

# MODELADO DE DATOS DE PRESIÓN DE MEZCLAS DE ÓXIDO NITROSO CON LÍQUIDOS IÓNICOS

## PRESSURE DATA MODELING OF NITROUS OXIDE MIXTURES WITH IONIC LIQUIDS

---

**Patricio Cerda<sup>1</sup>, Elías Fierro<sup>1</sup>, Claudio A. Faúndez<sup>1</sup>**

(1) Universidad de Concepción, Depto. de Física, Casilla 160-C, Concepción 3349001, Chile.  
(e-mail: claudiofaundez@udec.cl)

*Recibido: 04/10/2023 - Evaluado: 22/10/2023 - Aceptado: 16/12/2023*

---

### RESUMEN

Se estudia el modelado de datos de presión de mezclas de óxido nitroso ( $N_2O$ ) con líquidos iónicos (LI), utilizando la ecuación de estado de Peng-Robinson (PR) junto con la regla de mezcla de Kwak y Mansoori (KM). Se analizaron 294 datos experimentales en 20 isotermas para los siguientes sistemas:  $N_2O + [Bmim][BF_4]$ ,  $N_2O + [(ETO)_2IM][Tf_2N]$  y  $N_2O + [Bmim][Tf_2N]$ . Los líquidos iónicos presentan propiedades favorables como baja volatilidad, alta capacidad de absorción y estabilidad térmica, lo que los hace adecuados para la captura de gases contaminantes. Los resultados obtenidos muestran que el modelo PR/KM logra una correlación precisa entre los datos experimentales y calculados, con desviaciones inferiores al 10%. El estudio muestra la efectividad del modelo para predecir el comportamiento de estos sistemas, contribuyendo a la optimización de procesos de captura de gases contaminantes.

### ABSTRACT

The modeling of pressure data for nitrous oxide ( $N_2O$ ) mixtures with ionic liquids (IL) is studied, using the Peng-Robinson (PR) equation of state along with the Kwak and Mansoori (KM) mixing rule. A total of 294 experimental data points were analyzed across 20 isotherms for the following systems:  $N_2O + [Bmim][BF_4]$ ,  $N_2O + [(ETO)_2IM][Tf_2N]$ , and  $N_2O + [Bmim][Tf_2N]$ . Ionic liquids exhibit favorable properties such as low volatility, high absorption capacity, and thermal stability, making them suitable for capturing pollutant gases. The results show that the PR/KM model achieves a precise correlation between experimental and calculated data, with deviations below 10%. The study demonstrates the effectiveness of the model in predicting the behavior of these systems, contributing to the optimization of gas capture processes.

Palabras clave: Líquidos iónicos, modelado termodinámico, ecuación de estado, regla de mezcla

Keywords: Ionic liquids, thermodynamic modeling, equation of state, mixing rule

## INTRODUCCIÓN

Las crecientes preocupaciones sobre el calentamiento global debido a las emisiones de gases de efecto invernadero provenientes de la combustión de combustibles fósiles han impulsado el desarrollo de tecnologías para reducir y capturar estos gases. Entre los principales gases de efecto invernadero en la atmósfera terrestre se encuentran el dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>), el metano (CH<sub>4</sub>), el dióxido de azufre (SO<sub>2</sub>) y el óxido nitroso (N<sub>2</sub>O), entre otros.

Se ha prestado una atención significativa a las emisiones de dióxido de carbono como uno de los principales agentes del calentamiento global (Radim *et al.*, 2012; Chen *et al.*, 2014). Las amenazas climáticas provocadas por el CO<sub>2</sub> en la atmósfera han impulsado un compromiso global para reducir las emisiones. Esto ha motivado la investigación en torno a las técnicas que permitan disminuir las concentraciones de gases de efecto invernadero y que puedan implementarse a gran escala. Una de las técnicas es el almacenamiento de CO<sub>2</sub> generado por combustibles fósiles en reservorios geológicos, así como la utilización de fuentes de energía renovable como la solar y la eólica (Hassanpouryouzband *et al.*, 2021). Sin embargo, los efectos a largo plazo del óxido nitroso en el medio ambiente incluso superan al CO<sub>2</sub>, con un potencial de calentamiento global aproximadamente 310 veces mayor que el CO<sub>2</sub> cuando se normaliza a 100 años (Ramanathan, 1998). Además, el N<sub>2</sub>O es la principal fuente de NO<sub>x</sub> en la estratosfera y, por lo tanto, un importante regulador natural del ozono estratosférico (Pérez-Ramírez *et al.*, 2003). El N<sub>2</sub>O se produce tanto por fuentes naturales como antropogénicas. La principal fuente de emisión de N<sub>2</sub>O es la actividad agrícola y representa aproximadamente el 60% de las emisiones totales (Pérez-Ramírez *et al.*, 2003). Las fuentes industriales de N<sub>2</sub>O incluyen la producción de ácido adípico, una materia prima para el nylon, la producción de ácido nítrico, las plantas de energía alimentadas con combustibles fósiles y las emisiones vehiculares, y explosivos. Durante estas síntesis, el N<sub>2</sub>O se forma como un subproducto no deseado y se libera de las ventilaciones de los reactores a la atmósfera. Aunque ya se han realizado algunos esfuerzos para reducir las emisiones de N<sub>2</sub>O en la producción de ácido adípico, estas tecnologías no pueden aplicarse a otras fuentes, como la producción de ácido nítrico, debido a la concentración relativamente baja de N<sub>2</sub>O en la corriente de gas (Pérez-Ramírez *et al.*, 2003).

Para abordar este problema, se han desarrollado diversas tecnologías de captura y almacenamiento de gases contaminantes. Una de las tecnologías más prometedoras en este ámbito son los líquidos iónicos. Los líquidos iónicos (LI) son compuestos químicos que contienen iones y que se encuentran en estado líquido a temperatura ambiente. Tienen una alta afinidad con los gases, tienen baja inflamabilidad y toxicidad, una alta estabilidad térmica y pueden absorber grandes cantidades de gas en su estructura, lo que permite reducir las emisiones de gases contaminantes a la atmósfera, es por ello que se les considera como disolventes verdes (Valderrama *et al.*, 2008; Radim *et al.*, 2012).

Existe un creciente interés en el estudio de los LI como disolventes de absorción en procesos de separación de gases y captura de compuestos contaminantes. De este modo, está siendo ampliamente estudiada la absorción de solutos gaseosos como CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, SO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O, etc. (Jaquemin *et al.*, 2006a; Jacquemin *et al.*, 2006b; Radim *et al.*, 2014; Yokoseki & Shiflett, 2012; Faúndez *et al.*, 2014). Una peculiar característica de los LI es su elevada capacidad para absorber grandes cantidades de N<sub>2</sub>O, por lo que varios estudios se centran en la aplicación de estos disolventes en la captura de los gases ácidos generados en los procesos de combustión (Revelli *et al.*, 2010; Chen *et al.*, 2014). En la Tabla 1 se muestran algunas publicaciones relacionadas con el estudio de la solubilidad de mezclas binarias de N<sub>2</sub>O en diferentes líquidos iónicos.

En particular, el estudio de la solubilidad de gases en LI es una información relevante para los procesos de separación de gases usando el líquido iónico como disolventes verdes (Ren & Scurto, 2009). El control de las emisiones de gases contaminantes mediante su captura y almacenamiento o mediante mecanismos que minimicen su emisión ha cobrado una gran importancia económica, tecnológica y medioambiental (Gimeno *et al.*, 2013).

Tabla 1: Publicaciones relacionadas con la solubilidad de mezcla binarias de N<sub>2</sub>O + LI.

Sistemas	Publicaciones
N <sub>2</sub> O + [BMIM][BF <sub>4</sub> ]	Revelli <i>et al.</i> 2010
N <sub>2</sub> O + [(ETO) <sub>2</sub> IM][Tf <sub>2</sub> N]	Revelli <i>et al.</i> 2010
N <sub>2</sub> O + [BMIM][SCN]	Revelli <i>et al.</i> 2010
N <sub>2</sub> O + [DMIM][MP]	Revelli <i>et al.</i> 2010
N <sub>2</sub> O + (OH) <sub>2</sub> IM[Tf <sub>2</sub> N]	Revelli <i>et al.</i> 2010
N <sub>2</sub> O + [BMIM][Tf <sub>2</sub> N]	Shifflet <i>et al.</i> 2012
N <sub>2</sub> O + [BMIM][Ac]	Shifflet <i>et al.</i> 2012

Para realizar estos estudios, es necesaria la elección de modelos termodinámicos. Diferentes mezclas de gases y LI se han estudiado en la literatura usando varios modelos termodinámicos, principalmente las llamadas ecuaciones de estado (Faúndez *et al.*, 2013). Estas ecuaciones ocupan un lugar importante dentro de las técnicas de modelado de propiedades termodinámicas, ya que, en los últimos años, gran parte de la investigación basada en el modelado termodinámico se ha dedicado al desarrollo y prueba de ecuaciones de estado para calcular y correlacionar las propiedades termofísicas de componentes puros y mezclas (Valderrama, 1990). Las ecuaciones de estado se han aplicado a datos como CO<sub>2</sub> y N<sub>2</sub>O, y a sistemas compuestos por CO<sub>2</sub> + LI y N<sub>2</sub>O + LI, entre otras sustancias.

El objetivo de este trabajo es aplicar un modelo termodinámico basado en la ecuación de estado de Peng-Robinson, utilizando la regla de mezcla propuesta por Kwak y Mansoori (1986), para modelar la presión de los sistemas considerados en la investigación. El estudio abarca 20 isotermas con un total de 294 datos experimentales de mezclas binarias compuestas por N<sub>2</sub>O y los siguientes LI: [(ETO)<sub>2</sub>IM][Tf<sub>2</sub>N], [Bmim][BF<sub>4</sub>] y [Bmim][TF<sub>2</sub>N].

## EL MÉTODO DE LA ECUACIÓN DE ESTADO

El método de la ecuación de estado (EdE) es frecuentemente usado para la correlación y predicción del equilibrio entre fases en sistemas complejos (Valderrama, 2003). Las reglas de mezcla y de combinación apropiadas son utilizadas para describir la dependencia de la concentración de los parámetros del modelo.

De las numerosas EdE disponibles actualmente, las denominadas ecuaciones de estado cúbicas, derivadas a partir de la propuesta de van der Waals, tal como la de EdE de Peng y Robinson (1976), son ampliamente utilizadas para tratar este tipo de sistemas. Esta ecuación nuestro grupo de investigación la viene utilizando desde hace años con diferentes aproximaciones para las reglas de mezcla, como, por ejemplo: la de Wong y Sandler (1992) y la modificación de Kwak y Mansoori (1986) [20]. En este trabajo utilizaremos el modelo de Peng y Robinson junto con la regla de mezcla de Kwak y Mansoori (PR/KM). El modelo PR/KM fue introducido por Kwak y Mansoori con el fin de desarrollar reglas de mezclas para EdE cúbicas, que sean consistentes con la teoría mecánica estadística de reglas de mezclas de van der Waals (Kwak & Mansoori, 1986).

### La EdE PR/KM

El modelo de PR/KM viene dado por la siguiente expresión:

$$P = \frac{RT}{(V - b)} - \frac{a + dRT - 2\sqrt{adRT}}{V(V + d) + b(V - b)} \quad (1)$$

con

$$a = a_c(1 + F^2); a_c = 0.4572 \left( \frac{R^2 T_c^2}{P_c} \right); b = 0.0778 \left( \frac{RT_c}{P_c} \right); d = a_c \left( \frac{F^2}{RT_c} \right) \quad (2)$$

$$F = 0.3746 + 1.5423\omega - 0.2699\omega^2$$

En estas ecuaciones,  $T_c$  es la temperatura crítica,  $P_c$  es la presión crítica,  $\omega$  es el factor acéntrico. Adicionalmente,  $e_i$  es la fracción molar del componente "i" en cualquiera de las fases:  $x_i$  cuando las ecuaciones son aplicadas a la fase líquida e  $y_i$  cuando las ecuaciones son aplicadas a la fase gas.

Para mezclas, el modelo modificado para la EdE de PR es:

$$P = \frac{RT}{(V - b_m)} - \frac{a_m + d_m RT - 2\sqrt{a_m d_m RT}}{V(V + b_m) + b_m(V - b_m)} \quad (3)$$

Las reglas de mezclas y combinación para los parámetros ( $a_m$ ,  $b_m$  y  $d_m$ ) son:

$$a_m = \sum_i \sum_j x_i x_j a_{ij} \quad a_{ij} = \sqrt{a_i a_j} (1 - k_{ij}) \quad a_i = a(T_{ci})(1 + F_i)^2$$

$$b_m = \sum_i \sum_j x_i x_j b_{ij} \quad b_{ij} = \left( \frac{b_i^{1/3} + b_j^{1/3}}{2} \right)^3 (1 - l_{ij}) \quad b_i = \frac{0.07780RT_{ci}}{P_{ci}} \quad (4)$$

$$d_m = \sum_i \sum_j x_i x_j d_{ij} \quad d_{ij} = \left( \frac{d_i^{1/3} + d_j^{1/3}}{2} \right)^3 (1 - m_{ij}) \quad d_i = \frac{a(T_{ci})F_i^2}{RT_{ci}}$$

Se determinan las desviaciones entre la presión experimental y la presión calculada. Si las desviaciones superan los límites establecidos se ajustan los parámetros y se vuelven a realizar los cálculos hasta que las desviaciones estén dentro de unos valores definidos aceptables. Para optimizar la búsqueda de los parámetros óptimos se aplica el método de Levenberg-Mardquart (Reilly, 1972). El método utiliza como función objetivo la desviación absoluta media entre la presión de burbuja calculada y la experimental. Los parámetros óptimos son aquellos valores de  $k_{ij}$ ,  $l_{ij}$ ,  $m_{ij}$  que permiten obtener la desviación media más baja en la presión de burbuja y que no dan desviaciones superiores al 10%.

Las desviaciones absolutas porcentuales en el cálculo de la presión para cada punto "i" del conjunto de datos experimentales son utilizadas para determinar la exactitud del modelo termodinámico.

$$|\% \Delta P| = \frac{100}{N} \sum \frac{|P^{cal} - P^{exp}|_i}{P_i^{exp}} \quad (5)$$

El criterio adoptado y utilizado en diversos trabajos requiere que el modelo sea capaz de correlacionar los datos dentro de -10% y 10 % para la desviación porcentual de la presión.

#### Datos utilizados

En este estudio se analizan datos experimentales de mezclas binarias compuestas por  $N_2O$  y los siguientes LI:  $[(ETO)_2IM][Tf_2N]$ ,  $[Bmim][BF_4]$  y  $[Bmim][Tf_2N]$ . Los intervalos de concentración y presión de los datos para

cada isoterma se presentan en la Tabla 2. Las propiedades críticas necesarias para utilizar la ecuación de estado PR/KM para el N<sub>2</sub>O se obtienen de la literatura (Reid *et al.*, 1977)]. Para los líquidos iónicos las propiedades críticas se determinaron por el método propuesto por Valderrama y Rojas (2009). La Tabla 3 muestra los valores de estas propiedades.

Tabla 2: Rangos de temperatura, solubilidad y presión para los sistemas gas+líquido iónico considerados en este estudio.

<i>Systems</i>	<i>T(K)</i>	<i>Dx (gas in the IL)</i>	<i>DP (bar)</i>	<i>References</i>
N <sub>2</sub> O+[BMIM][BF <sub>4</sub> ]	293	0.101 – 0.371	11.40 – 32.70	Revelli <i>et al.</i> 2010
	303	0.101 – 0.371	13.90 – 41.60	
	313	0.101 – 0.371	15.00 – 51.80	
	323	0.101 – 0.371	16.70 – 62.90	
	333	0.101 – 0.371	18.60 – 75.70	
	343	0.101 – 0.371	20.40 – 89.60	
	353	0.101 – 0.371	22.80 – 102.10	
	363	0.101 – 0.371	25.70 – 117.80	
373	0.101 – 0.371	28.10 – 133.30		
N <sub>2</sub> O + [(ETO) <sub>2</sub> IM][Tf <sub>2</sub> N]	303	0.119 – 0.694	0.61 – 6.31	
	313	0.119 – 0.781	0.72 – 9.81	
	323	0.119 – 0.781	0.83 – 14.61	
	333	0.119 – 0.781	0.95 – 19.13	
	343	0.119 – 0.781	1.06 – 24.04	
	353	0.119 – 0.694	1.18 – 20.87	
N <sub>2</sub> O + [BMIM][Tf <sub>2</sub> N]	363	0.119 – 0.694	1.31 – 20.30	
	283	0.005 – 0.490	0.257 – 19.999	Shifflet <i>et al.</i> 2012
	298	0.007 – 0.404	0.253 – 20.004	
	323	0.004 – 0.299	0.256 – 20.006	
348	0.002 – 0.225	0.253 – 20.002		

Tabla 3: Propiedades de todas las sustancias incluidas en este estudio. Los datos del N<sub>2</sub>O gases proceden de Reid *et al.* (1977) y los de los LI, de Valderrama y Rojas (2009).

<i>Components</i>	<i>M</i>	<i>T<sub>c</sub> /K</i>	<i>P<sub>c</sub> /bar</i>	<i>w</i>
N <sub>2</sub> O	44.01	309.57	72.45	0.1409
[Bmim][BF <sub>4</sub> ]	226	643.2	20.4	0.8877
[(ETO) <sub>2</sub> IM] [Tf <sub>2</sub> N]	437.3	1310.8	28.2	0.2817
[Bmim][Tf <sub>2</sub> N]	419.4	1269.9	27.65	0.3004

## RESULTADOS Y DISCUSIÓN

A continuación, se muestran los resultados obtenidos al modelar los datos experimentales con la EdE de PR/KM para los sistemas N<sub>2</sub>O+[(ETO)<sub>2</sub>IM][Tf<sub>2</sub>N], N<sub>2</sub>O+[Bmim][BF<sub>4</sub>] y N<sub>2</sub>O+[Bmim][Tf<sub>2</sub>N]. Se muestran las desviaciones porcentuales individuales entre los valores calculados y experimentales de la presión frente a los datos experimentales de solubilidad.

En la Figura 1 se muestran las desviaciones obtenidas con el modelo de PR/KM para el sistema N<sub>2</sub>O+[BMIM][BF<sub>4</sub>] a la temperatura de 293 K. Como se observa, hay un buen acuerdo entre los datos calculados de la presión y los datos experimentales, con una desviación que no supera el 2%.

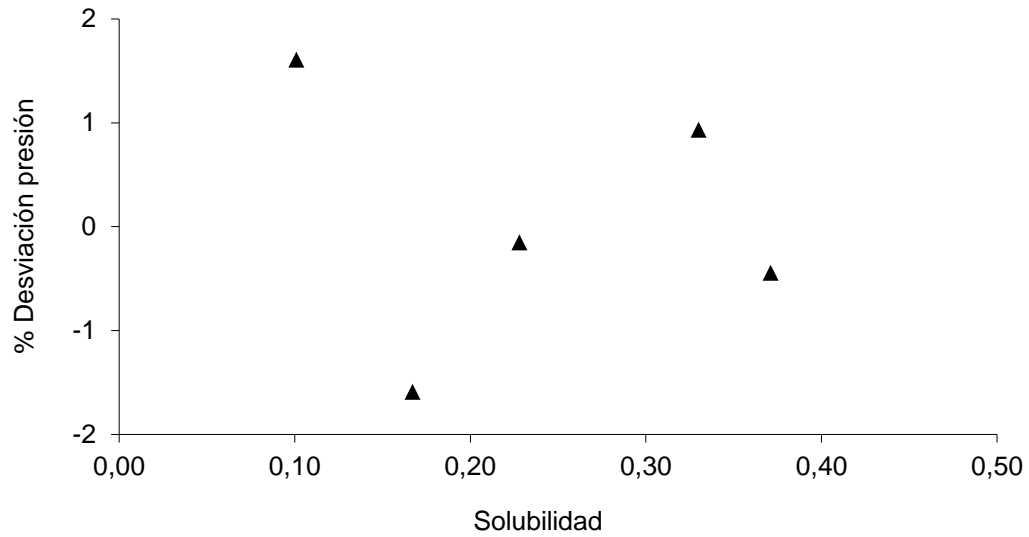


Fig. 1:

Desviaciones entre los valores calculados y experimentales de la presión frente a los datos experimentales de solubilidad para el sistema  $N_2O + [BMIM][BF_4]$  a temperatura  $T = 293$  K, utilizando el modelo PR/KM.

En la Figura 2 se muestran las desviaciones obtenidas con el modelo de PR/KM para el sistema  $N_2O + [Bmim][TF_2N]$  a la temperatura de 298 K. Se puede apreciar, también hay una buena concordancia entre los datos calculados de la presión y los datos experimentales, con una desviación individual absoluta máxima de 8,9%.

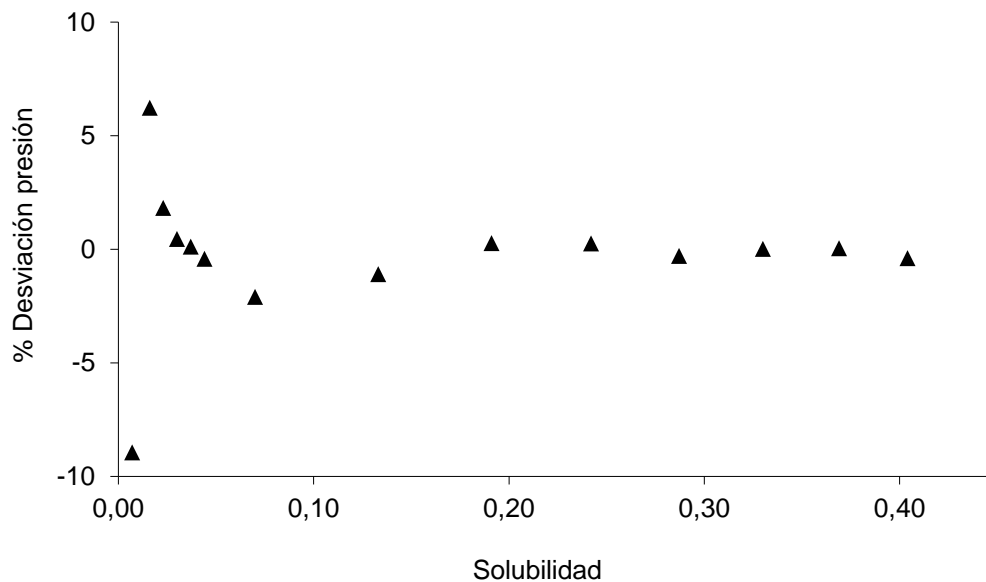


Fig. 2: Desviaciones entre los valores calculados y experimentales de la presión frente a los datos experimentales de solubilidad para el sistema  $N_2O + [Bmim][TF_2N]$  a temperatura  $T = 298$  K, utilizando el modelo PR/KM.

Por último, en la Figura 3 se muestran las desviaciones obtenidas con el modelo de PR/KM para el sistema  $N_2O + [(ETO)_2IM][Tf_2N]$  a la temperatura de 363 K. En este caso, se puede observar que también existe un excelente acuerdo entre los datos calculados de la presión y los datos experimentales, con una desviación individual absoluta máxima de 7,5%.

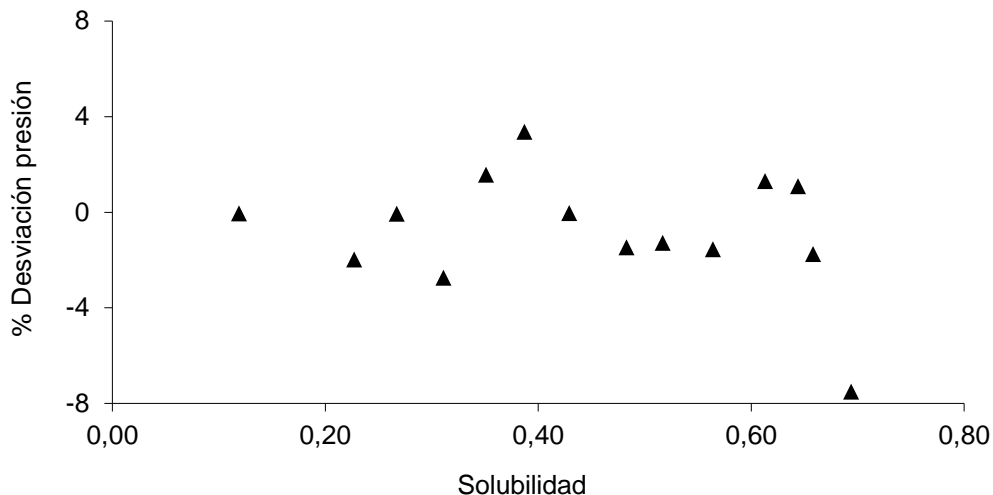


Fig. 3: Desviaciones entre los valores calculados y experimentales de la presión frente a los datos experimentales de solubilidad para el sistema  $N_2O + [(ETO)_2IM][Tf_2N]$  a temperatura  $T = 363$  K, utilizando el modelo PR/KM.

A continuación, en la Tabla 4 se muestran los parámetros óptimos encontrados utilizando el modelo de PR/KM, junto con las desviaciones en la presión para los sistemas  $N_2O + LI$ .

Tabla 4: Parámetros óptimos de interacción binaria  $k_{12}$ ,  $l_{12}$ ,  $m_{12}$  desviaciones en la presión de burbuja correlacionada.

Sistema	T(K)	$k_{12}$	$l_{12}$	$m_{12}$	$\frac{1}{2}P\% \frac{1}{2}$
$N_2O + [BMIM][BF_4]$	293	-1.4507	0.3060	-3.4633	0.9
	303	-1.4643	0.4225	-3.6836	0.6
	313	-1.4506	0.4359	-3.5884	1.1
	323	-1.4349	0.2965	-3.1613	2.3
	333	-1.3965	0.2377	-2.9003	2.7
	343	-1.3821	0.2556	-2.8487	3.9
	353	-1.3456	0.1526	-2.5351	3.8
	363	-1.4028	0.2532	-2.7670	3.2
$N_2O + [(ETO)_2IM][Tf_2N]$	373	-1.4189	0.3122	-2.8473	3
	303	-0.5679	-0.3879	-0.5245	2.1
	313	-0.7325	-0.3646	-0.9438	9
	323	-0.4792	-0.4150	-0.1819	3.4
	333	-0.3333	-0.4544	0.2462	3.3
	343	-0.2280	-0.4638	0.4927	3.9
	353	0.2191	-0.4201	1.1770	3.6
$N_2O + [BMIM][Tf_2N]$	363	0.1963	-0.4315	1.1620	1.8
	283	0.0899	-0.4135	0.4744	8.7
	298	0.1306	-0.4120	0.5570	1,6
	323	0.0107	-0.4136	0.3286	3,4
	348	0.0443	-0.4154	0.4061	9,4

## CONCLUSIONES

A partir de los resultados presentados y discutidos en este trabajo, se pueden extraer las siguientes conclusiones principales: (i) la EdE PR correlaciona con una precisión aceptable los datos de presión de las mezclas de  $N_2O + LI$ ; (ii) La aproximación de Kwak-Mansoori para redefinir la ecuación de estado cúbica tiene la flexibilidad necesaria para converger en todos los casos estudiados.

## NOMENCLATURA

### *Símbolos*

$a_m, b_m, c_m, d_m$	=	parámetros de la ecuación de estado para mezclas
$f$	=	fugacidad
$k_{ij}, l_{ij}, m_{ij}, n_{ij}$	=	parámetros de interacción binaria
$M$	=	peso molecular
$P$	=	presión
$P_c$	=	presión crítica
$R$	=	constante de los gases ideales
$T$	=	temperatura
$T_c$	=	temperatura crítica
$V$	=	volumen
$x_1$	=	solubilidad experimental del gas en el líquido iónico
$Z$	=	factor de compresibilidad
$Z_c$	=	factor de compresibilidad crítico

### *Abreviaciones*

EdE	=	ecuación de estado
LI	=	Líquido iónico
PR	=	Peng-Robinson
KM	=	Kwak-Mansoori

### *Letras Griegas*

$w$	=	factor acéntrico
%D	=	desviación porcentual
%DP	=	desviación de presión

### *Superíndices/Subíndices*

$c$	=	crítico
$cal$	=	calculado
$exp$	=	experimental
$i, j$	=	componentes $i$ y $j$ en una mezcla

## AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen a sus respectivas instituciones su apoyo permanente.

## REFERENCIAS

Chen, Y., Mutelet, F. & Jaubert, J.-N. (2014). Solubility of carbon dioxide, nitrous oxide and methane in ionic liquids at pressures close to atmospheric. *Fluid Phase Equilib.*, 372, 26–33.

Faúndez, C.A., Díaz-Valdés, J.F & Valderrama, J.O. (2014). Testing solubility data of  $H_2S$  and  $SO_2$  in ionic liquids for sulfur-removal processes. *Fluid Phase Equilib.*, 375, 152–60.



- Faúndez, C.A., Barrientos, L.A. & Valderrama, J.O. (2013). Modeling and thermodynamic consistency of solubility data of refrigerants in ionic Liquids. *Int. J. Refrig.*, *36*, 2242–2250.
- Gimeno, M., Mayoral, J. & Andrés, J. (2013). Los líquidos iónicos como una alternativa a la captura de CO<sub>2</sub> en postcombustión. *Boletín grupo Español del Carbón*, *30*, 2-5.
- Hassanpouryouzband, A., Joonaki, E., Edlmann, K. & Haszeldine, R.S. (2021). Offshore geological storage of hydrogen: Is this our best option to achieve net-zero? *ACS Energy Lett.*, *6* (6) 2181–2186.
- Jacquemin, J., Costa Gomes, M.F., Husson, P. & Majer, V. (2006a). Solubility of carbon dioxide, ethane, methane, oxygen, nitrogen, hydrogen, argon, and carbon monoxide in 1-butyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate between temperatures 283 K and 343 K and at pressures close to atmospheric. *J. Chem. Thermodyn.*, *38*, 490–502.
- Jacquemin, J., Costa Gomes, M.F., Husson, P. & Majer, V. (2006a). Solubility of carbon dioxide, ethane, methane, oxygen, nitrogen, hydrogen, argon, and carbon monoxide in 1-butyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate. *Fluid Phase Equilib.*, *240*, 87–95.
- Kwak, T.I. & Mansoori, G.A. (1986). Van der Waals mixing rules for cubic equations of state. Applications for supercritical fluid extraction modeling. *Chem Eng Sci.*, *41*, 1303–1309.
- Peng, D. & Robinson, D. (1976). A new to constant equation of state. *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, *15*, 59-64.
- Pérez-Ramírez, J., Kapteijn, F., Schöffel, K. & Moulijn, J.A. (2003). Formation and control of N<sub>2</sub>O in nitric acid production: where do we stand today? *Appl. Catal. B: Environ.*, *44*, 117-151.
- Radim, M., de Loos, T.W. & Vlugt, T.H.J (2012). State-of the-Art of CO<sub>2</sub> Capture with Ionic Liquids. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, *51* (24), 8149-8177.
- Ramanathan, V. (1998). Trace Gas Greenhouse Effect and Global Warming, Underlying Principles and Outstanding Issues. *Ambio*, *27*, 187-197.
- Ramdin, M., Prasaad Balaji, S., Vicent-Luna, J.M., Gutiérrez-Sevillano, J.J., Calero, S., de Loos, T.W., et al. (2014). Solubility of the Precombustion Gases CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, CO, H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, and H<sub>2</sub>S in the Ionic Liquid [bmim][Tf<sub>2</sub>N] from Monte Carlo Simulations. *J. Phys. Chem. C.*, *118* (41), 23599–23604.
- Revelli, A-L., Mutelet, F. & Jaubert, J-N. (2010). Reducing of Nitrous Oxide Emissions Using Ionic Liquids. *The Journal of Physical Chemistry B*, *114*, 8199-8206.
- Reid, R.C., Prausnitz, J.M. & Sherwood, T.K. (1977). *The properties of gases and liquid*. 3 Edition, McGraw Hill Book Company, New-York, USA.
- Reilly, M. (1972). *Computer programs for chemical engineering education*, Vol. 2, Sterling Swift, Texas.
- Ren, W. & Scurto, A. (2009). Phase equilibria of imidazolium ionic liquid and the refrigerant gas, 1,1,1,2-tetrafluoroethane (r-134a). *Fluid Phase Equilib*, *286*, 1-7.
- Shiflett, M.B., Niehaus, A.N.S., Elliot, B.A. & Yokozeki, A. (2012). Phase Behavior of N<sub>2</sub>O and CO<sub>2</sub> in Room-Temperature Ionic Liquids [bmim][Tf<sub>2</sub>N], [bmim][BF<sub>4</sub>], [bmim][N(CN)<sub>2</sub>], [bmim][Ac], [eam][NO<sub>3</sub>], and [bmim][SCN]. *Int. J. Thermophys.*, *33*, 412-436.

Valderrama, J.O. & Rojas, R.E. (2009). Critical properties of ionic liquids, Revisited. *Ind. Eng. Chem. Res.*, *48*, 6890–6900.

Valderrama, J.O., Reategui, A. & Sanga, W. (2008). Thermodynamic consistency test of vapor-liquid equilibrium data for mixtures containing ionic liquids. *Ind. Eng. Chem. Res.*, *47*, 8416–8422.

Valderrama, J.O. (2003). The state of the cubic equations of state. *Ind. Eng. Chem. Res.*, *42*, 1603–1618.

Valderrama, J.O. (1990). A Generalized Patel-Teja Equation of State for Polar and Non-Polar Fluids and Their Mixtures. *J. Chem. Eng. Japan* *23*, 87-91.

Wong, D. & Sandler, W. (1992). A theoretically correct mixing rule equation of state. *A.I.Ch.E.J.*, *38*, 671-680.

Yokozeki, A. & Shiflett, M.B (2009). Separation of Carbon Dioxide and Sulfur Dioxide Gases Using Room-Temperature Ionic Liquid [hmim][Tf2N]. *Energy Fuels*, *23*, 4701–4708.