(19) OFICINA ESPAÑOLA DE PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA

(11) Número de publicación: **3 083 324**

(21) Número de solicitud: 202630560

(51) Int. CI.:

***C07D 231/40*** (2006.01)
***C07D 471/04*** (2006.01)
***B01D 53/14*** (2006.01)
***B01J 31/02*** (2006.01)

(12) SOLICITUD DE PATENTE A1

(22) Fecha de presentación:

**16.04.2026**

(43) Fecha de publicación de la solicitud:

**29.10.2026**

(71) Solicitantes:

**UNIVERSITAT JAUME I DE CASTELLÓ (100,00%)**
**Av. Vicent Sos Baynat, s/n**
**12071 Castellón de la Plana (Castellón) ES**

(72) Inventor/es:

**ZANATTA, Marcileia;**
**SANS SANGORRÍN, Víctor y**
**CORTÉS VALLÉS, Alejandra**

(74) Agente/Representante:

**UNGRÍA LÓPEZ, Javier**

(54) Título: **SALES ORGÁNICAS PARA UNA CAPTURA DE AIRE DIRECTA DE $CO_2$**

(57) Resumen:

Sales orgánicas para una captura de aire directa de $CO_2$.

La presente invención se dirige a una composición para absorber dióxido de carbono del aire o de fuentes diluidas que comprende una sal orgánica que comprende un anión que es un heterociclo insaturado, en el que el heterociclo insaturado comprende uno o más átomos de nitrógeno; y un catión (orgánico o inorgánico). Además, la presente invención se refiere a un dispositivo de captura directa de aire (DAC) o un embalaje que comprende la composición y un método para obtenerla.

**ES 3 083 324 A1**

## DESCRIPCIÓN

## SALES ORGÁNICAS PARA UNA CAPTURA DE AIRE DIRECTA DE $CO_2$

La eliminación del dióxido de carbono ($CO_2$) de los flujos de gas es un proceso clave en varios sectores industriales, que incluye la producción de energía, la purificación del gas natural y, más recientemente, las estrategias de mitigación climática como la captura directa de aire (DAC). Las tecnologías tradicionales dependen de soluciones acuosas de alcanolaminas, como la monoetanolamina (MEA) o la metildietanolamina (MDEA), que se unen químicamente al $CO_2$ a través de la formación de especies de carbamato o bicarbonato. Aunque estos sistemas han sido aplicados con éxito en el tratamiento de gases post-combustión, su uso directo en aplicaciones DAC enfrenta limitaciones críticas. Estas incluyen cinética de sorción lenta, baja capacidad de absorción bajo concentraciones de $CO_2$ atmosférico (~400 ppm), y procesos de regeneración intensivos en energía debido a la formación de aductos de carbamato estables. Además, la exposición prolongada al oxígeno y a la humedad en el aire puede llevar a la degradación química del sorbente, reduciendo su eficacia y vida operativa. Además, las soluciones de aminas son volátiles y corrosivas, lo que acorta la vida útil del sistema componentes y compromete la sostenibilidad del proceso general.

En vista de los problemas mencionados anteriormente, el problema técnico la presente invención es la provisión de composiciones aptas para capturar $CO_2$ directa de aire.

Para solventar este problema técnico la presente invención se dirige a una composición para absorber dióxido de carbono del aire que comprende una sal orgánica que comprende:

a) un anión que es un heterociclo insaturado, en el que el heterociclo insaturado comprende uno o más átomos de nitrógeno;

b) un catión orgánico o inorgánico.

La presente invención se refiere también a un método para preparar la composición descrita aquí, que comprende contactar un anión que es un heterociclo insaturado con un catión, y obtener así la composición.

Además, la presente invención se dirige a un dispositivo de captura directa de aire (DAC) para la recuperación de dióxido de carbono de la atmósfera, el dispositivo comprende una composición tal como descrita aquí.

La presente invención también se refiere a un embalaje que comprende la composición descrita aquí. El embalaje puede ser cualquier embalaje adecuado. Por ejemplo, el embalaje puede ser un contenedor hecho de plástico.

**Breve descripción de las figuras**

**Figura 1.-** Espectro $^{13}$C-NMR de TMA.Im en agua antes (A) y después (B) del experimento de captura pura de $CO_2$. Condiciones de sorción: solución 1M, burbujeando durante 15 minutos a temperatura ambiente.

**Figura 2.-** Espectro $^{1}$H-NMR de TMA.Im en agua antes (A) y después (B) del experimento de captura pura de $CO_2$. Condiciones de sorción: solución 1M, burbujeando durante 15 minutos a temperatura ambiente.

**Figura 3.-** Capacidades de sorción y cambios químicos de todos los sorbentes en $CO_2$ puro.

**Figura 4.-** Mediciones de pH antes y después de capturar experiencias en $CO_2$ puro.

**Figura 5.-** Espectro $^{13}$C-NMR de TMA.Im en agua antes (A) y después del experimento de captura de gases de combustión (B). Condiciones de sorción: solución 1M, 2 horas burbujeando a temperatura ambiente.

**Figura 6.-** Capacidades de sorción y cambios químicos de todos los sorbentes en el gas de combustión.

**Figura 7.-** Espectro $^{13}$C-NMR de TMA.Im en agua antes (A) y después del experimento de captura de aire (B). Condiciones de sorción: solución 1M, burbujeante a temperatura ambiente durante 48 horas.

**Figure 8.-** Capacidades de sorción y desplazamientos químicos de todos los sorbentes en aire durante 24 y 48 horas.

**Figura 9.-** Capacidades de sorción y valores de pH para Na.TBD en todos los gases. Com. significa gas de combustión.

**Figura 10.-** Adición de los resultados de la capacidad total de sorción para todos los sorbentes en $CO_2$ puro, gas de combustión y aire atmosférico (48h). Com. significa gas de combustión.

**Descripción de un ejemplo de realización de la invención**

La presente invención se dirige a una composición para absorber dióxido de carbono del aire que comprende una sal orgánica que comprende:

a) un anión que es un heterociclo insaturado, en el que el heterociclo insaturado comprende uno o más átomos de nitrógeno;

b) un catión orgánico o inorgánico.

La composición descrita aquí puede ser cualquier tipo de composición. El experto en la materia sabe cuáles tipos de composiciones son aptos para absorber dióxido de carbono, por ejemplo, del aire. La composición descrita aquí puede ser una composición absorbente. La composición puede ser un gas, un líquido o un sólido a una temperatura de 25 ºC y una presión de 1 atm. La composición puede estar localizado en una columna.

La absorción del $CO_2$ incluye cualquier absorción de $CO_2$. La composición puede capturar el $CO_2$ vía captura química. El término “captura química” incluye cualquier captura química. El experto en la materia sabe cuál captura química puede utilizarse con $CO_2$.

La presente invención contempla que al absorber dióxido de carbono se genera $HCO_3^-$ (bicarbonato). Alternativamente o adicionalmente, la presente invención prevé que al absorber dióxido de carbono se genera $HCO_3^-$ (bicarbonato) y/o carbamato.

La presente invención prevé que la absorción/captura química de $CO_2$ se realiza a una temperatura de entre - 20ºC a 90ºC, de entre -10ºC y 80 ºC, de entre 0ºC y 70 ºC, de entre 10 ºC y 60ºC de entre 20 ºC y 50 ºC, de entre 30ºC y 40 ºC o de entre 10 ºC y 30 ºC o a 25 Cº.

La presente invención contempla que el $CO_2$ capturado puede ser recuperado. La recuperación comprende cualquier recuperación. Por ejemplo, la recuperación puede ser una recuperación mediante calor. Por lo tanto, la presente invención contempla que, para la recuperación de $CO_2$, la composición puede calentarse a una temperatura de al menos 100 °C, 110 °C, 120 °C, 130 °C, 140 °C, 150 °C o superior a una presión de 1 atm. Además, el $CO_2$ puede ser directamente reutilizado para la formación de otros productos de valor añadido, como carbonatos cíclicos o formiato, una vez añadida el catalizador adecuado.

La presente invención define que la composición puede absorber dióxido de carbono del aire. El término “aire” incluye cualquier gas o aire atmosférico que comprende $CO_2$.

Por ejemplo, al aire puede ser $CO_2$ puro (más que 99%), gas o mezcla de gases de combustión que comprende al menos 1 % de $CO_2$ o aire atmosférico.

En consecuencia, la presente invención prevé, que la concentración del $CO_2$ en peso en relación del peso total del aire/gas de combustión es al menos 0,01 %, 0,02 %, 0,03 %, 0,04 %, 0,05 %, 0,06 %, 0,07 %, 0,08 %, 0,09 %, 0,1%, 0,2 %, 0,5 %, 0,7 %, 1 %, 2 %, 3 %, 4 %, 5 %, 6 %, 7 %, 8 %, 9%, 10 %, 11 %, 12 %, 13 % 14 %, 15 %, 16 % 17% 18 %, 19 %, 20 %, 30 %, 40 %, 50 %, 60 %, 70 % 80 %, 90 %, 99 % o es de 100 %. Por lo tanto, la concentración del $CO_2$ en peso en relación del peso total del aire/gas de combustión puede ser de entre 0,01 % y 100 %, de entre 0,01 % y 50 %, de entre 0,01 % y 25 % de entre 0,01 % y 20 %, de entre 0,01 % y 17 %, de entre 0,02 % y 17 %, de entre 0,03 % y 17 %, de entre 0,035 % y 16,5 %, de entre 0,035 % y 16 % o de entre 0,01 % y 0,05 %.

La presente invención contempla que el dióxido de carbono está presente en el aire a una concentración de entre 300 y 1000 ppm ,de entre 300 y 800 ppm, de entre 300 y 750 ppm, de entre 300 y 700 ppm, de entre 350 y 650 ppm, de entre 350 y 600 ppm, de entre 350 y 550 ppm, de entre 350 y 500 ppm o de entre 400 y 450 ppm.

La presente invención prevé que la composición descrita aquí absorbe mínimo 1,00 $mol_{CO2}/mol_{composición\ absorbente}$, donde se mide la capacidad de absorción de $CO_2$ colocando la composición en solución en un vial sellado y el $CO_2$ puro comprimido con una pureza de al menos el 99 % es burbujeado a través de 10 ml de 1mol/L de la sal orgánica tal y como descrito aquí en agua a un caudal de 800 ml/min durante 15 minutos en condiciones ambiente. Este método está también descrito en los ejemplos.

La presente invención contempla que la composición descrita aquí absorbe mínimo 1 $mol_{CO2}/mol_{composición\ absorbente}$, donde se mide la capacidad de absorción de $CO_2$ colocando la composición absorbente en solución en un vial sellado y el gas comprendiendo 15,9 % $CO_2$, 0,4 % CO, 0,4 % $CH_4$ y 0,5 % Ar es burbujeado a través de 5 ml de 1mol/L de la sal orgánica tal y como descrito aquí en agua a un caudal de 200 ml/min durante 2 horas en condiciones ambiente. Este método está también descrito en los ejemplos.

La presente invención contempla que la composición descrita aquí absorbe mínimo de 0,3 o 0,6 $mol_{CO2}/mol_{composición\ absorbente}$ después de 24 horas, donde se mide la capacidad

de absorción de $CO_2$ contactando la composición absorbente con aire atmosférico en condiciones ambiente. Este método está también descrito en los ejemplos.

La presente invención contempla que la composición descrita aquí absorbe mínimo de 0,6 o 0,75 $mol_{CO2}/mol_{composición\ absorbente}$ después de 48 horas, donde se mide la capacidad de absorción de $CO_2$ contactando la composición absorbente con aire atmosférico en condiciones ambiente. Este método está también descrito en los ejemplos.
La presente invención prevé que la composición de la presente invención no comprende ningún compuesto con un grupo hidroxilo y/o hidróxido.

El término “grupo hidroxilo” se dirige a cualquier compuesto que comprende un grupo hidroxilo (-OH). La persona experta en la materia sabe que compuestos comprenden un grupo hidroxilo. Por ejemplo, los alcoholes son compuestos orgánicos que contienen uno o más grupos hidroxilo.

El término “grupo hidróxido” se dirige a cualquier compuesto que comprende un grupo hidróxido ($OH^-$). En este caso el grupo OH actúa como un anión. La persona experta en la materia sabe que compuestos comprenden un grupo hidróxido.

Alternativamente o adicionalmente la presente invención prevé que la composición de la presente invención no comprende ninguna amina. Se entiende que en este caso la composición no comprende ninguna amina aparte del anión que es un heterociclo insaturado, en el que el heterociclo insaturado comprende uno o más átomos de nitrógeno.

El término “amina” se dirige a cualquier amina. La amina puede ser compuestos químicos orgánicos que se consideran derivados del amoniaco ($NH_3$). Se forman cuando uno, dos o los tres átomos de hidrógeno del amoniaco son sustituidos por grupos que contienen carbono, como grupos alquilo (cadenas lineales) o arilo (anillos aromáticos). La persona experta en la materia sabe que compuestos son aminas.

Por lo tanto, la presente invención prevé que la amina es una amina primaria ($R\text{-}NH_2$), secundaria ($R_2\text{-}NH$), tercera ($R_3\text{-}N$) o cuaterna ($NR_4^+$). Preferiblemente, la amina es una amina primaria o secundaria. La amina cuaterna puede ser un tetralquilamonio.

La composición tal y como descrita aquí comprende una sal orgánica. Tal y como se describe aquí una sal orgánica puede ser cualquier sal orgánica que comprende un heterociclo insaturado, en el que el heterociclo insaturado comprende uno o más átomos de nitrógeno y un catión.

La presente invención prevé que la sal orgánica es soluble en agua y/o disolventes polares.

El término “soluble” indica que por lo menos una parte de la sal se disuelva en agua o disolventes polares. La persona sabe cómo determinar si una sal orgánica es soluble o no. Por ejemplo, puede utilizar la prueba de tubo de ensayo. Para esta prueba la persona experta en la materia toma una pequeña cantidad de la sal (aprox. 0,1 g) y añade 10 ml de agua destilada. Después agita la mezcla vigorosamente durante un minuto a una temperatura de 25 ºC y una presión de 1 atm. Cuando la solución es translucida) la sal es soluble. Si el líquido se ve turbio o hay sólido en el fondo la sal es insoluble. Cuando parte del sólido desaparece, pero no toda la sal desapareció, la sal es ligeramente soluble. Por lo tanto, la sal orgánica descrita aquí no es una sal insoluble.

El “agua” tal y como descrito aquí puede ser cualquier agua. Por ejemplo, el agua puede ser agua destillada.

El disolvente polar tal y como descrito aquí puede ser cualquier disolvente polar. Aunque la molécula es neutra en su conjunto, disolventes polares un "extremo" con una ligera carga negativa y otro con una ligera carga positiva (un dipolo). Una persona experta en la materia sabe cuáles disolventes pueden utilizarse como disolventes polares.

El disolvente polar puede ser un disolvente polar prótico o aprótico.

Un disolvente polar prótico son aquellos que tienen átomos de hidrógeno unidos directamente a un átomo muy electronegativo (como oxígeno o nitrógeno). Pueden formar puentes de hidrógeno. Ejemplos no limitantes de disolventes próticos incluyen agua, methanol, ethanol, y alcoholes en general.

Un disolvente polar aprótico tiene dipolos fuertes, pero no tiene hidrógenos capaces de formar puentes de hidrógeno. Ejemplos no limitantes de disolventes apróticos incluyen acetona, dimetilsulfóxido, dimetilformamida, dimetilcarbonato, dioxano, tetrahidrofurano

En consecuencia, ejemplos no limitantes de disolventes polares son agua, metanol, etanol, dimetilsulfóxido, dimetilformamida, dimetilcarbonato, dioxano.

La composición tal y como descrita aquí comprende una sal orgánica que comprende un anión que es un heterociclo insaturado, en el que el heterociclo insaturado comprende uno o más átomos de nitrógeno.

El anión de un heterociclo insaturado que comprende uno o más átomos de nitrógeno puede ser cualquier heterociclo insaturado que comprende uno o más átomos de nitrógeno. La persona experta en la materia sabe cuál heterociclo está incluido en esta definición.

El término “heterocíclico” o “heterociclo” tal y como se utiliza en el presente documento se refiere colectivamente a los heterociclos no aromáticos y a los grupos heteroarilo que comprenden uno o más átomos de nitrógenos. La persona experta conoce los heterociclos que comprenden uno o más átomos de nitrógenos.

La presente invención prevé que el heterociclo descrito aquí puede comprender 1, 2, 3, 4, 5, 6 o más átomos de nitrógeno. Por ejemplo, el heterociclo descrito aquí puede comprender de entre 1 a 10, de entre 1 a 6 o de entre 1 a 3 átomos de nitrógeno.

La presente invención contempla que el heterociclo no comprende átomos de oxígeno (O) y/o sufro (-S). Adicionalmente o alternativamente la presente invención contempla que el sustituyente del heterociclo no comprende átomos de oxígeno (O) y/o azufre (-S).

La presente invención contempla que el anillo del heterociclo puede comprender de entre 3 y 10 miembros, de entre 5 a 7 miembros o 5 o 6 miembros en el que al menos un átomo es un átomo de nitrógeno. La presente invención prevé que el heterociclo puede ser un heterociclo aromático o no aromático. Preferiblemente el heterociclo es un heterociclo aromático.

Los grupos heteroarilo de 5 miembros ejemplares que contienen 1 heteroátomo incluye, sin limitación, pirrolilo. Los grupos heteroarilo de 5 miembros ejemplares que contienen 2 heteroátomos incluyen, sin limitación, imidazolilo, pirazolilo, oxazolilo, isoxazolilo,

tiazolilo e isotiazolilo. Los grupos heteroarilo de cinco miembros que contienen tres heteroátomos incluyen, sin limitación, triazolilo, oxadiazolilo y tiadiazolilo. Los grupos heteroarilo de cinco miembros que contienen cuatro heteroátomos incluye, sin limitación, tetrazolilo.

Por lo tanto, heterocíclicos ejemplares no limitantes de 5 miembros comprenden uno o más átomos de nitrógeno son pirrolilo, imidazolilo, pirazolilo, oxazolilo, isoxazolilo, tiazolilo, isotiazolilo, triazolilo, oxadiazolilo, tiadiazolilo y tetrazolilo.

Los grupos heterocíclicos ejemplares de 6 miembros que contienen 1 heteroátomo incluyen, sin limitación, piridinilo, piperidinilo y dihidropiridinilo. Los grupos heterocíclicos ejemplares de 6 miembros que contienen 2 heteroátomos incluyen, sin limitación, piperazinilo, pirimidinilo y pirazinilo y morfolinilo. Entre los grupos heteroarilo de 6 miembros que contienen 3 o 4 heteroátomos se incluyen, sin limitación, triazinilo y tetrazinilo, respectivamente.

Por lo tanto, heterocíclicos ejemplares no limitantes de 6 miembros comprenden uno o más átomos de nitrógeno son piridinilo, piperidinilo y dihidropiridinilo, piperazinilo, pirimidinilo, pirazinilo, morfolinilo, triazinanilo y tetrazinilo.

Por lo tanto, heterocíclicos ejemplares de 7 miembros comprenden azepanilo.

Un heterociclo tal y como descrito aquí puede ser cualquier heterociclo. Por lo tanto, el heterociclo puede ser un ciclo único, un biciclo, triciclo o un multiciclo de por ejemplo 4 o más ciclos. Ejemplos no limitantes de multiciclos son porfirinas, ftalocianinas y/o corroles.

Los biciclos, triciclos o multicilcos pueden ser fusionado (compartir dos átomos adyacentes/un enlace), spiro (compartir un átomo cuaternario común) o comprender puente (compartir dos átomos no adyacentes, a menudo con átomos intermedios).

Ejemplos no limitantes de heterociclos fusionados son indol, indolina, iso-indolo, indolizina, quinolina, purina.

Un ejemplo de un heterociclo spiro es 1,3-Diazaspiro[4.4]non-1-en-4-one.

Ejemplos no-limitantes de heterociclos que comprende uno o más átomos de nitrógeno incluyen el anión de pirrol, indol, quinolina, piridina, pirimidina, imidazol, pirazol, triazol, piridazina, pirazina quinolina, indolina, iso-indolo, indolizina, purina preferiblemente triazol, pirazol, imidazol y pirrol.

El término “insaturado” tal y como descrito aquí significa que el heterociclo comprende 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8 o más doble(s) unión(es).

El anión de un heterociclo insaturado que comprende uno o más átomos de nitrógeno puede ser substituido o no substituido.
El heterociclo insaturado descrito aquí puede estar sustituido con 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10 o más sustituyentes tal y como descritos aquí. Preferiblemente, el heterociclo insaturado descrito aquí está sustituido con 1 o 2 sustituyentes.

El heterociclo insaturado que comprende uno o más átomos de nitrógeno puede estar sustituido de uno o más grupos seleccionados entre H, ($C_1$-$C_6$)-alquilo lineal o ramificado, $C_1$-$C_6$)-alqueno lineal o ramificado, ($C_1$-$C_6$)-alquino lineal o ramificado, -$NH_2$, NH($C_1$-$C_6$)-alquilo lineal o ramificado, N($C_1$-$C_6$)$_2$-alquilo lineal o ramificado, -OH, O($C_1$-$C_6$)$_2$-alquilo lineal o ramificado , -$O^-$, -COO($C_1$-$C_6$)- alquilo lineal o ramificado, amida, -O($C_1$-$C_6$)- alquilo lineal o ramificado, arilo o benzílico; -$CF_3$, -$NO_2$, -CN, -$SO_3$, -CHO, -CO($C_1$-$C_6$)-alquilo lineal o ramificado, -COOH, -$NH_3$, -N-COO($C_1$-$C_6$)- alquilo lineal o ramificado y/o halógeno.

El término “H” se refiere a hidrogeno.

El término “($C_1$-$C_6$)-alquilo lineal o ramificado” se refiere a un radical hidrocarburo saturado de cadena lineal o ramificado que tiene de uno a seis átomos de carbono (alquilo $C_1$-$C_6$) preferiblemente de uno a tres (alquilo $C_1$-$C_3$) o de uno o dos (alquilo $C_1$-$C_2$) átomos de carbono.

En general, un rango numérico como “alquilo $C_1$-$C_6$” significa que el grupo alquilo puede estar formado por 1 átomo de carbono, 2 átomos de carbono, 3 átomos de carbono, 4 átomos de carbono, 5 átomos de carbono, 6 átomos de carbono.

Ejemplos de alquilo lineal o ramificado $C_1$-$C_6$ incluyen, entre otros, metilo, etilo, n-propilo, isopropilo, 2-metil-1-propilo, 2-metil-2-propilo, 2-metil-1 -butilo, 3-metil-1 - butilo, 2-metil-

3-butilo, 2,2-dimetil-i-propilo, 2-metil-1 -pentilo, 3-metil-1 -pentilo, 4-metil- 1 -pentilo, 2-metil-2-pentilo, 3-metil-2-pentilo, 4-metil-2-pentilo, 2,2-dimetil-1 -butilo, 3,3- dimetil-1 -butilo, 2-etil-1 -butilo, n-butilo, isobutilo, sec-butilo, t-butilo, n-pentilo, isopentilo, neopentilo, terc-amilo y hexilo.

La presente invención prevé que el heterociclo insaturado descrito aquí está sustituido con 1 o 2 sustituyentes de ($C_1$-$C_6$)-alquilo lineal o ramificado.

El término ($C_1$-$C_6$)-alqueno lineal o ramificado, se refiere a una cadena lineal o ramificada, opcionalmente sustituida, que tiene al menos un doble enlace y que (salvo que se especifique lo contrario) tiene 2-10, 2-9, 2-8, 2-7, 2-6, 2-5, 2-4 o 2-3 átomos de carbono (por ejemplo, $C_{2-10}$, $C_{2-6}$ o $C_{2-3}$). La “cadena de alquileno” puede ser un grupo polimetileno, es decir, -($CH_2$)n-, donde n es un número entero positivo, por ejemplo, de 1 a 10, de 1 a 6, de 1 a 4, de 1 a 3, de 1 a 2 o de 2 a 3. Entre los grupos alquenilo ejemplares se incluyen etenilo (vinilo), propenilo como, por ejemplo, alilo, isopropileno, butenilo, pentenilo, hexenilo, heptenilo, octenilo, nonenilo y decenilo.

La presente invención prevé que el heterociclo insaturado descrito aquí está sustituido con 1 o 2 sustituyentes de ($C_1$-$C_6$)-alqueno lineal o ramificado.

El término ($C_1$-$C_6$)-alquino lineal o ramificado se refiere a un grupo hidrocarburo de cadena lineal o ramificada, opcionalmente sustituido, que tiene al menos un triple enlace y que (salvo que se especifique lo contrario) tiene 2-10, 2-8, 2-6, 2-4 o 2-3 átomos de carbono (por ejemplo, $C_{2-10}$, $C_{2-8}$, $C_{2-6}$, $C_{2-4}$ o $C_{2-3}$). Entre los grupos alquinilo ejemplares se incluyen etinilo, propinilo, butinilo, pentinilo, hexinilo, heptinilo, octinilo, nonilo y decinilo.

La presente invención prevé que el heterociclo insaturado descrito aquí está sustituido con 1 o 2 sustituyentes de ($C_1$-$C_6$)-alquino lineal o ramificado.

Tal y como se utiliza en el presente documento, “amino” se refiere al grupo -$NH_2$.

El término “NH($C_1$-$C_6$)- alquilo lineal o ramificado” indica que hay un átomo de nitrógeno unido a un hidrógeno y a un ($C_1$-$C_6$)-alquilo en donde el alquilo puede ser lineal o ramificado tal y como se describe en otra parte del presente documento.

Tal y como se utiliza en el presente documento el término “$N(C_1-C_6)_2$-alquilo lineal o ramificado” se dirige a un átomo de nitrógeno unido a un ($C_1$-$C_6$)- alquilo en donde el alquilo puede ser lineal o ramificado tal y como se describe en otra parte del presente documento

Tal y como se utiliza en el presente documento, “hidroxi” o “hidroxilo” se refiere al grupo -OH.

El término “$O(C_1-C_6)_2$-alquilo lineal o ramificado” quiere decir que un átomo de oxígeno está unido a dos grupos ($C_1$-$C_6$)- alquilo en donde el alquilo puede ser lineal o ramificado tal y como se describe en otra parte del presente documento. Los dos grupos ($C_1$-$C_6$)-alquilo pueden ser los mismos o diferentes.
Tal y como se utiliza en el presente documento, “iono oxido” se refiere al grupo $-O^-$.

El término “-$COO(C_1-C_6)$-alquilo lineal o ramificado” se refiere a compuestos en donde un átomo de carbono está unido a dos oxígenos y un ($C_1$-$C_6$)-alquilo en donde el alquilo puede ser lineal o ramificado tal y como se describe en otra parte del presente documento.

El término “amida” se dirige a compuesto que tienen una estructura general de R-CO-NR en donde R puede ser un halógeno o un grupo ($C_1$-$C_6$)-alquilo lineal o ramificado tal y como se describe en otra parte del presente documento. La presente invención prevé que la amida puede ser una amida primaria (R-CO-$NH_2$), secundaria (R-CO-NH-$R^1$) o terciaria (R-CO-$N(R^1)_2$ en donde $R^1$ es un grupo ($C_1$-$C_6$)-alquilo lineal o ramificado tal y como se describe en otra parte del presente documento.

El término “$O(C_1-C_6)$-alquilo lineal o ramificado” quiere decir que un átomo de oxígeno está unido a un ($C_1$-$C_6$)-alquilo en donde el alquilo puede ser lineal o ramificado tal y como se describe en otra parte del presente documento.

Tal y como se utiliza en el presente documento, “arilo” se refiere en general a un radical hidrocarburo aromático de carbono en el anillo. La presente invención prevé que el arilo comprende de entre 3 y 10 átomos de carbono, preferiblemente de entre 3 a 7 o de 5 o 6 átomos de carbono. En consecuencia, el arilo puede ser un ($C_3$-$C_{10}$) arilo, un ($C_3$-$C_7$) arilo, un ($C_3$-$C_6$)arilo, un ($C_5$)-arilo y/o un ($C_6$)-arilo. Entre los grupos arilo ejemplares se incluyen el fenilo, ciclopentadienilo y el naftilo.

El grupo “benzílico” o “bencílico” tal como descrito aquí se refiere a un grupo arilo tal y como descrito aquí que está unido a un grupo -$CH_2$. Por lo tanto, la presente invención prevé que el arilo comprende de entre 3 y 10 átomos de carbono, preferiblemente de entre 3 a 7 o de 5 o 6 átomos de carbono. En consecuencia, el arilo puede ser un ($C_3$-$C_{10}$) bencílico, un ($C_3$-$C_7$) bencílico, un ($C_3$-$C_6$) bencílico, un ($C_5$)- bencílico y/o un ($C_6$)-bencílico.

Tal y como se utiliza en el presente documento, “trifluorometilo” se refiere al grupo -$CF_3$.

Tal y como se utiliza en el presente documento, “nitro” se refiere al grupo -$NO_2$.

Tal y como se utiliza en el presente documento, “ciano” se refiere al grupo -C≡N. El término “ciano” se utiliza indistintamente con el término “nitrilo”.

Tal y como se utiliza en el presente documento, “sulfónico” se refiere al grupo -$SO_3$.

Tal y como se utiliza en el presente documento, “formilo” se refiere al grupo -CHO.

El término “-CO($C_1$-$C_6$)-alquilo lineal o ramificado” se refiere a compuestos en donde un átomo de carbono está unido a un oxígeno y un ($C_1$-$C_6$)-alquilo en donde el alquilo puede ser lineal o ramificado tal y como se describe en otra parte del presente documento.

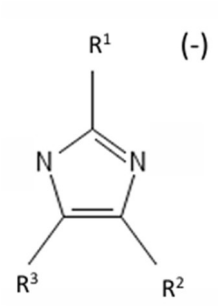
Tal y como se utiliza en el presente documento, “carboxilo” se refiere al grupo -COOH.

Tal y como se utiliza en el presente documento, “amoníaco” se refiere al grupo -$NH_3$.

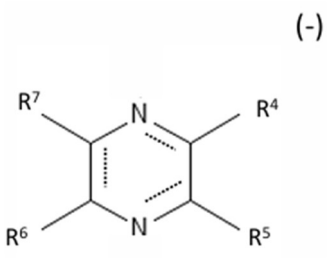
El término “-N-COO($C_1$-$C_6$)-alquilo lineal o ramificado” se refiere a compuestos en donde un átomo de nitrógeno está unido a un carbono y dos oxígenos y un ($C_1$-$C_6$)-alquilo en donde el alquilo puede ser lineal o ramificado tal y como se describe en otra parte del presente documento.

Tal y como se utiliza en el presente documento, “halógeno” se refiere al flúor (F), cloro (Cl), bromo (Br) o yodo (I). Preferiblemente, el halógeno es flúor o cloro. Más preferiblemente, el halógeno es flúor.

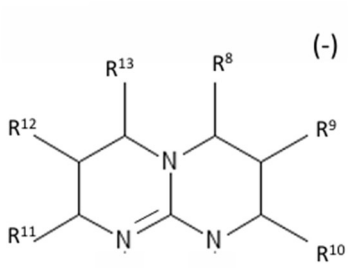
La presente invención también prevé que el heterociclo insaturado es un heterociclo de la formula I, II o III:




(I)




(II) o




(III).

en donde $R^1$ a $R^{13}$ están selecionados independentemente de entre H, ($C_1$-$C_6$)-alquilo lineal o ramificado, ($C_1$-$C_6$)-alqueno lineal o ramificado, ($C_1$-$C_6$)-alquino lineal o ramificado, -$NH_2$, NH($C_1$-$C_6$)- alquilo lineal o ramificado, N($C_1$-$C_6$)$_2$-alquilo lineal o ramificado, -OH, O($C_1$-$C_6$)$_2$-alquilo lineal o ramificado, -$O^-$, -COO($C_1$-$C_6$)-alquilo lineal o ramificado, amida, -O($C_1$-$C_6$)- alquilo lineal o ramificado, arilo o benzílico; -$CF_3$, -$NO_2$, -CN, -$SO_3$, -CHO, -CO($C_1$-$C_6$)-alquilo lineal o ramificado, -COOH, -$NH_3$, -N-COO($C_1$-$C_6$)- alquilo lineal o ramificado y/o halógeno.

La presente invención también prevé que $R^1$ a $R^{13}$ están seleccionados independentemente de entre H, ($C_1$-$C_3$)-alquilo lineal o ramificado, -$NH_2$, NH($C_1$-$C_3$)- alquilo lineal o ramificado, N($C_1$-$C_6$)$_2$-alquilo lineal o ramificado, -OH, O($C_1$-$C_3$)$_2$-alquilo lineal o ramificado, -$O^-$, -COO($C_1$-$C_3$)-alquilo lineal o ramificado, amida, -O($C_1$-$C_3$)- alquilo lineal o ramificado, -$CF_3$, -$NO_2$, -CN, -$SO_3$, -CHO, -CO($C_1$-$C_6$)-alquilo lineal o ramificado, -COOH, -$NH_3$, -N-COO($C_1$-$C_3$)- alquilo lineal o ramificado y/o halógeno.

La presente invención también contempla que $R^1$ a $R^{13}$ están selecionados independentemente de entre H, ($C_1$-$C_6$)-alquilo lineal o ramificado, $C_1$-$C_6$)-alqueno lineal o ramificado, ($C_1$-$C_6$)-alquino lineal o ramificado, -$NH_2$, NH($C_1$-$C_6$)- alquilo lineal o ramificado, N($C_1$-$C_6$)$_2$-alquilo lineal o ramificado, -OH, -O($C_1$-$C_6$)- alquilo lineal o ramificado, -$CF_3$, -$NO_2$, -CN, -$SO_3$, -CHO, -CO($C_1$-$C_6$)-alquilo lineal o ramificado, -COOH, -$NH_3$, -N-COO($C_1$-$C_6$)- alquilo lineal o ramificado y/o halógeno.

La presente invención también contempla que $R^1$ a $R^{13}$ están selecionados independentemente de entre H, ($C_1$-$C_6$)-alquilo lineal o ramificado, $C_1$-$C_6$)-alqueno lineal o ramificado, ($C_1$-$C_6$)-alquino lineal o ramificado, -$NH_2$, NH($C_1$-$C_6$)- alquilo lineal o ramificado, -OH, -O($C_1$-$C_6$)- alquilo lineal o ramificado, -$CF_3$, y/o halógeno.

La presente invención también prevé que $R^1$ a $R^{13}$ están selecionados independentemente de entre H, ($C_1$-$C_6$)-alquilo lineal o ramificado, -$NH_2$, -O($C_1$-$C_6$)-alquilo lineal o ramificado, -$CF_3$, y/o halógeno.

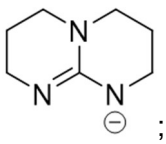
La presente invención también contempla que $R^1$ a $R^{13}$ están selecionados independentemente de entre H, ($C_1$-$C_3$)-alquilo lineal o ramificado, -$NH_2$, -O($C_1$-$C_3$)-alquilo lineal o ramificado, -$CF_3$, y/o halógeno.

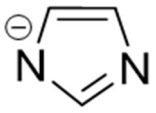
La presente invención también contempla que $R^1$ a $R^{13}$ están selecionados independentemente de entre H, metil, etil, -O($C_1$)-alquilo, -$NH_2$, -$CF_3$, Cl, Br y/o I.

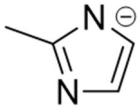
La presente invención también prevé que el heterociclo insaturado es un heterociclo de la formula I, II o III en donde en donde $R^1$ a $R^{19}$ están seleccionados independientemente de entre H y/o ($C_1$-$C_6$)-alquilo lineal o ramificado.

La presente invención también prevé que el heterociclo insaturado es un heterociclo de la formula I, II o III en donde en donde $R^1$ a $R^{19}$ están seleccionados independientemente de entre H y/o ($C_1$-$C_3$)-alquilo lineal o ramificado.

La presente invención prevé que el heterociclo insaturado es



;


o


.

La composición tal y como descrita aquí comprende una sal orgánica que comprende un catión.

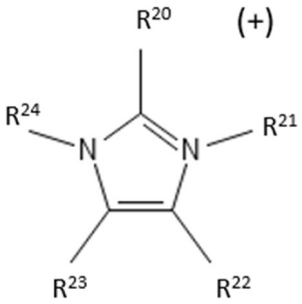
Tal y como se describe aquí el “catión” puede ser cualquier catión. La persona experta en la materia sabe cuál catión puede utilizar. La presente invención prevé que el catión puede ser un catión orgánico o inorgánico.

El catión orgánico puede ser cualquier catión orgánico. La persona experta en la materia sabe que catión orgánico puede utilizar. Ejemplos no limitantes de cationes orgánicos incluyen piridinio piperidinio, morfolino, guandinio, colinio, amonio, imidazolio, pirolidinio,

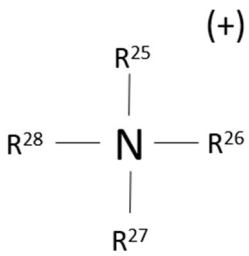
por ejemplo, 1-butyl-2,3-dimethylimidazolio, pirolidinio preferiblemente amonio, tetrametilamonio, colinio, imidazolio, 1-butyl-2,3-dimethylimidazolio, 1-alquil-2,3-dialquilimidazolio, tetralaquilamonio, cholinio, dialquilpirriolidinio, tetraalquilfosfonio y/o pyrolidinio substituidos o no substituidos.

Los cationes orgánicos pueden estar substituidos con H, ($C_1$-$C_6$)-alquilo lineal o ramificado, -$NH_2$, NH($C_1$-$C_6$)- alquilo lineal o ramificado, N($C_1$-$C_6$)$_2$-alquilo lineal o ramificado, -OH, O($C_1$-$C_6$)$_2$-alquilo lineal o ramificado, -$O^-$, -COO($C_1$-$C_6$)-alquilo lineal o ramificado, amida, -O($C_1$-$C_6$)- alquilo lineal o ramificado, arilo o benzílico; -$CF_3$, -$NO_2$, -CN, -$SO_3$, -CHO, -CO($C_1$-$C_6$)-alquilo lineal o ramificado, -COOH, -$NH_3$, -N-COO($C_1$-$C_6$)- alquilo lineal o ramificado y/o halógeno.

El catión orgánico puede tener la fórmula (IV) o (V)




(IV) o




(V)

en donde $R^{20}$ a $R^{28}$ están seleccionados independientemente de entre H, ($C_1$-$C_6$)-alquilo lineal o ramificado, $C_1$-$C_6$)-alqueno lineal o ramificado, ($C_1$-$C_6$)-alquino lineal o ramificado, -$NH_2$, NH($C_1$-$C_6$)- alquilo lineal o ramificado, N($C_1$-$C_6$)$_2$-alquilo lineal o ramificado, -OH, O($C_1$-$C_6$)$_2$-alquilo lineal o ramificado, -$O^-$, -COO($C_1$-$C_6$)-alquilo lineal o ramificado, amida, -O($C_1$-$C_6$)- alquilo lineal o ramificado, arilo como ($C_3$-$C_{10}$) arilo o benzílico; -$CF_3$, -$NO_2$, -CN, -$SO_3$, -CHO, -CO($C_1$-$C_6$)-alquilo lineal o ramificado, -COOH, -$NH_3$, -N-COO($C_1$-$C_6$)- alquilo lineal o ramificado y/o halógeno.

La presente invención prevé que $R^{20}$ a $R^{28}$ están seleccionados independientemente de entre H, ($C_1$-$C_6$)-alquilo lineal o ramificado, $C_1$-$C_6$)-alqueno lineal o ramificado, ($C_1$-$C_6$)-alquino lineal o ramificado, -$NH_2$, NH($C_1$-$C_6$)- alquilo lineal o ramificado, N($C_1$-$C_6$)$_2$-alquilo lineal o ramificado, -OH, amida, -$CF_3$, -$NO_2$, -CN, -$SO_3$, -CHO, -CO($C_1$-$C_6$)-alquilo lineal o ramificado, -COOH, -$NH_3$, -N-COO($C_1$-$C_6$)- alquilo lineal o ramificado y/o halógeno.

La presente invención prevé que $R^{20}$ a $R^{28}$ están seleccionados independientemente de entre H, ($C_1$-$C_6$)-alquilo lineal o ramificado, -$NH_2$, NH($C_1$-$C_6$)- alquilo lineal o ramificado, N($C_1$-$C_6$)$_2$-alquilo lineal o ramificado, -OH, amida, -$CF_3$, -$NH_3$, y/o halógeno.

La presente invención prevé que $R^{20}$ a $R^{28}$ están seleccionados independientemente de entre H y/o ($C_1$-$C_6$)-alquilo lineal o ramificado.

La presente invención prevé que $R^{20}$ a $R^{28}$ están seleccionados independientemente de entre H y/o ($C_1$-$C_4$)-alquilo lineal o ramificado.

La presente invención prevé que $R^{20}$ a $R^{28}$ están seleccionados independientemente de entre H, metilo, etilo, n-propilo, isopropilo, 2-metil-1-propilo, 2-metil-2-propilo, 2-metil-1 -butilo, 3-metil-1 - butilo, 2-metil-3-butilo, 2,2-dimetil-i-propilo, 2-metil-1 -pentilo, 3-metil-1 -pentilo, 4-metil- 1 -pentilo, 2-metil-2-pentilo, 3-metil-2-pentilo, 4-metil-2-pentilo, 2,2-dimetil-1 -butilo, 3,3- dimetil-1 -butilo, 2-etil-1 -butilo, n-butilo, isobutilo, sec-butilo, t-butilo, n-pentilo, isopentilo, neopentilo, terc-amilo y hexilo.

La presente invención prevé que $R^{20}$ a $R^{28}$ están seleccionados independientemente de entre H, metil, etil, propil, butil, isobutil, isopropil.

El catión orgánico puede ser un catión de formula IV en donde $R^{20}$ es metil, $R^{21}$ es metil, $R^{22}$ es hidrogeno $R^{23}$ es hidrogeno y $R^{24}$ es butil.

El catión orgánico puede ser un catión de formula V en donde $R^{25}$ es metil, $R^{26}$ es metil, $R^{27}$ es metil y $R^{28}$ es metil.

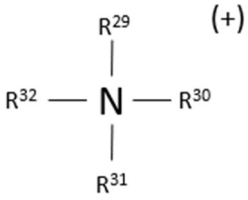
El catión orgánico puede tener la fórmula (IV) o (V) tal y como descrito aquí o ser un catión inorgánico tal y como descrito aquí.

El catión inorgánico puede ser cualquier catión orgánico. La persona experta en la materia sabe que catión inorgánico puede utilizar. Ejemplos no limitantes de cationes inorgánicos incluyen $Na^+$, $Ca^{2+}$, $Mg^{2+}$, $K^+$, $Ag^+$, $Zn^{2+}$, $Al^{3+}$, $Fe^{3+}$, $Li^+$ y/o $NH_4^+$ preferiblemente, $Na^+$, $Ca^{2+}$, $Mg^{2+}$ y/o $K^+$.

La presente invención prevé que el catión puede ser un catión divalente, amonio o una amina cuaternaria. La presente invención también prevé que la composición no comprende una amina cuaterna, por ejemplo, un tetralquilamonio.

Tal y como se define aquí un amonio tiene la fórmula $NH_4^+$.

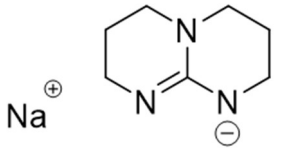
Tal y como se define aquí una amina cuaternaria es cualquier amina cuaternaria. La amina cuaternaria puede tener fórmula (VI)



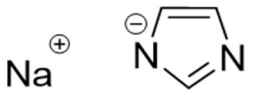
(VI) en donde en donde $R^{29}$ a $R^{32}$ están seleccionados independientemente de entre H, ($C_1$-$C_6$)-alquilo lineal o ramificado, $C_1$-$C_6$)-alqueno lineal o ramificado, ($C_1$-$C_6$)-alquino lineal o ramificado, arilo como ($C_3$-$C_{10}$) arilo y/o benzílico como ($C_3$-$C_{10}$) bencílico.

Cuando la amina cuaternaria es un tetralquilamonio, este puede tener la formula (VI) en donde $R^{29}$ a $R^{32}$ están seleccionados independientemente de entre ($C_1$-$C_6$)-alquilo lineal o ramificado.

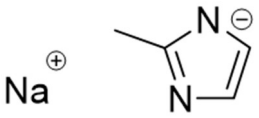
La sal orgánica descrita aquí puede entonces ser una sal orgánica que comprende



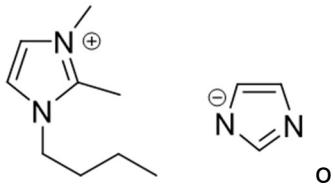
;



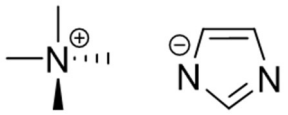
;



;



o



.

La presente invención se dirige a un método para preparar la composición descrita aquí, que comprende contactar un anión que es un heterociclo insaturado con un catión, y obtener así la composición.

La presente invención también se refiere a un dispositivo de captura directa de aire (DAC) para recuperar dióxido de carbono de la atmósfera, el dispositivo comprende una composición tal y como descrita aquí.

El dispositivo de DAC tal y como se describe aquí puede ser cualquier dispositivo de DAC. La persona experta en la materia sabe que DACs pueden utilizarse. Por ejemplo, el dispositivo puede ser un dispositivo para DAC con disolventes líquidos o un dispositivo para DAC con sorbentes sólidos.

Un dispositivo para DAC con disolventes líquidos puede comprender ventiladores que aspiran el aire y lo pasan por unas estructuras llamadas "contactores" donde fluye el líquido. El $CO_2$ reacciona químicamente con el líquido y, por ejemplo, se puede convertir en una sal de carbonato. Para recuperar el $CO_2$, por ejemplo, el líquido se calienta a temperaturas muy altas (cerca de 900°C).

Un dispositivo para DAC con sorbentes sólidos puede comprender filtros químicos sólidos (sorbentes) que actúan como una "esponja". Cuando el aire pasa, el $CO_2$ se queda pegado a la superficie del filtro. Una vez que el filtro está saturado se puede recuperar el $CO_2$ calentando a temperaturas moderadas (entre 80°C y 100°C) o se cambia la presión para que el filtro suelte el gas.

La presente invención también se dirige a un embalaje que comprende la composición tal y como descrita aquí.

A menos que se indique lo contrario, los siguientes términos utilizados en este documento, incluyendo la descripción y las reivindicaciones, tienen las definiciones que se dan a continuación.

Cabe señalar que, tal como se utilizan en el presente documento, las formas singulares “un”, “una” y “la/lo” incluyen referencias plurales a menos que el contexto indique claramente lo contrario. Así, por ejemplo, la referencia a “una composición” incluye uno o más de dichas composiciones diferentes y la referencia a “el método” incluye la referencia a pasos y métodos equivalentes conocidos por los expertos en la materia que podrían modificarse o sustituirse por los métodos aquí descritos.

Los expertos en la materia reconocerán, o serán capaces de determinar, mediante experimentación rutinaria, muchos equivalentes a las realizaciones específicas de la invención aquí descritas. Se pretende que la presente invención abarque dichos equivalentes.

A menos que se indique lo contrario, el término “al menos” que precede a una serie de elementos debe entenderse que se refiere a cada elemento de la serie. Los expertos en la materia reconocerán, o podrán determinar mediante experimentación rutinaria, muchos equivalentes a las realizaciones específicas de los métodos y usos descritos en el presente documento. Se pretende que la presente invención abarque dichos equivalentes.

A lo largo del texto de esta divulgación se citan varios documentos. Cada uno de los documentos aquí citados (incluidas todas las patentes, solicitudes de patentes, publicaciones científicas, especificaciones del fabricante, instrucciones, etc.), ya sean supra o infra, se incorporan por referencia en su totalidad. En la medida en que el material incorporado por referencia contradiga o sea incoherente con esta especificación, la especificación sustituirá a dicho material. Nada de lo aquí expuesto debe interpretarse como una admisión de que la invención no tiene derecho a ser anterior a dicha divulgación en virtud de una invención anterior.

A lo largo de esta especificación y las reivindicaciones que siguen, a menos que el contexto requiera lo contrario, la palabra “comprende”, y variaciones tales como “comprende” y “que comprende”, se entenderá que implica la inclusión de un número entero o paso o grupo de números enteros o pasos, pero no la exclusión de cualquier otro número entero o paso o grupo de números enteros o pasos. En el presente documento, el término “que comprende” puede sustituirse por el término “que contiene” o, a veces, por el término “que tiene”.

En el presente documento, el término “compuesto de” excluye cualquier elemento, etapa o ingrediente no especificado en el elemento de la reivindicación. Cuando se utiliza en el presente documento, “compuesto esencialmente de” no excluye materiales o pasos que no afecten materialmente a las características básicas y novedosas de la reivindicación. En cada caso, cualquiera de los términos “que comprende”, “que consiste esencialmente en” y “que consiste en” puede sustituirse por cualquiera de los otros dos términos.

Tal como se utiliza en el presente documento, se entiende que el término conjuntivo “y/o” entre múltiples elementos recitados abarca tanto opciones individuales como combinadas. Por ejemplo, cuando dos elementos están unidos por "y/o", una primera opción se refiere a la aplicabilidad del primer elemento sin el segundo. Una segunda

opción se refiere a la aplicabilidad del segundo elemento sin el primero. Una tercera opción se refiere a la aplicabilidad de los elementos primero y segundo juntos. Se entiende que cualquiera de estas opciones está comprendido en el significado y, por lo tanto, satisface el requisito del término "y/o" tal como se utiliza en el presente documento. La aplicabilidad concurrente de más de una de las opciones también se entiende incluida en el significado y, por lo tanto, satisface el requisito del término "y/o" utilizado en el presente documento.

La palabra “aproximadamente”, tal como se utiliza en el presente documento, se refiere a un valor que se encuentra dentro de un margen de error aceptable para el valor particular, según lo determinado por un experto en la materia, que dependerá en parte de cómo se mide o determina el valor, es decir, las limitaciones del sistema de medición. Por ejemplo, “aproximadamente” puede significar dentro de 1 o más de 1 desviación estándar, según la práctica en la materia. El término “aproximadamente” también se utiliza para indicar que la cantidad o el valor en cuestión puede ser el valor designado o algún otro valor que sea aproximadamente el mismo. La frase pretende transmitir que valores similares promueven resultados o efectos equivalentes según la invención. En este contexto, “aproximadamente” puede referirse a un intervalo por encima y/o por debajo de hasta el 10%. La palabra “aproximadamente” se refiere en algunas realizaciones a un intervalo por encima y por debajo de un valor determinado que es de hasta el 5%, tal como hasta el 2%, hasta el 1%, o hasta el 0,5% por encima o por debajo de dicho valor. En una realización, “aproximadamente” se refiere a un intervalo de hasta el 0,1 % por encima y por debajo de un valor determinado.

En lo sucesivo, la presente invención se describirá más específicamente basándose en un ejemplo, pero la presente invención no se limita a los siguientes ejemplos.

**EJEMPLOS**

La síntesis y caracterización de los sorbentes utilizados se realizó siguiendo los procedimientos experimentales descritos a continuación basados en la literatura. Los materiales disponibles comercialmente se obtuvieron de diferentes fuentes y se utilizaron sin manipulación previa.

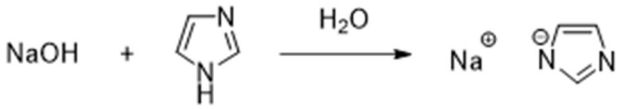
**EJEMPLO 1: SÍNTESIS DE SORBENTES**

Se han sintetizado varios sorbentes utilizando un procedimiento de mezcla directa. Es decir, su preparación es tan simple como la mezcla inmediata de precursores y no

requiere síntesis orgánicas en varios pasos o purificación elaborada, ofreciendo una preparación rápida, asequible, reproducible y escalable.

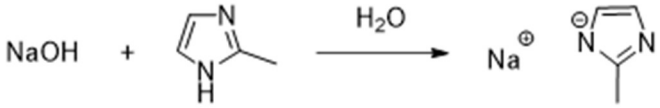
La preparación de NaIm, NaMeIm, TMA.Im y Na.TBD se describe a continuación:

- Imidazolato de sodio [NaIm]: el primer paso es disolver hidróxido de sodio (NaOH; 2,4000 g, 60 mmol) en agua (~30 mL), luego se añade imidazol (4,0848 g, 60 mmol) a la solución en proporción equimolar y se agita a temperatura ambiente hasta que se disuelva completamente. Luego, se lleva al evaporador rotativo y a la línea de vacío, obteniendo **así NaIm (5,4036 g, 60 mmol).**



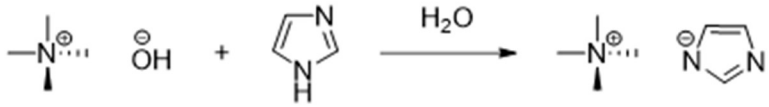

Reacción para la síntesis de NaIm.

- Sodio 2-metilimidazolato [NaMeIm]: de nuevo, el punto de partida es la preparación de una solución acuosa de NaOH (2,4 g, 60 mmol) a la que en este caso se añade 2-metil imidazol, también en cantidades equimolares (4,9260 g, 60 mmol). Se sigue el mismo procedimiento que con NaIm, sin embargo, en el momento de la agitación, se añade etanol para ayudar a disolver. Esto da como resultado NaMeIm (6.246 g, 60 mmol), como se muestra:



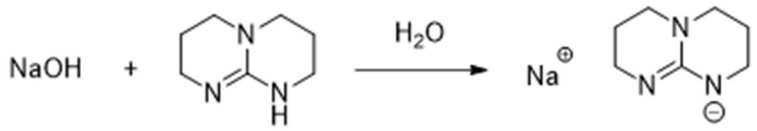

Reacción para la síntesis de NaMeIm.

- Imidazolato de tetrametilamonio [TMA.Im]: en este caso, comienza a partir de una solución acuosa de 1 mol L-1 de hidróxido de tetrametilamonio comercial (TMA.OH; 60 mL, 60 mmol), a la que se añade una cantidad ecuimolar de imidazol (4,0848 g, 60 mmol). TMA.Im (8,4736 g, 60 mmol) se obtiene:



Reacción para la síntesis de TMA.Im.

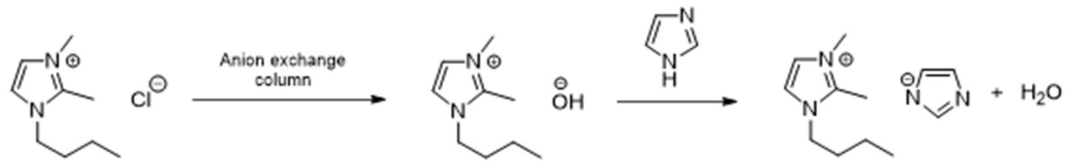
• Sodio 1,5,7-Triazabicyclo[4.4.0]dec-5-eno [Na.TBD]: a partir de una solución acuosa de NaOH (2,4 g, 60 mmol), se añade 1,5,7-Triazabicyclo[4.4.0]dec-5-eno (TBD; pureza 98%, 8,5224 g, 60 mmol), lo que resulta en la formación de Na.TBD (9,672 g, 60 mmol), como se muestra:




Reacción para la síntesis de Na.TBD.

Algunos sorbentes se sintetizan utilizando columnas de intercambio de aniones como un paso clave en su preparación. Este método es común cuando un precursor de sal halogenada (por ejemplo, cloruro o bromuro) se convierte en un IL con un anión básico (como hidróxido, acetato o imidazolato), lo que permite la funcionalización asegurando una captura eficiente de $CO_2$. Este método se ha utilizado para sintetizar BMMI.Im (Lopes *et al*. (2022) “From biopolymer dissolution to $CO_2$ capture under atmospheric pressure - A molecular view on biopolymer@Ionic liquid materials” Journal of Cleaner Production Volume 367, 132977).

• 1-butil-2,3-dimetil-imidazol-3-io imidazolato [BMMI.Im]: El punto de partida es el reactivo comercial cloruro de 1-butil-2,3-dimetil-imidazol-3-io (BMMI.Cl; 5.661 g, 30 mmol), del cual se debe cambiar el anión cloruro por hidróxido. Para este propósito, se utiliza una columna de intercambio de aniones (Amberlyst A26 (forma OH)). La columna se condiciona con una solución acuosa de NaOH 1 mol L-1, que transfiere su anión para eluir el hidróxido de 1-butil-2,3-dimetil-imidazol-3-io (BMMI.OH). A este BMMI.OH eluido, se añade una cantidad ecuimolar de imidazol (2,0424 g, 30 mmol), se agita hasta la disolución, se pasa al evaporador rotativo y a la línea de vacío, obteniéndose BMMI.Im (6,6084 g, 30 mmol), como se muestra:




Reacción para la síntesis de BMMI.Im.

Para los experimentos de captura también se utilizaron hidróxido de tetrametilamonio (TMA.OH), y metildietanolamina (MDEA) como adsorbentes; sin embargo, no fue necesario sintetizarlos ya que se usaron reactivos comercialmente disponibles.

**EJEMPLO 2: CARACTERIZACIÓN**

La caracterización de todos los sorbentes, sintetizados y disponibles comercialmente, fue realizada por Resonancia Magnética Nuclear (RMN), específicamente 1H-NMR y $^{13}$C-NMR, registrada en el espectrómetro Bruker 300 y 400 MHz Avance III HD utilizando disolventes deuterados ($D_2O$).

**CAPTURA DE $CO_2$**

Para cada uno de los sorbentes, se llevaron a cabo experimentos de captura de $CO_2$ utilizando tres tipos diferentes de gases desde una concentración de $CO_2$ menor hasta una más diluida: $CO_2$ comprimido puro (>99,999%), mezcla de gas de combustión comprimido (0,40% monóxido de carbono, 0,40% metano, 0,50% argón y 15,90% dióxido de carbono) y, finalmente, aire atmosférico comprimido. La metodología general de los experimentos de captura es común para los tres gases a utilizar, excepto por las modificaciones de algunos parámetros, como el volumen y el tiempo, que son específicos de cada gas. Primero, se prepara en agua una solución de 1 mol $L^{-1}$ del sorbente que se va a utilizar y se mide su pH inicial. Luego, en un frasco cerrado, la solución sorbente se pone en contacto con el gas seleccionado haciendo burbujear a una velocidad conocida (mL/min). Una vez transcurrido el tiempo de captura requerido, se interrumpe la burbujeante y se vuelve a medir el pH. Finalmente, una alícuota de la mezcla (450 µL de mezcla de reacción + 50 µL de $D_2O$ (95:5)) es tomado para el posterior análisis $^{1}$H-NMR y $^{13}$C-NMR (Silva, A., Barrulas, R. V, Corvo, M. C. & Zanatta, M. Tuning basic poly(ionic liquid) solutions towards atmospheric pressure CO2 capture. J Environ Chem Eng 11, 110882 (2023), Zanatta (2023) ACS Sustain Chem Eng 11, 9613–9619). Para el análisis cuantitativo de 13C-NMR, se utilizó una secuencia estándar de un solo pulso con desacoplamiento de protones (secuencia de pulso zgig) con retardo de repetición de 60 s.

**$CO_2$ puro**

En el caso de la captura de $CO_2$ puro, se utilizaron 10 mL de la solución acuosa de 1 mol $L^{-1}$ del sorbente seleccionado. Los experimentos se realizan individualmente para cada sorbente (Figura 1) con un caudal de 800 mL/min y un tiempo de captura requerido

de 15 minutos (Silva (2023) J Environ Chem Eng 11, 110882, Zanatta (2023) ACS Sustain Chem Eng 11, 9613–9619).

**Mezcla de gases de combustión y aire atmosférico**

Se utiliza una configuración experimental diferente para llevar a cabo los experimentos de captura con una mezcla de gas de combustión y aire atmosférico, ya que en este caso se utiliza un adaptador, dividiendo el flujo en cuatro partes para realizar capturas simultáneas con varios sorbentes (Figura 2). En esta configuración se utilizaron 5 mL de solución sorbente acuosa de 1 mol $L^{-1}$ y un caudal de 200 mL/min.

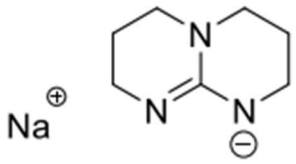
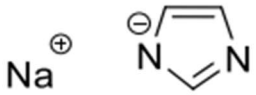
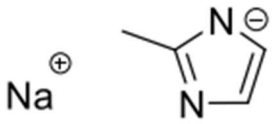
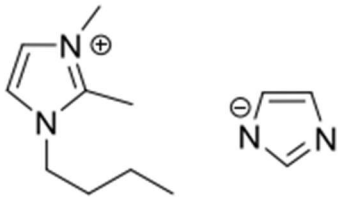
**DAC**

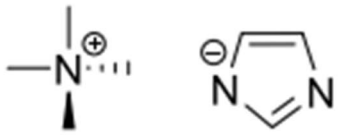
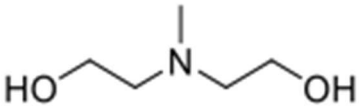
Para DAC, los sorbentes fueron expuestos al aire atmosférico durante 24 y 48 horas, siguiendo las condiciones comúnmente reportadas en la literatura (Bruch, M. et al. Upcycling atmospheric CO2 to polyhydroxyalkanoates via sequential chemo-biocatalytic processes. Green Chem. 26, 11885–11898 (2024)). Para el gas de combustión, el tiempo de burbujeo oscilaba entre 15 minutos y 2 h, donde 2 h se seleccionaron como condición típica. Esta vez se aplicó a todos los sorbentes, y se realizaron más experimentos para optimizar la duración de la exposición.

**EJEMPLO 3: CARACTERIZACIÓN DE LOS SORBENTES**

La estructura molecular y las características de todos los sorbentes utilizados en este trabajo se compilan en la Tabla 1.

Tabla 1: Caracterización de los sorbentes.

| SORBENTE | CHARACTERIZACIÓN |
|---|---|
|  | [Na.TBD]<br>Sodio 1,5,7-triazabiciclo[4.4.0]dec-5-eno<br>$C_7H_{12}N_3Na$<br>peso molecular = 161.2 g·mol$^{-1}$<br>Aceite incoloro<br>Higroscópico<br>Rendimiento superior al 99,9 %. |
|  | [NaIm]<br>Imidazolato de sodio<br>$C_3H_3N_2Na$<br>peso molecular = 90.06 g·mol$^{-1}$<br>aceite amarillento<br>Higroscópico<br>Rendimiento superior al 99,9 %. |
|  | [NaMeIm]<br>2-metilimidazolato de sodio<br>$C_4H_5N_2Na$<br>peso molecular = 104.1 g·mol$^{-1}$<br>sólido amarillento<br>Higroscópico<br>Rendimiento superior al 99,9 %. |
|  | [BMMI.Im]<br>1-butil-2,3-dimetilimidazol imidazolato<br>$C_{12}H_{20}N_4$<br>peso molecular = 220.28 g·mol$^{-1}$<br>Líquido marrón amarillento<br>Higroscópico<br>Rendimiento superior al 99,9 %. |

| SORBENTE | CHARACTERIZACIÓN |
|---|---|
|  | [TMA.Im]<br>Imidazolato de tetrametilamonio<br>$C_7H_{15}N_3$<br>peso molecular = 141.15 g·mol$^{-1}$<br>Aceite incoloro<br>Altamente Higroscópico<br>Rendimiento superior al 99,9 %. |
|  | [TMA.OH]<br>Hidróxido de tetrametilamonio<br>Comercial<br>$C_4H_{13}NO$<br>peso molecular = 91.154 g·mol$^{-1}$<br>Solución incolora 25 wt. % in $H_2O$<br>d = 1.016 g/mL |
|  | MDEA<br>Metildietanolamina<br>Comercial<br>$CH_3N(C_2H_4OH)_2$<br>peso molecular = 119.16 g·mol$^{-1}$<br>Líquido incoloro<br>d = 1.038 g/mL |

**EJEMPLO 4: EXPERIMENTOS DE CAPTURA DE $CO_2$**

Como se mencionó en la sección experimental, se realizaron experimentos de captura con tres tipos de gas para todos los sorbentes: sintético y comercial. Se pretende determinar la eficiencia de cada sorbente y, además, se los compara con MDEA, un sorbente comercial que ya había sido ampliamente utilizado (Jiang, L. et al. Sorption direct air capture with CO2 utilization. Prog Energy Combust Sci 95, 101069 (2023), Aydos, G. L. P. et al. Zwitterionic “Solutions” for Reversible CO2 Capture. ChemSusChem 16, e202300971 (2023). Los resultados de estos experimentos se discuten a continuación.

**$CO_2$ PURO**

La espectroscopia RMN, especialmente $^{13}$C-NMR (figura 1), ha sido la técnica central de este trabajo, tanto para la caracterización de los adsorbentes como para detectar y cuantificar el $CO_2$ capturado. Después del experimento, se puede confirmar que el $CO_2$ ha sido capturado con éxito comparando los espectros de caracterización con los

espectros posteriores a la captura; en estos últimos aparecen nuevos picos que no solo indican la presencia de $CO_2$ sino también revelan la forma química en la que fue capturado. también permite la determinación de la capacidad de captura por RMN cuantitativa. El $CO_2$ es una molécula que contiene carbono, por lo que su átomo de carbono puede ser directamente observado y monitoreado por $^{13}$C-NMR. Se puede capturar en varias formas, y cada una tiene valores distintivos de cambio químico (ppm):

• $CO_2$ disuelto físicamente:

Aparece como una sola partícula alrededor de 124 ppm. Esto indica que el $CO_2$ molecular simplemente se disuelve en el medio (fisisorción).

• Anión bicarbonato ($HCO_3^-$):

Su señal característica aparece a ~158-163 ppm. La formación de este pico indica que el $CO_2$ ha reaccionado, generalmente mediado por agua en los sorbentes básicos (Simon, N. M. et al. Cation−Anion−CO2 Interactions in Imidazolium-Based Ionic Liquid Sorbents. ChemPhysChem 19, 2879–2884 (2018), Perinu, C., Arstad, B. & Jens, K.-J. 13C NMR Experiments and Methods used to Investigate Amine-CO2-H2O Systems. Energy Procedia 37, 7310–7317 (2013)).

• Anión carbonato ($CO_3^{2-}$):

Aparece en desplazamientos más altos, típicamente alrededor de 164-169 ppm. La formación de aniones carbonatados suele producirse en condiciones más básicas (pH más alto), a menudo cuando se utilizan bases fuertes o formas de hidróxido en el sorbente (Perinu (2013) Energy Procedia 37, 7310–7317, Kortunov, P. V, Siskin, M., Baugh, L. S. & Calabro, D. C. In Situ Nuclear Magnetic Resonance Mechanistic Studies of Carbon Dioxide Reactions with Liquid Amines in Non-aqueous Systems: Evidence for the Formation of Carbamic Acids and Zwitterionic Species. Energy & Fuels 29, 5940–5966 (2015)).

• Especies de carbamato (en sorbentes que contienen grupo amino):

Nuevos picos podrían aparecer en una vasta región de ~158-170+ ppm, dependiendo de la estructura exacta, lo que indica que se ha formado un enlace químico covalente como un carbamato (Zanatta, M. et al. Correspondence on “Preorganization and Cooperation for Highly Efficient and Reversible Capture of Low-Concentration CO2 by Ionic Liquids”. Angewandte Chemie International Edition 58, 382–385 (2019), Barzagli, F., Giorgi, C., Mani, F. & Peruzzini, M. Reversible carbon dioxide capture by aqueous and non-aqueous amine-based absorbents: A comparative analysis carried out by 13C NMR spectroscopy. Appl Energy 220, 208–219 (2018)).

La cuantificación es posible integrando el área bajo los picos de $CO_2$ en relación con la integración de los picos moleculares del sorbente, lo que permite determinar la cantidad de $CO_2$ capturado en la capacidad de sorción (mol $CO_2$/mol de sorbente). Uno de los materiales que ha demostrado ser prometedor, TMA.Im, se toma como ejemplo.

Como se puede ver en las figuras 2 y 3, utilizando TMA.Im el $CO_2$ ha sido capturado con una capacidad de 1,22 mol $CO_2$/mol sorbente, determinada por la integración del nuevo pico que aparece a un cambio químico de 160,3 ppm, lo que significa que ha sido capturado en forma de bicarbonato.

Los resultados obtenidos de los experimentos de captura para cada sorbente se compilan en la figura 3, donde se muestran la capacidad de adsorción de cada sorbente y el desplazamiento químico al que aparecen los nuevos picos en cada caso. Todos los adsorbentes tenían una capacidad de captura de $CO_2$ entre ~1 y 1,75 mol $CO_2$/mol sorbente, con señales de $^{13}$C-NMR entre ~160 y 163 ppm, indicando la formación de bicarbonato. , y vale la pena mencionar que todos los sorbentes excepto TMA.OH logran una capacidad de captura más alta que MDEA y no están limitados a la relación 1:1. Destacando el resultado para Na.TBD, permite capturar $CO_2$ en más de una forma, en este caso distinguiendo entre bicarbonato y carbamato, acumulando una capacidad de sorción de 1,76 mol $CO_2$/mol sorbente.

Finalmente, la figura 4 compila los resultados de las mediciones iniciales y finales del pH para los experimentos de captura pura de $CO_2$, donde se observa que los valores iniciales del pH son ~14 (con la excepción de MDEA que es ~11) mientras que el pH final disminuye a un valor de ~8. ya que el medio ha sido acidificado debido a la presencia del $CO_2$ capturado. El efecto del pH se discutirá de nuevo más adelante.

**MEZCLA DE GASES DE COMBUSTIÓN**

Una vez que se demuestra que los sorbentes funcionan con $CO_2$ puro, se prueban para DAC con mezcla de gases de combustión, que es una fuente más diluida de concentración de $CO_2$ (~15%) destinada a simular la composición del gas de una chimenea industrial.

La figura 5 muestra que TMA.Im ha capturado 1,06 mol de $CO_2$ por mol de sorbente en forma de bicarbonato, ya que el nuevo pico aparece a 160,4 ppm.

Una vez más, todos los resultados de los sorbentes se compilan en la figura 6, que muestra que se está siguiendo la tendencia de los resultados en la experiencia de $CO_2$ puro. Todos los sorbentes tenían una capacidad de captura de $CO_2$ entre ~0,75 y 1,50 mol $CO_2$/mol sorbente, con señales de $^{13}$C-NMR entre ~160 y 162 ppm, lo que indica nuevamente la formación de bicarbonato. Los valores de la capacidad de captura son más bajos que para el $CO_2$ puro, esto es de esperar ya que el gas de combustión es una fuente más diluida, y a pesar de esto los sorbentes han logrado una capacidad mayor que MDEA, incluyendo TMA.OH, que se mantiene en una relación de 1:1. Además de demostrar que los sorbentes son eficientes para una menor concentración de $CO_2$, también se demuestra que son selectivos, ya que aunque el gas de combustión contiene otros componentes en su mezcla, capturan $CO_2$ en una proporción alta.

**AIRE ATMOSFÉRICO**

Finalmente, se llevaron a cabo experimentos DAC con la fuente de $CO_2$ más diluida, el aire.

Las figuras 7 muestra los espectros de $^{13}$C-NMR para las alícuotas tomadas a las 48 horas. TMA.Im sigue funcionando satisfactoriamente, ya que logra una considerable capacidad de captura y continúa capturando en forma de bicarbonato.

La figura 8 muestra los resultados de los experimentos de captura de $CO_2$ para todos los sorbentes en el aire a las 24 y 48 horas.

En primer lugar, con una exposición de 24 horas al aire atmosférico los sorbentes todavía consiguen capturar $CO_2$, pero a menor capacidad y en una forma diferente, ya que, como se refleja en los cambios de los valores de desplazamiento químico, el $CO_2$ se captura como carbonato para Na.TBD, NaMeIm y NaIm, una mezcla de bicarbonato y carbonato para BMMI.Im y TMA.OH y bicarbonato para TMA.Im. De manera crucial, MDEA no ha logrado capturar el $CO_2$ en esta ocasión y TMA.Im se presenta como uno de los resultados más interesantes ya que logra una capacidad de 0,86 mol $CO_2$/mol sorbente tan pronto como en aire a las 24 horas.

A medida que el tiempo de captura aumenta hasta 48 horas, la capacidad de sorción aumenta y, nuevamente, los valores de desplazamiento químico cambian. A pesar de haber ampliado el tiempo de exposición, el MDEA sigue fallando en la captura de $CO_2$ en una fuente tan diluida como el aire. TMA.Im sigue siendo un resultado característico,

porque, aunque su capacidad de captura no ha cambiado mucho (0,90 mol $CO_2$/mol sorbente), esto significa que se estabiliza pronto (cinética rápida), hecho que se aplica a BMMI.Im y TMA.OH también. Na.TBD ha sido capaz de capturar en forma de carbonato y carbamato y logra una relación de 1:1 incluso en la experiencia de captura de aire.

Las figuras 9 y 10 compila los resultados de las mediciones iniciales y finales del pH para experimentos de captura de aire para todos los gases

**REFERENCIAS**

Aydos, G. L. P. et al. Zwitterionic “Solutions” for Reversible CO2 Capture. ChemSusChem 16, e202300971 (2023)

Bruch, M. et al. Upcycling atmospheric CO2 to polyhydroxyalkanoates via sequential chemo-biocatalytic processes. Green Chem. 26, 11885–11898 (2024)

Jiang, L. et al. Sorption direct air capture with CO2 utilization. Prog Energy Combust Sci 95, 101069 (2023)

Kortunov, P. V, Siskin, M., Baugh, L. S. & Calabro, D. C. In Situ Nuclear Magnetic Resonance Mechanistic Studies of Carbon Dioxide Reactions with Liquid Amines in Non-aqueous Systems: Evidence for the Formation of Carbamic Acids and Zwitterionic Species. Energy & Fuels 29, 5940–5966 (2015)

Lopes *et al*. (2022) “From biopolymer dissolution to $CO_2$ capture under atmospheric pressure - A molecular view on biopolymer@Ionic liquid materials” Journal of Cleaner Production Volume 367, 132977

Mani, F. & Peruzzini, M. Reversible carbon dioxide capture by aqueous and non-aqueous amine-based absorbents: A comparative analysis carried out by 13C NMR spectroscopy. Appl Energy 220, 208–219 (2018)

Perinu, C., Arstad, B. & Jens, K.-J. 13C NMR Experiments and Methods used to Investigate Amine-CO2-H2O Systems. Energy Procedia 37, 7310–7317 (2013)

Silva, A., Barrulas, R. V, Corvo, M. C. & Zanatta, M. Tuning basic poly(ionic liquid) solutions towards atmospheric pressure CO2 capture. J Environ Chem Eng 11, 110882 (2023)

Simon, N. M. et al. Cation−Anion−CO2 Interactions in Imidazolium-Based Ionic Liquid Sorbents. ChemPhysChem 19, 2879–2884 (2018)

Zanatta, M., García-Verdugo, E. & Sans, V. Direct Air Capture and Integrated Conversion of Carbon Dioxide into Cyclic Carbonates with Basic Organic Salts. ACS Sustain Chem Eng 11, 9613–9619 (2023)

Zanatta, M. et al. Correspondence on “Preorganization and Cooperation for Highly Efficient and Reversible Capture of Low-Concentration CO2 by Ionic Liquids”. Angewandte Chemie International Edition 58, 382–385 (2019), Barzagli, F., Giorgi, C.,

## REIVINDICACIONES

1. Composición para absorber dióxido de carbono del aire que comprende una sal orgánica que comprende:

a) un anión que es un heterociclo insaturado, en el que el heterociclo insaturado comprende uno o más átomos de nitrógeno;

b) un catión orgánico o inorgánico.

2. La composición de la reivindicación 1, en donde el dióxido de carbono está presente en el aire a una concentración de entre 350 y 1000 ppm.

3. La composición de cualquiera de las reivindicaciones anteriores, en donde la sal es soluble en agua y/o disolventes polares.

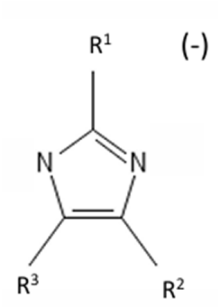
4. La composición de cualquiera de las reivindicaciones anteriores, en donde la composición no comprende ningún compuesto con un grupo hidróxido.

5. La composición de cualquiera de las reivindicaciones anteriores, en donde la composición no comprende ninguna amina aparte del anión que es un heterociclo insaturado, en el que el heterociclo insaturado comprende uno o más átomos de nitrógeno.

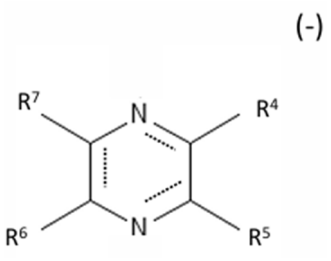
6. La composición de cualquiera de las reivindicaciones anteriores, en donde el heterociclo insaturado es un anión de pirrol, indol, quinolina, piridina, pirimidina, imidazol, pirazol, triazol, piridazina, pirazina quinolina, indolina, iso-indolo, indolizina, purina substituido o no substituido, preferiblemente triazol, pirazol, imidazol y pirrol.

7. La composición de cualquiera de las reivindicaciones anteriores, en donde el heterociclo está sustituido de uno o más grupos seleccionados entre H, ($C_1$-$C_6$)-alquilo lineal o ramificado, $C_1$-$C_6$)-alqueno lineal o ramificado, ($C_1$-$C_6$)-alquino lineal o ramificado, -$NH_2$, NH($C_1$-$C_6$)- alquilo lineal o ramificado, N($C_1$-$C_6$) $_2$-alquilo lineal o ramificado, -OH, O($C_1$-$C_6$) $_2$-alquilo lineal o ramificado , -$O^-$, -COO($C_1$-$C_6$)- alquilo lineal o ramificado, amida, -O($C_1$-$C_6$)- alquilo lineal o ramificado, arilo o bencílico;-$CF_3$, -$NO_2$, -CN, -$SO_3$, -CHO, -CO($C_1$-$C_6$)-alquilo lineal o ramificado, -COOH, -$NH_3$, -N-COO($C_1$-$C_6$)- alquilo lineal o ramificado y/o halogeno.

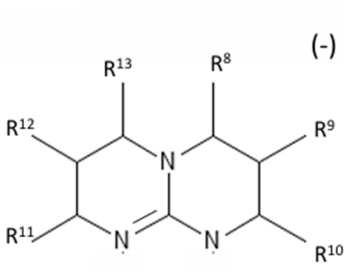
8. La composición de cualquiera de las reivindicaciones anteriores, en donde el heterociclo insaturado es un heterociclo de la formula:




(I)




(II) o




(III).

en donde $R^1$ a $R^{13}$ están selecionados independentemente de entre H, $(C_1\text{-}C_6)$-alquilo lineal o ramificado, $C_1\text{-}C_6$)-alqueno lineal o ramificado, $(C_1\text{-}C_6)$-alquino lineal o ramificado, $-NH_2$, $NH(C_1\text{-}C_6)$- alquilo lineal o ramificado, $N(C_1\text{-}C_6)_2$-alquilo lineal o ramificado, -OH, $O(C_1\text{-}C_6)_2$-alquilo lineal o ramificado , $-O^-$, $-COO(C_1\text{-}C_6)$- alquilo lineal o ramificado, amida, $-O(C_1\text{-}C_6)$- alquilo lineal o ramificado, arilo o bencílico;$-CF_3$, $-NO_2$, -CN, $-SO_3$, -CHO, $-CO(C_1\text{-}C_6)$-alquilo lineal o ramificado, -COOH, $-NH_3$, $-N\text{-}COO(C_1\text{-}C_6)$-alquilo lineal o ramificado y/o halogeno.

9. La composición de cualquiera de las reivindicaciones anteriores, en donde el catión es un catión monovalente, un catión divalente, un tetralquilamonio o una amina cuaternaria.

10. La composición de cualquiera de las reivindicaciones anteriores, en donde el catión es $Na^+$, $Ca^{2+}$, $Mg^{2+}$, $K^+$, $Ag^+$, $Zn^{2+}$, $Al^{3+}$, $Fe^{3+}$, $Li^+$ y/o $NH_4^+$ preferiblemente, $Na^+$, $Ca^{2+}$, $Mg^{2+}$, $K^+$ y/o el catión es piridinio piperidinio, morfolino, guandinio, colinio, amonio, , imidazolio, pirolidinio preferiblemente amonio colinio, imidazolio, pirolidinom.

11. La composición de cualquiera de las reivindicaciones anteriores, en donde el carbono se captura vía captura química.

12. La composición de cualquiera de las reivindicaciones anteriores, en donde la composición absorbe mínimo 1,00 $mol_{CO2}/mol_{composición\ absorbente}$, donde se mide la capacidad de absorción de $CO_2$ colocando la composición en solución en un vial sellado y el $CO_2$ puro comprimido con una pureza de al menos el 99 % es burbujeado a través de 10 ml de 1mol/L de la sal orgánica tal y como definido en cualquiera de las

reivindicaciones 1 a 15 en agua a un caudal de 800 ml/min durante 15 minutos en condiciones ambiente.

13. La composición de cualquiera de las reivindicaciones anteriores, en donde la composición absorbe mínimo 1 $mol_{CO2}/mol_{composición\ absorbente}$, donde se mide la capacidad de absorción de $CO_2$ colocando la composición absorbente en solución en un vial sellado y el gas comprendiendo 15,9 % $CO_2$, 0,4 % CO, 0,4 % $CH_4$ y 0,5 % Ar es burbujeado a través de 5 ml de 1mol/L de la sal orgánica tal y como definido en cualquiera de las reivindicaciones 1 a 15 en agua a un caudal de 200 ml/min durante 2 horas en condiciones ambiente.

14. Método para preparar la composición definida en cualquiera de las reivindicaciones 1 a 13, que comprende contactar un anión que es un heterociclo insaturado con un catión, y obtener así la composición.

15. Dispositivo de captura directa de aire (DAC) para la recuperación de dióxido de carbono de la atmósfera, el dispositivo comprende una composición tal como se define en cualquiera de las reivindicaciones 1 a 13.

16. Embalaje que comprende la composición definida en cualquiera de las reivindicaciones 1 a 13.

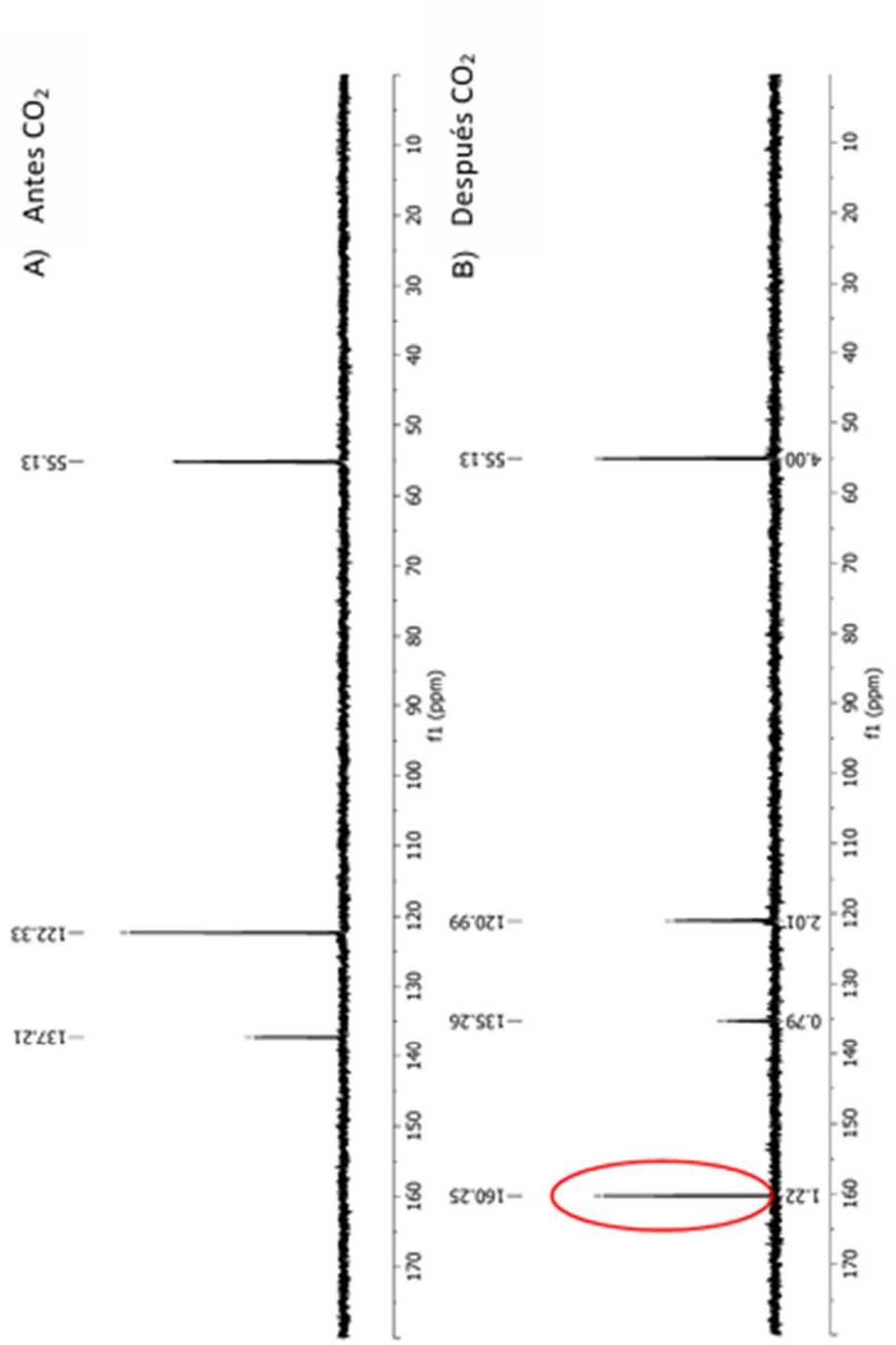

A) Antes $CO_2$
55.13
122.33
137.21
B) Después $CO_2$
55.13
120.99
135.26
160.25
4.00
2.01
0.79
1.22
f1 (ppm)

Figura 1

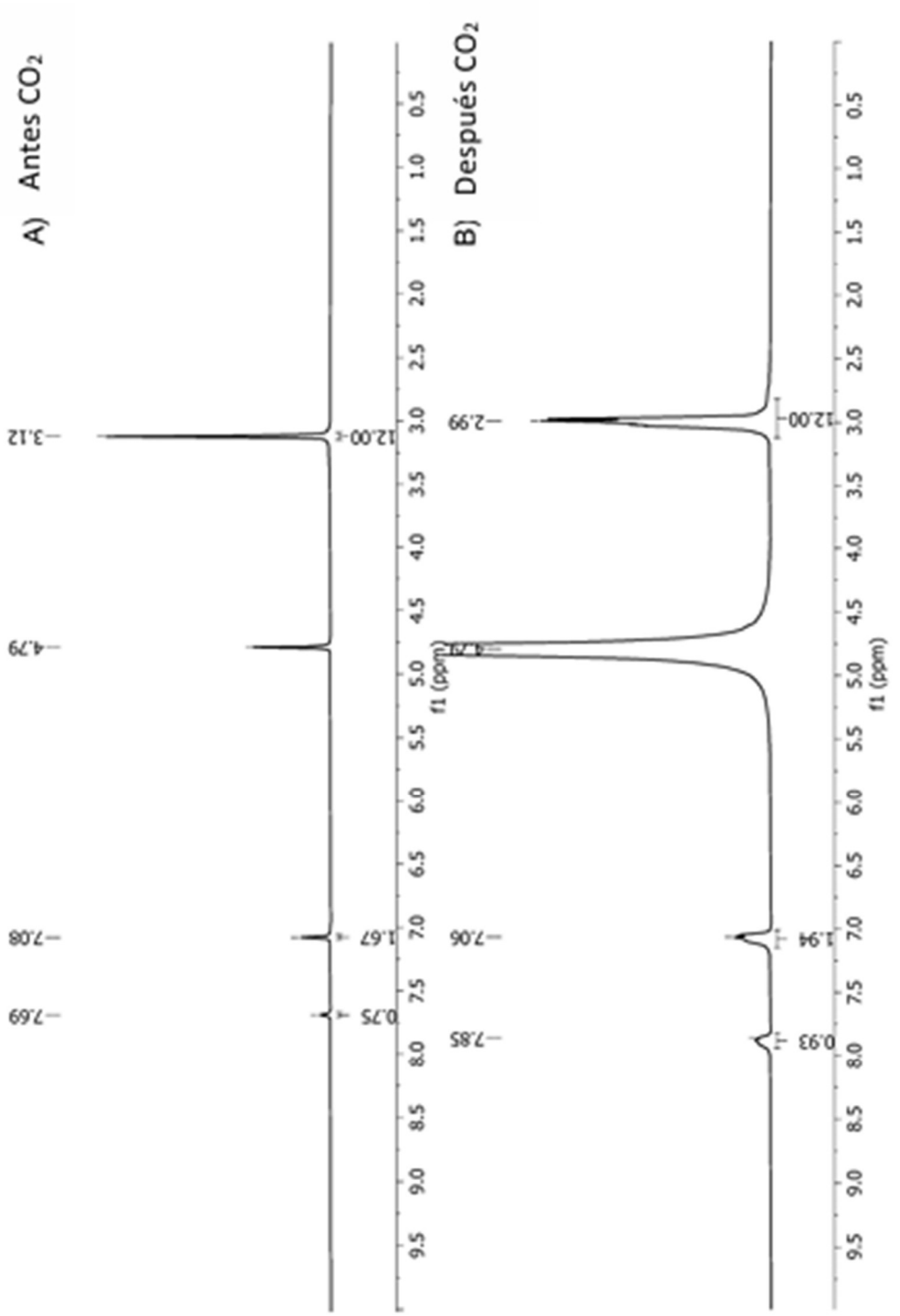

A) Antes $CO_2$
B) Después $CO_2$
3.12
4.79
7.08
7.69
12.00
1.67
0.75
2.99
4.78
7.06
7.85
1.94
0.93
f1 (ppm)

Figura 2

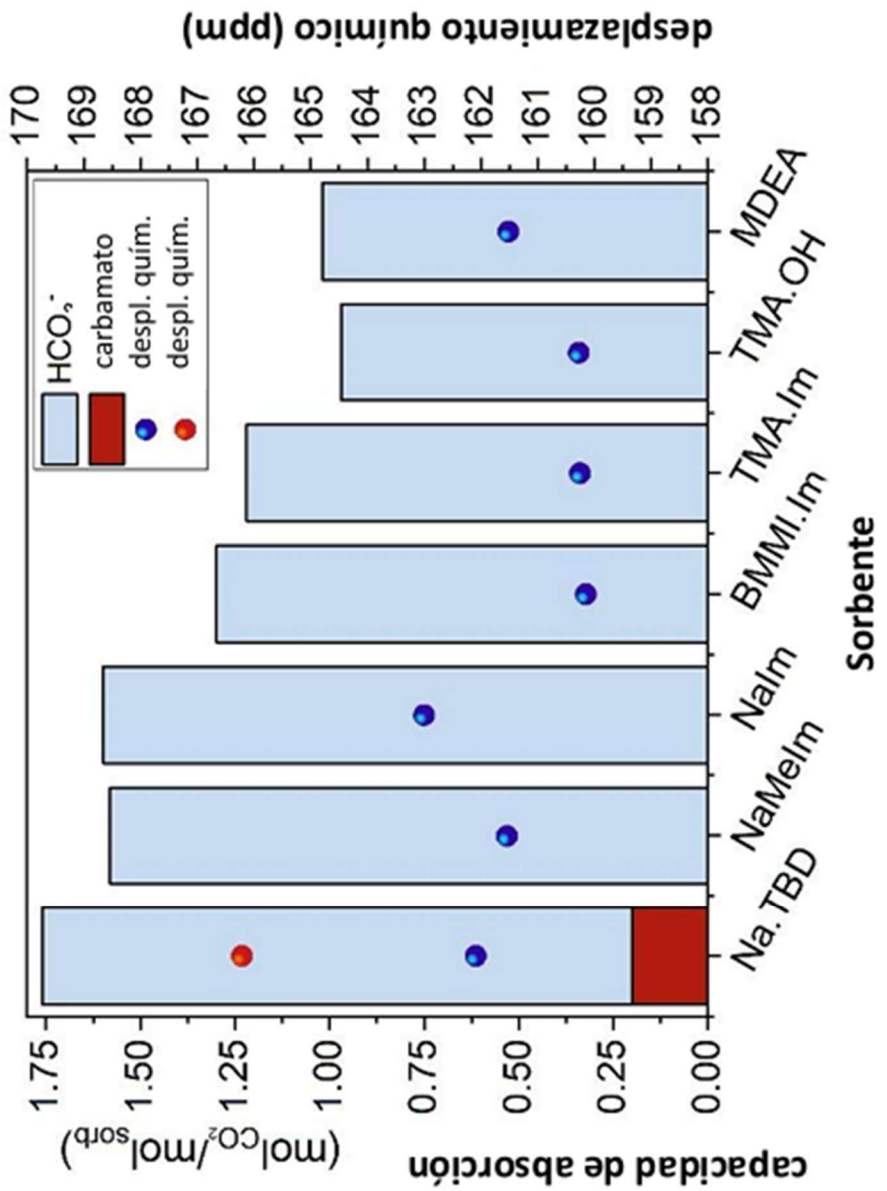

desplazamiento químico (ppm)
170
169
168
167
166
165
164
163
162
161
160
159
158
HCO3-
carbamato
despl. quím.
despl. quím.
MDEA
TMA.OH
TMA.Im
BMMI.Im
NaIm
NaMeIm
Na.TBD
Sorbente
capacidad de absorción
(molCO2/molsorb)
1.75
1.50
1.25
1.00
0.75
0.50
0.25
0.00

Figura 3

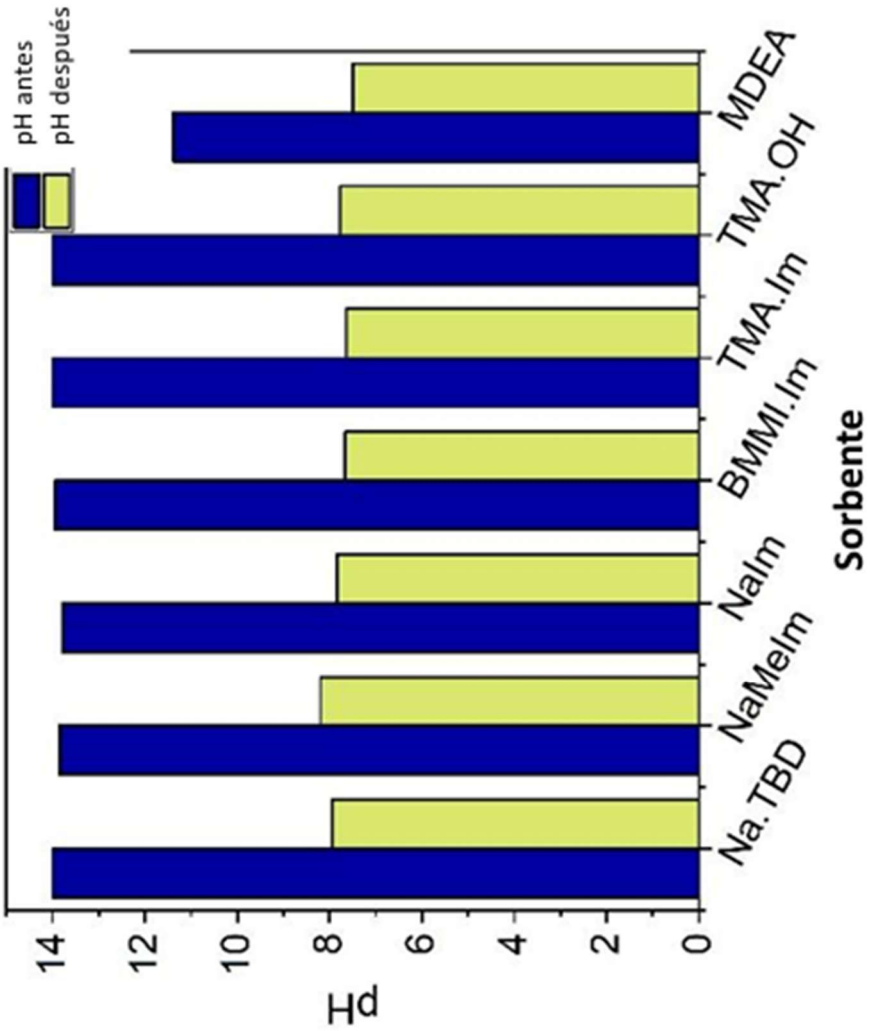

pH antes
pH después
MDEA
TMA.OH
TMA.Im
BMMI.Im
NaIm
NaMeIm
Na.TBD
Sorbente
pH
0
2
4
6
8
10
12
14

Figura 4

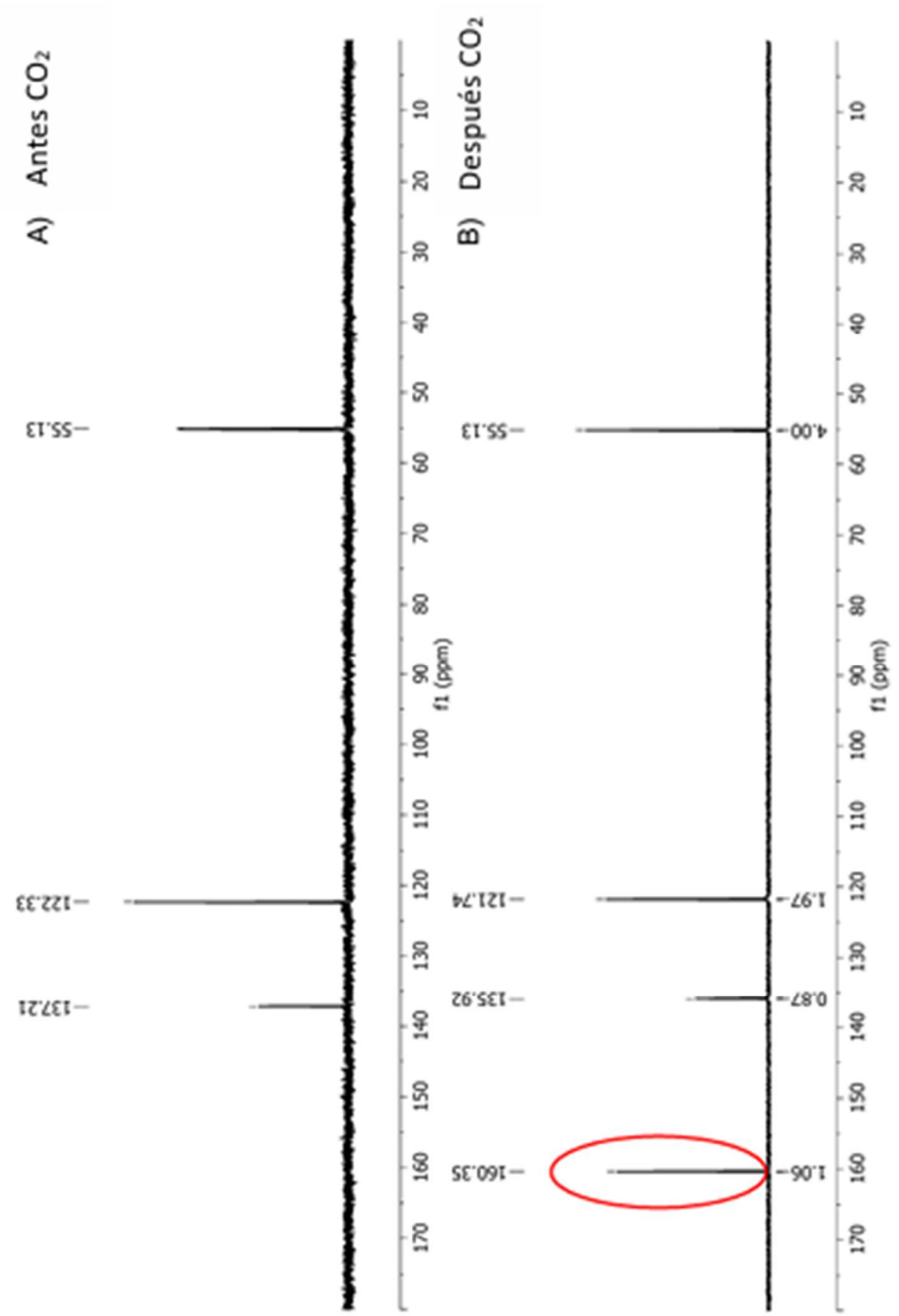

A) Antes $CO_2$
55.13
122.33
137.21
B) Después $CO_2$
55.13
121.74
135.92
160.35
4.00
1.97
0.87
1.06
f1 (ppm)

Figura 5

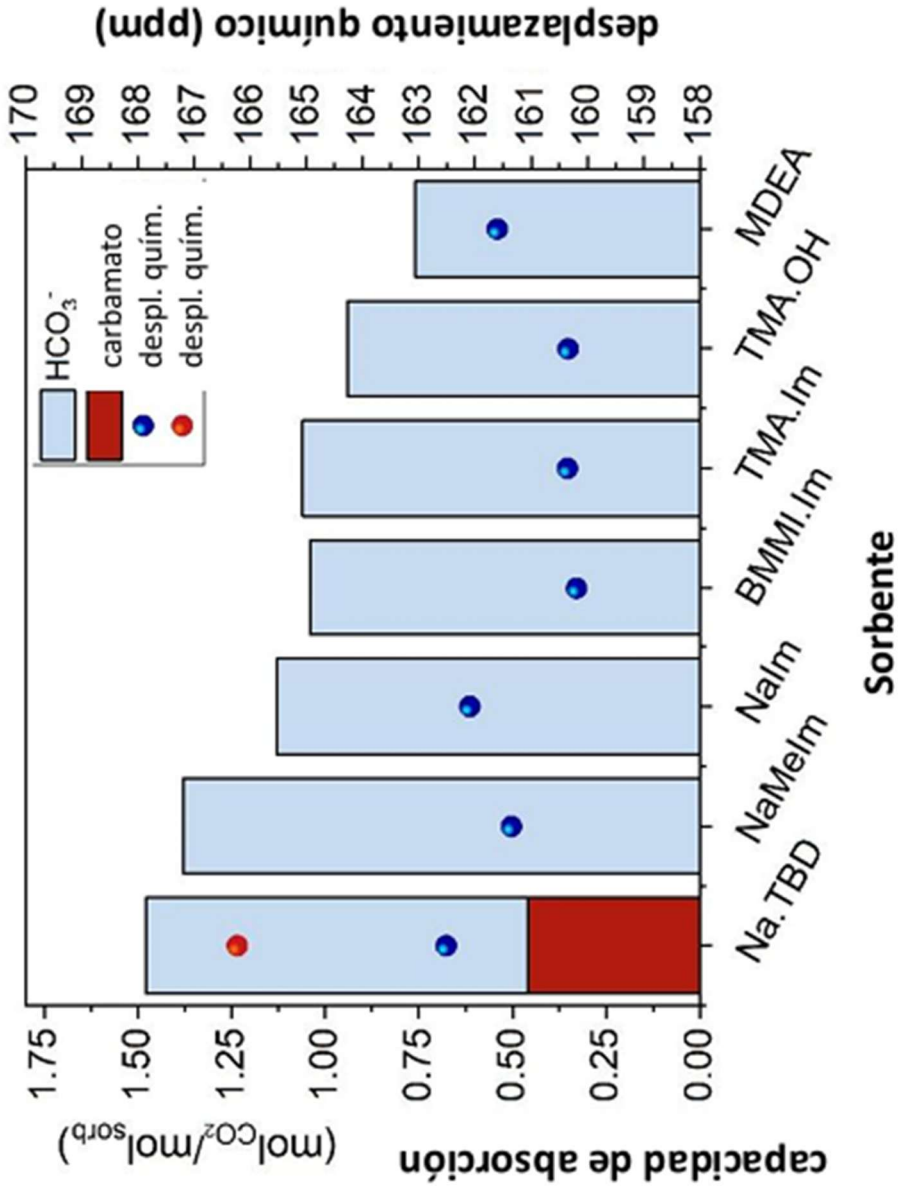

desplazamiento químico (ppm)
170
169
168
167
166
165
164
163
162
161
160
159
158
HCO3-
carbamato
despl. quím.
despl. quím.
MDEA
TMA.OH
TMA.Im
BMMI.Im
NaIm
NaMeIm
Na.TBD
Sorbente
capacidad de absorción
(molCO2/molsorb)
1.75
1.50
1.25
1.00
0.75
0.50
0.25
0.00

Figura 6

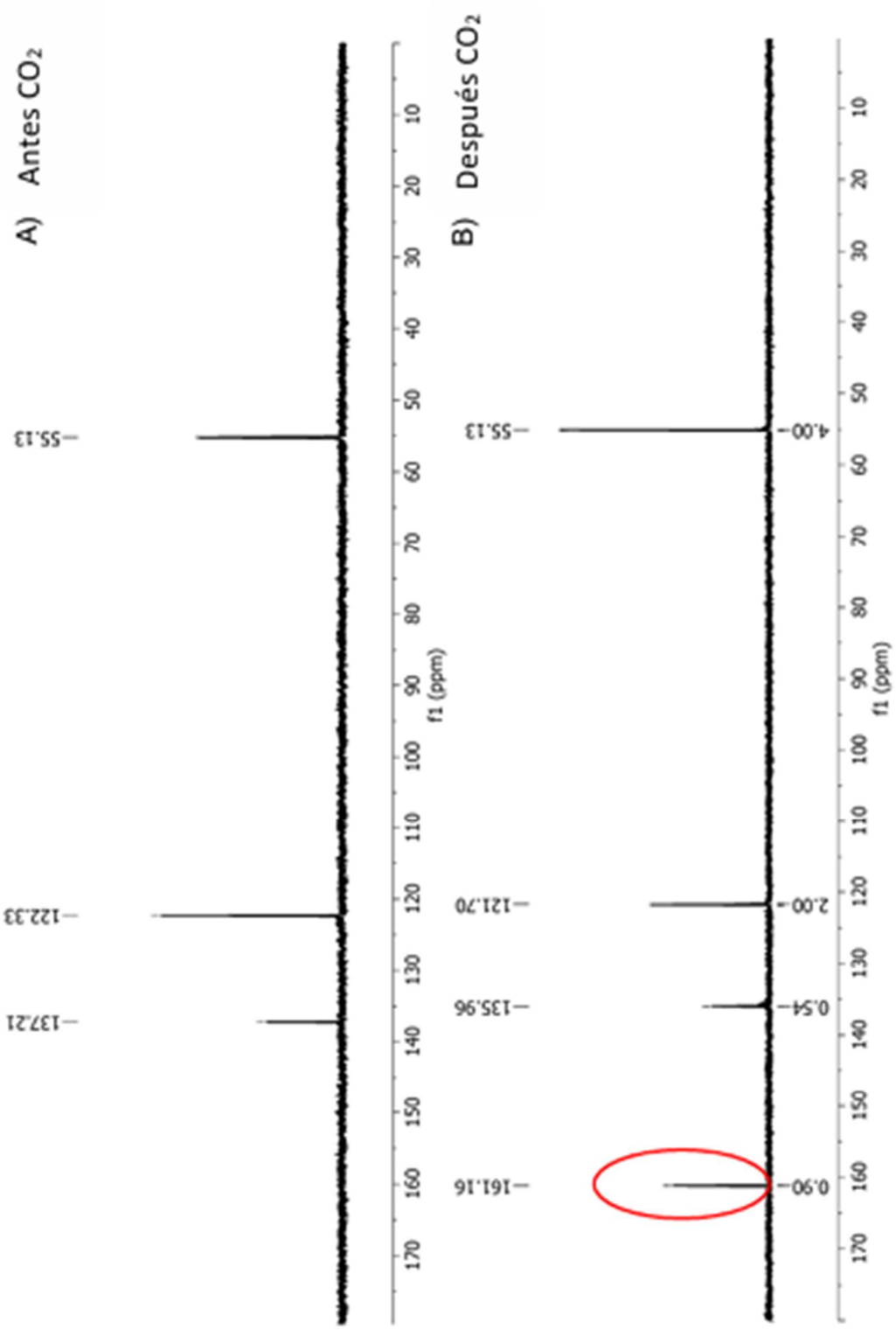

A) Antes $CO_2$
55.13
122.33
137.21
B) Después $CO_2$
55.13
121.70
135.96
161.16
4.00
2.00
0.54
0.90
f1 (ppm)

Figura 7

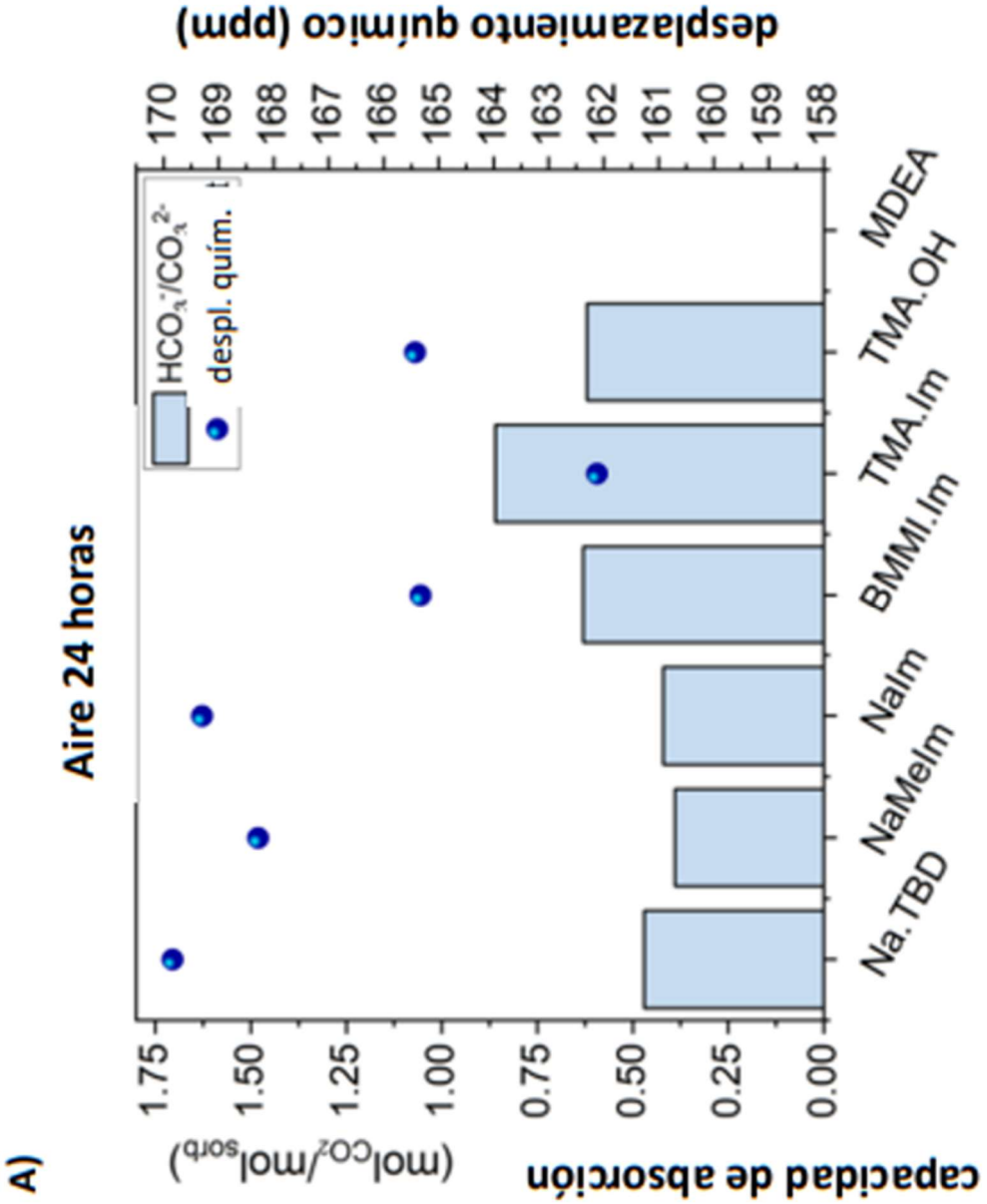

A)
Aire 24 horas
capacidad de absorción
(molCO2/molsorb)
desplazamiento químico (ppm)
HCO3-/CO32-
despl. quím.
MDEA
TMA.OH
TMA.Im
BMMI.Im
NaIm
NaMeIm
Na.TBD
Sorbente

Figura 8

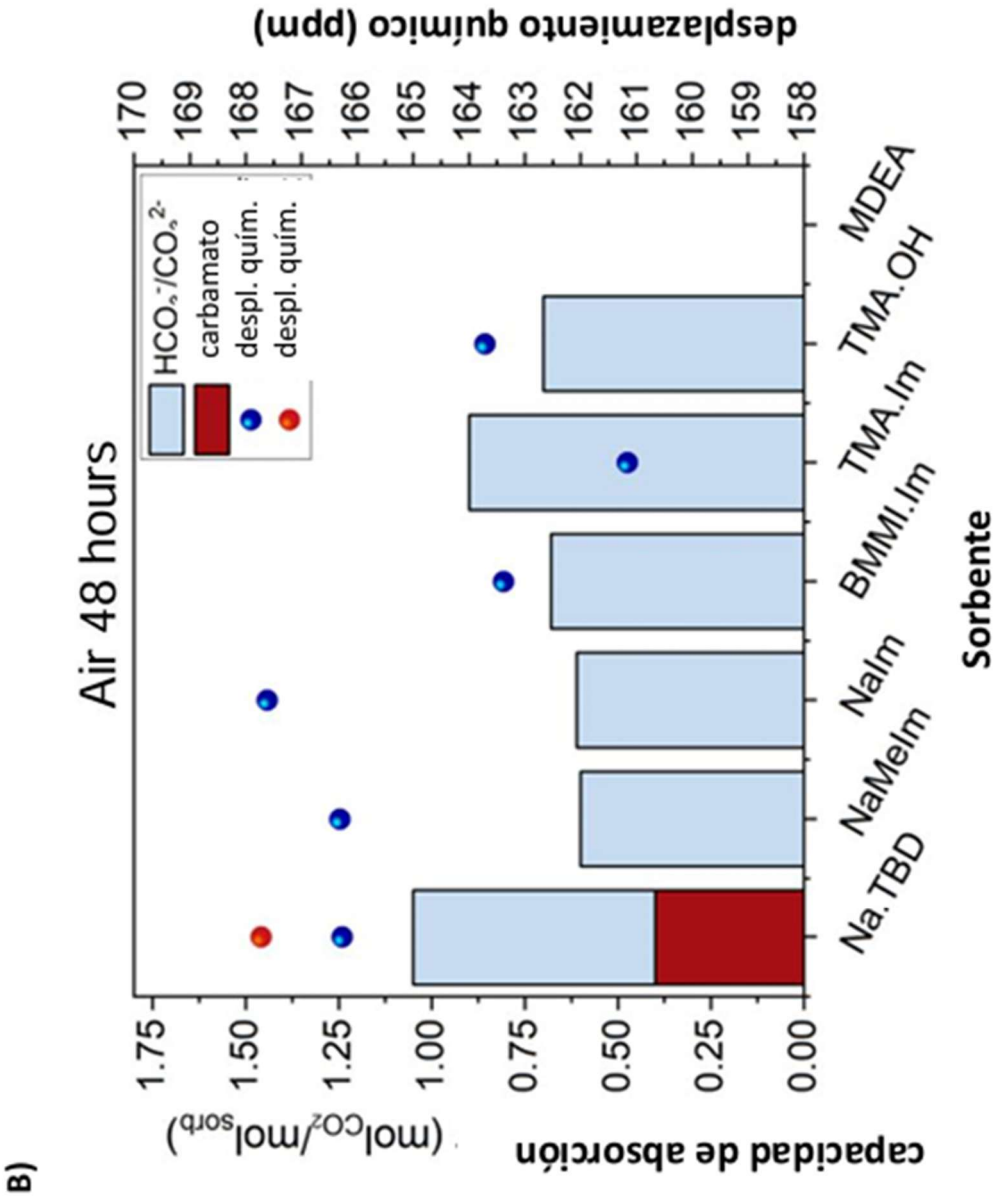

B)
Air 48 hours
capacidad de absorción
(molCO2/molsorb)
desplazamiento químico (ppm)
Sorbente
HCO3-/CO3 2-
carbamato
despl. quím.
despl. quím.
Na.TBD
NaMeIm
NaIm
BMMI.Im
TMA.Im
TMA.OH
MDEA
0.00
0.25
0.50
0.75
1.00
1.25
1.50
1.75
158
159
160
161
162
163
164
165
166
167
168
169
170

Figura 8

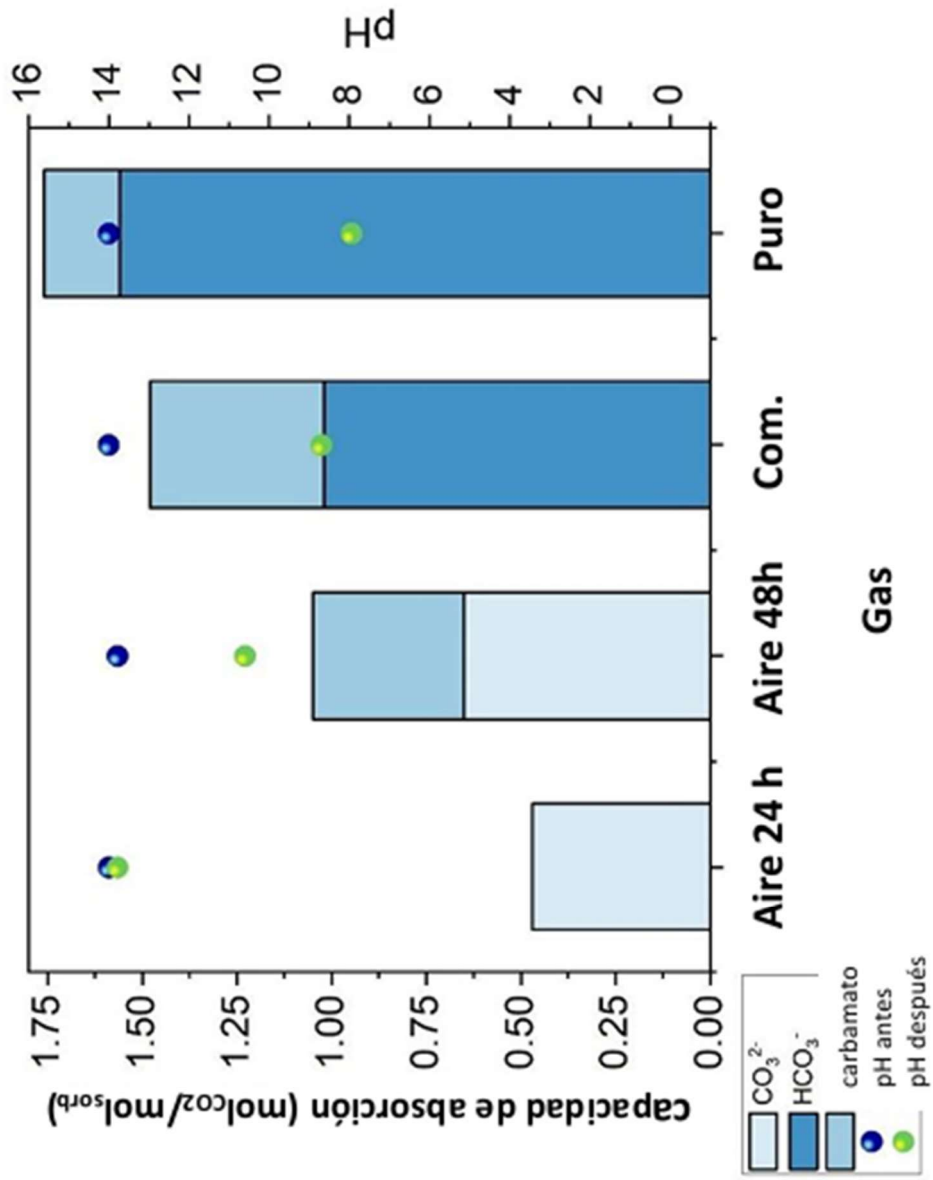

pH
16
14
12
10
8
6
4
2
0
capacidad de absorción (molCO2/molsorb)
1.75
1.50
1.25
1.00
0.75
0.50
0.25
0.00
Aire 24 h
Aire 48h
Com.
Puro
Gas
CO3 2-
HCO3 -
carbamato
pH antes
pH después

Figura 9

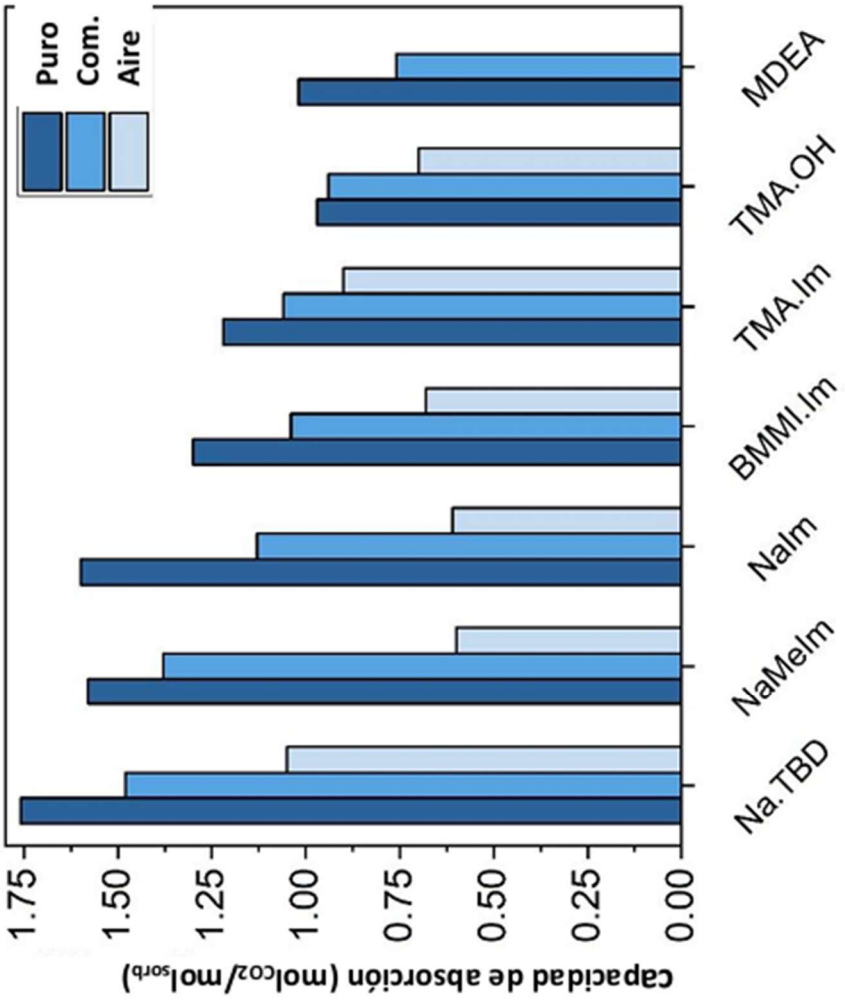

Puro
Com.
Aire
MDEA
TMA.OH
TMA.Im
BMMI.Im
NaIm
NaMeIm
Na.TBD
1.75
1.50
1.25
1.00
0.75
0.50
0.25
0.00
capacidad de absorción (molCO2/molsorb)

Figura 10

OFICINA ESPAÑOLA
DE PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA

(21) N.º solicitud: 202630560

(22) Fecha de presentación de la solicitud: 16.04.2026

(32) Fecha de prioridad:

# INFORME SOBRE EL ESTADO DE LA TECNICA

(51) Int. CI.: Ver Hoja Adicional

DOCUMENTOS RELEVANTES

| Categoría | (56) Documentos citados | Reivindicaciones afectadas |
|---|---|---|
| X | BURNS, D. *et al.* "$CO_2$ Capture mechanism of [DBUH][Im] under humid conditions". Journal of Ionic Liquids 2025, Volumen 5, artículo 100179. DOI: 10.1016/j.jil.2025.100179. ISSN: 2772-4220. [Disponible en línea el 01.11.2025]. [Recuperado el 05.10.2026]. Recuperado de: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2772422025000485>. Ver página 1, resumen; página 2, figura 1 y apartado 2.2. | 1-4, 6-9, 11-16 |
| X | JIANG, B. *et al.* "Highly efficient and reversible $CO_2$ capture by imidazolate-based ether-functionalized ionic liquids with a capture transforming process". Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers 2016, Volumen 69, páginas 85-92. DOI: 10.1016/j.jtice.2016.10.009. ISSN: 1876-1070. [Disponible en línea el 27.10.2016]. [Recuperado el 05.10.2026]. Recuperado de: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S187610701630387X>. Ver página 85, resumen; página 87, tabla 1; página 89, figura 5. | 1-4, 6-13, 15, 16 |
| X | MOITRA, D. *et al.* "High-Performance $CO_2$ Capture from Air by Harnessing the Power of CaO- and Superbase-Ionic-Liquid-Engineered Sorbents". ChemSusChem 2023, Volumen 16, Número 20, artículo e202300808. DOI: 10.1002/cssc.202300808. ISSN: 1864-5631; 1864-564X (en línea). [Publicado el 19.06.2023]. [Recuperado el 06.10.2026]. Recuperado de: <https://chemistry-europe.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/cssc.202300808>. Ver página 1, resumen; página 2, figura 1; Información suplementaria, página S2. | 1-16 |
| X | SHU, H. & XU, Y. "Tuning the strength of cation coordination interactions of dual functional ionic liquids for improving $CO_2$ capture performance". International Journal of Greenhouse Gas Control 2020, Volumen 94, Número 20, artículo 102934. DOI: 10.1016/j.ijggc.2019.102934. ISSN: 1864-5631; 1864-564X (en línea). [Publicado el 16.12.2019]. [Recuperado el 06.10.2026]. Recuperado de: <https://chemistry-europe.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/cssc.202300808>. Ver página 1, resumen; página 2, apartado 2.2; página 4, tabla 2. | 1-16 |

Categoría de los documentos citados

X: de particular relevancia
Y: de particular relevancia combinado con otro/s de la misma categoría
A: refleja el estado de la técnica
O: referido a divulgación no escrita
P: publicado entre la fecha de prioridad y la de presentación de la solicitud
E: documento anterior, pero publicado después de la fecha de presentación de la solicitud

**El presente informe ha sido realizado**

☒ para todas las reivindicaciones ☐ para las reivindicaciones nº:

| Fecha de realización del informe | Examinador | Página |
|---|---|---|
| 09.10.2026 | G. Esteban García | 1/3 |

OFICINA ESPAÑOLA
DE PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA

(21) N.º solicitud: 202630560

(22) Fecha de presentación de la solicitud: 16.04.2026

(32) Fecha de prioridad:

# INFORME SOBRE EL ESTADO DE LA TECNICA

(51) **Int. Cl. :** Ver Hoja Adicional

DOCUMENTOS RELEVANTES

| **Categoría** | (56) **Documentos citados** | **Reivindicaciones afectadas** |
|---|---|---|
| X | MOHAMED, A.A. *et al.* "A Silver(I)-Gold(II) Hexanuclear Guanidinate-Benzoate Cluster with Short Au-Au Bonds". Journal of Cluster Chemistry 2008, Volumen 18, Número 4, páginas 551-559. DOI: 10.1007/s10876-008-0198-1. ISSN: 1040-7278; 1572-8862 (en línea). [Publicado en línea el 10.09.2008]. [Recuperado el 07.10.2026]. Recuperado de: <https://link.springer.com/article/10.1007/s10876-008-0198-1>. Ver página 551, resumen; página 553, párrafo 5; página 554, esquema 1. | 1-5, 7-14 |
| X | ZANATTA, M. *et al.* "Confined water in imidazolium based ionic liquids: a supramolecular guest@host complex case". Physical Chemistry Chemical Physics 2016, Volumen 18, Número 27, páginas 18297-18304. DOI: 10.1039/c6cp03112a. ISSN: 1040-7278; 1572-8862 en línea). [Disponible en línea el 09.06.2016]. [Recuperado el 05.10.2026]. Recuperado de: <https://pubs.rcs.org/cp/article-abstract/18/27/18297/517733/Confined-water-in-iimidazolium-based-ionic-liquids>. Ver página 18297, resumen; página 18298, figura 1; página 18298, columna 1, párrafo 4; página 18300, columna 1, párrafo 2. | 1-4, 6-13 |
| A | EVANS, H.A. *et al.* "Water-enhanced $CO_2$ capture with molecular salte sodium guanidinate". Journal of Materials Chemistry A 2024, Volumen 12, Número 27, páginas 16748-16759. DOI: 10.1039/d4ta03037k. ISSN: 2050-7488; 2050-7496 (en línea). [Disponible en línea el 01.11.2025]. [Recuperado el 06.10.2026]. Recuperado de: <https://pubs.rcs.org/ta/article-abstract/12/27/16748/873902/Water-CO2-capture-with-molecular-salt>. Ver página 1648, resumen; página 1656, esquema 1; página 1657, conclusiones. | 1-16 |

Categoría de los documentos citados

X: de particular relevancia
Y: de particular relevancia combinado con otro/s de la misma categoría
A: refleja el estado de la técnica
O: referido a divulgación no escrita
P: publicado entre la fecha de prioridad y la de presentación de la solicitud
E: documento anterior, pero publicado después de la fecha de presentación de la solicitud

**El presente informe ha sido realizado**

☒ para todas las reivindicaciones ☐ para las reivindicaciones nº:

| **Fecha de realización del informe** | **Examinador** | **Página** |
|---|---|---|
| 09.10.2026 | G. Esteban García | 2/3 |

CLASIFICACIÓN OBJETO DE LA SOLICITUD

***C07D231/40*** (2006.01)
***C07D471/04*** (2006.01)
***B01D53/14*** (2006.01)
***B01J31/02*** (2006.01)

Documentación mínima buscada (sistema de clasificación seguido de los símbolos de clasificación)

C07D, B01D, B01J

Bases de datos electrónicas consultadas durante la búsqueda (nombre de la base de datos y, si es posible, términos de búsqueda utilizados)

INVENES, EPODOC, REGISTRY, CAPLUS, ANSERA-SEARCH (Bases de datos: AbS colección patentes, AbS colección literatura no patente), GOOGLE SCHOLAR