



Universidad de Concepción
Dirección de Postgrado
Facultad de Ingeniería-Programa de Doctorado en Ciencias de la Ingeniería
con mención en Ingeniería Química

**Propiedades Termofísicas de Líquidos Iónicos y sus
Mezclas con CO₂ y Ar
(Thermophysical Properties of Ionic Liquids and their
mixtures with CO₂ and Ar)**

GUILLERMO ALBERTO REYES TORRES
CONCEPCIÓN-CHILE
2012

Profesor Guía: Andrés Mejía Matallana
Dpto. de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería
Universidad de Concepción

RESUMEN

Los líquidos iónicos definidos en rigor como fluidos compuestos enteramente por iones, cuyo punto de fusión es igual o inferior a 100°C, se han convertido en un paradigma en el campo de los fluidos neotéricos. Desde las observaciones de Paul Walden en 1914 acerca del punto de fusión del nitrato de metilamonio aparecieron los indicios de una nueva clase de sustancias con características únicas. Dichos descubrimientos y observaciones permanecieron en latencia por lo menos hasta después de la primera guerra mundial donde la fuerza aérea norteamericana y grupos como los del pionero en líquidos iónicos Dr. John Wilkes retomaron el campo de dichos líquidos llamados en un principio “molten salts” sales fundidas, o sales cuaternarias licuadas de amonio. Estas sales presentaban una alta estabilidad térmica y una amplia ventana electroquímica, lo cual motivó investigaciones iniciales relacionadas con la generación de baterías y capacitores electroquímicos.

Después de la década de los 90's la investigación en el campo de los líquidos iónicos ha crecido de manera exponencial, esto debido al sinnúmero de aplicaciones que se han encontrado para estos fluidos. Como regla práctica se considera que el catión es responsable de las propiedades físicas y el anión responsable de las propiedades químicas, esta combinación y sus posibles variaciones le confieren a los líquidos iónicos “sintonizabilidad” en procesos y propiedades, por lo que han sido llamados sustancias de diseño. Adicionalmente estos líquidos presentan diversas características que los hacen amigables ambientalmente y su uso se ha implementado dentro de la llamada *Green Chemistry*.

En un intento por modelar y comprender la naturaleza fisicoquímica de los líquidos iónicos en el presente trabajo se han empleado tres metodologías independientes: simulación molecular (Dinámica Molecular), tensiometría de gota suspendida y modelos basados en teoría de campo medio, como es las ecuaciones de estado de base molecular (SAFT VR-Mie). A partir de la correcta