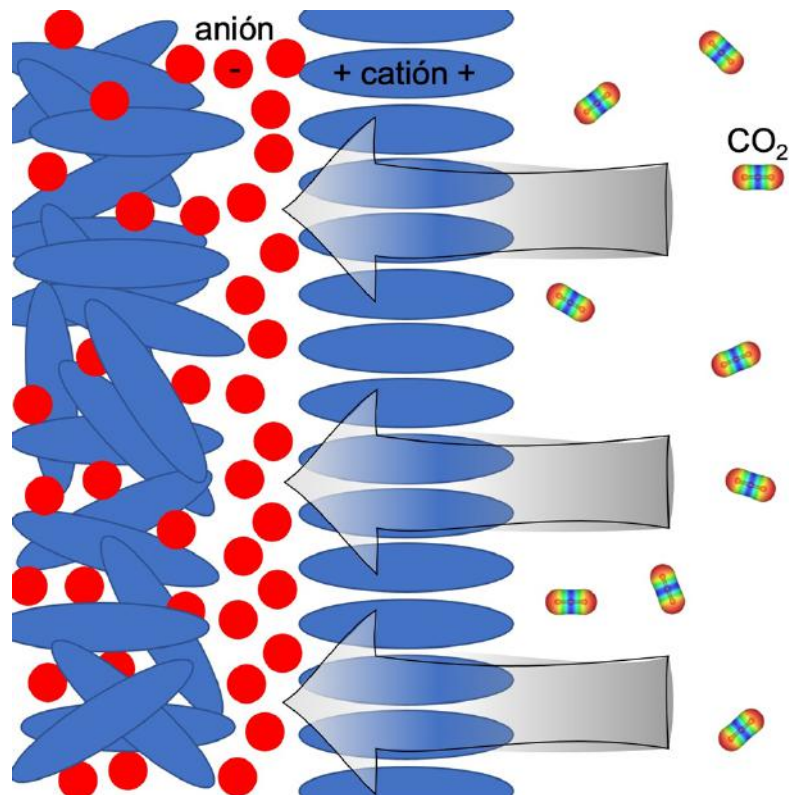
## *Captura de CO<sub>2</sub> con líquidos iónicos*

Utilizando la técnica de Dinámica Molecular es posible estudiar las propiedades de un sistema compuesto por moléculas, átomos o iones y explorar sus propiedades durante un periodo de tiempo en la escala hasta de microsegundos. La Dinámica Molecular trata de imitar como se mueven los átomos reales en muestras muy pequeñas formadas hasta por unos cuantos millones de átomos, esto lo hace a través del uso de computadoras donde programas de cómputo almacenan las posiciones, velocidades y fuerzas que sienten los átomos de la muestra durante un periodo de tiempo. Las posiciones y velocidades cambian en el tiempo de acuerdo con las fuerzas que sienten los átomos en un instante dado. Las fuerzas son calculadas con ecuaciones como la Ley de Coulomb que nos permite calcular la fuerza que sienten dos partículas iónicas, las cuales están cargadas positiva o negativamente, y la fuerza con que se atraen o se repelen es función de la carga de los sitios y de la separación entre ellos. Las posiciones, velocidades y fuerzas son almacenados por periodos que nos permiten calcular las distintas propiedades de los sistemas.



El uso de la Dinámica Molecular requiere infraestructura de cómputo de gran poder de procesamiento para evaluar los eventos a nivel atómico que suceden en el sistema de estudio, donde sistemas de cómputo con múltiples procesadores, auxiliados por unidades graficas de procesamiento, trabajan al mismo tiempo para simular un sistema, a veces durante periodos de varios meses las 24 horas del día.

Aplicando la Dinámica Molecular hemos estudiado la superficie de algunos líquidos iónicos para evaluar la capacidad que tienen para capturar  $\text{CO}_2$ , encontrando que los iones que componen el líquido iónico se organizan muy diferente a lo que esperaríamos en un líquido común como el agua o sus mezclas con otros fluidos simples. En la parte más externa del líquido, en la superficie de este, se forma una capa constituida principalmente por cationes (Figura 3), un poco más profundo se encuentra una capa rica en aniones y abajo de está, una región homogénea de aniones y cationes. Entre la capa rica en cationes y la capa rica en aniones se crean las condiciones ideales para atrapar las moléculas de  $\text{CO}_2$ , el cual se va acumulando hasta que el líquido iónico se satura de éste, para posteriormente regenerar el líquido iónico por un proceso de calentamiento para liberar el  $\text{CO}_2$  atrapado.



**Figura 3. Líquido iónico en contacto con un medio gaseoso formado por moléculas de  $\text{CO}_2$ .** El  $\text{CO}_2$  de la atmosfera fluye del medio gaseoso hacia el interior del líquido iónico, donde se captura en la parte más externa del líquido iónico, la cual esta formada por dos capas, una rica en cationes (la más externa) seguida de una rica en aniones, y después de esta existe una región homogénea de cationes y aniones. Los óvalos pequeños representan las moléculas de  $\text{CO}_2$ , mientras que los largos a los cationes, y las esferas rojas a los aniones.



Para facilitar la captura de  $\text{CO}_2$ , experimentalmente los líquidos iónicos son mezclados con diversos soportes que facilitan su manejo, por ejemplo, pueden ser soportados en espuma de poliuretano, un material muy usado como relleno en muebles y como aislante térmico en la construcción. Experimentos en un ambiente hecho de puro  $\text{CO}_2$  sin oxígeno ni nitrógeno, ha encontrado que cada gramo de la mezcla de líquido iónico compuesto por el par de iones  $[\text{BMIM}^+]$  y  $[\text{Cl}^-]$ , llamado cloruro de 1-butil-3-metilimidazol, mezclado con poliuretano llega a capturar hasta 0.425 gramos por gramo de la mezcla de líquido iónico con poliuretano, es decir, captura tanto  $\text{CO}_2$  como casi la mitad de su peso original. Este proceso de captura es muy similar al que ocurre a una esponja seca cuando la ponemos en contacto con agua, la esponja captura agua en sus poros y al momento que la sacamos del agua se lleva una cantidad considerable de agua con ella.

Esta captura considerable de  $\text{CO}_2$  con líquidos iónicos se obtiene mezclando 15% de líquido iónico y 85% de espuma de poliuretano en peso, el  $\text{CO}_2$  capturado puede ser liberado posteriormente para que la mezcla de líquido iónico con poliuretano pueda ser reutilizada.

El catión  $[\text{BMIM}^+]$  tiene una estructura basada en el imidazol que ha perdido un electrón y contiene dos cadenas de alcanos lineales con 1 y 4 carbonos. El imidazol forma parte de la estructura del aminoácido esencial histidina, mientras que los alcanos lineales se encuentran comúnmente en productos del petróleo. La parte aniónica del líquido iónico consiste en el anión  $[\text{Cl}^-]$  que es un átomo de cloro que ha ganado un electrón. En experimentos en un ambiente formado de  $\text{CO}_2$  y metano como aquel que se produce exactamente después de salir de un horno de quemado, pero antes de ser liberados los gases de  $\text{CO}_2$  y metano no quemado a la atmósfera, se encontró que el  $\text{CO}_2$  es preferentemente capturado por líquidos iónicos, en comparación con una cantidad mínima de metano capturado, lo que nos permite capturar el  $\text{CO}_2$  antes de que se mezcle con los gases de la atmósfera y esto nos permite reciclar el metano que no se quema.



La captura de  $\text{CO}_2$  con líquidos iónicos se vislumbra como una ruta muy prometedora para separarlo preferentemente, ya que explota las diferencias marcadas entre las zonas ricas y deficientes en electrones del  $\text{CO}_2$ , estas zonas son diferentes en los principales componentes que forman la atmosfera (oxígeno y nitrógeno), que también forman moléculas lineales, pero ya que solo contienen dos átomos muy cercanos, por lo que se restringe el acceso a las zonas deficientes en carga electrónica. Futuros experimentos probarán estos argumentos, y determinarán la eficiencia y preferencia del  $\text{CO}_2$  hacia estos líquidos en un ambiente más realista, como el de nuestra atmósfera formada principalmente por oxígeno y nitrógeno, contaminada con cantidades muy pequeñas de  $\text{CO}_2$ .



Los resultados teóricos del estudio de Dinámica Molecular que describen las propiedades interfaciales de diversos líquidos iónicos para la captura selectiva de  $\text{CO}_2$  son parte de la aportación social del conocimiento del grupo de investigadores de la Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, en la cual el coautor del Programa Investigadores por México contribuyó en la parte de los cálculos computacionales.







Mediante este tipo de estudios es posible explorar materiales para proponer posibles soluciones a problemas ambientales como la captura selectiva de contaminantes, pero estas soluciones son de desarrollo reciente, y como cualquier otro desarrollo tecnológico, tardan años en ser llevadas a una etapa que se considere madura para poder emplearse en procesos industriales. Cuando estas soluciones tecnológicas sean puestas a trabajar para limpiar el aire que respiramos, se espera que estos líquidos iónicos no solo eliminen el CO del aire que respiramos, tal vez también lleguen a eliminar otras partículas contaminantes problemáticas, como son las partículas pequeñas de diámetro menor a 2.5 micrómetros (1 micrómetro equivale a un metro dividido en 1 millón de partes) llamadas PM2.5, las cuales son comúnmente mencionadas en los reportes de contaminación diarios y resultan principalmente de la quema del combustible diésel en los camiones.

Aunque su tamaño es mayor que el de una molécula de CO, las partículas PM2.5 son peligrosas porque son muy tóxicas, logran pasar muchos de los filtros naturales del cuerpo humano, llegando profundamente dentro de los pulmones y hasta el torrente sanguíneo.



Crédito de imágenes en orden de aparición: Bulat Silvia, iSailorr (Getty Images, GI), pepifoto (Getty Images Signature, GIS), Pixource (Pixabay, P), thiptisland, Tatiana Serova, popcornarts, pavelnaumov, Nikita\_H (P), Sketchify, ourlifelooklikeballon, Isen Alejo, PiotrZakrzewski (P), iconsy, dreamicons, icons8, Pakawat, Pexels, Felicia Smith, Maryna Stryzhak, Billion Photos, vasabii, Sylph Creatives, Keenam's Images, funky-data (GI), guaschfotografic, arsgera, Siraphol, samafoto (GI), Blackjack3D (GIS), Lhaiza Morena, sweet pocket (Emily\_XXX), Pobytov (GIS), nicolas\_(GIS), 200mm (GI), frentusha (GI), Magtira Paolo (Sketchify Education), Giuseppe Ramos.

## Para Consulta

-  Rivera JL, Molina-Rodríguez L, Ramos-Estrada M, Navarro-Santos P, Lima E. 2018. Interfacial properties of the ionic liquid [bmim][triflate] over a wide range of temperatures. RSC Advances 8:10115–10123. <https://doi.org/10.1039/C8RA00915E>
-  Arroyo-Valdez JA, Viramontes-Gamboa G, Guerra-Gonzalez R, Ramos-Estrada M, Lima E, Rivera JL. 2021. Cation folding and the thermal stability limit of the ionic liquid [BMIM+][BF4-] under total vacuum. RSC Advances 11:12951-12960. <https://doi.org/10.1039/D1RA00741F>
-  Fernández-Rojas M, Pacheco-Miranda L, Martínez-Ramírez A, Pradilla-Quintero K, Bernard F, Einloft S, Carreño-Díaz LA. 2017. New Biocomposites Based on Castor Oil Polyurethane Foams and Ionic Liquids for CO<sub>2</sub> Capture. Fluid Phase Equilibria 452:103–12. <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2017.08.026>
-  Li J, Hitch M. 2016. Carbon dioxide adsorption isotherm study on mine waste for integrated CO<sub>2</sub> capture and sequestration processes. Powder Technology 291: 408-13. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2015.12.011>



**Pedro Navarro Santos**

Catedrático del Programa “Investigadoras e Investigadores por México” comisionado al Instituto de Investigaciones Químico – Biológicas, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo. Sus líneas de investigación se basan en la aplicación de técnicas químico computacionales para el estudio de propiedades fisicoquímicas de sistemas nanométricos y reactividad intrínseca de moléculas orgánicas.

contacto: [pnavarrosa@conacyt.mx](mailto:pnavarrosa@conacyt.mx)



**José Luis Rivera Rojas**

Ingeniero químico y maestro en ciencias químicas por la Universidad Autónoma Metropolitana – Iztapalapa y doctor en ingeniería química por The University of Tennessee – Knoxville. Responsable del Laboratorio de Simulación Molecular en la Facultad de Ciencias Físico – Matemáticas de la Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo.