

ESTUDO TEÓRICO DAS PROPRIEDADES DE LÍQUIDOS IÔNICOS DO TIPO IMIDAZÓLIO ATRAVÉS DA METODOLOGIA COARSE GRAIN

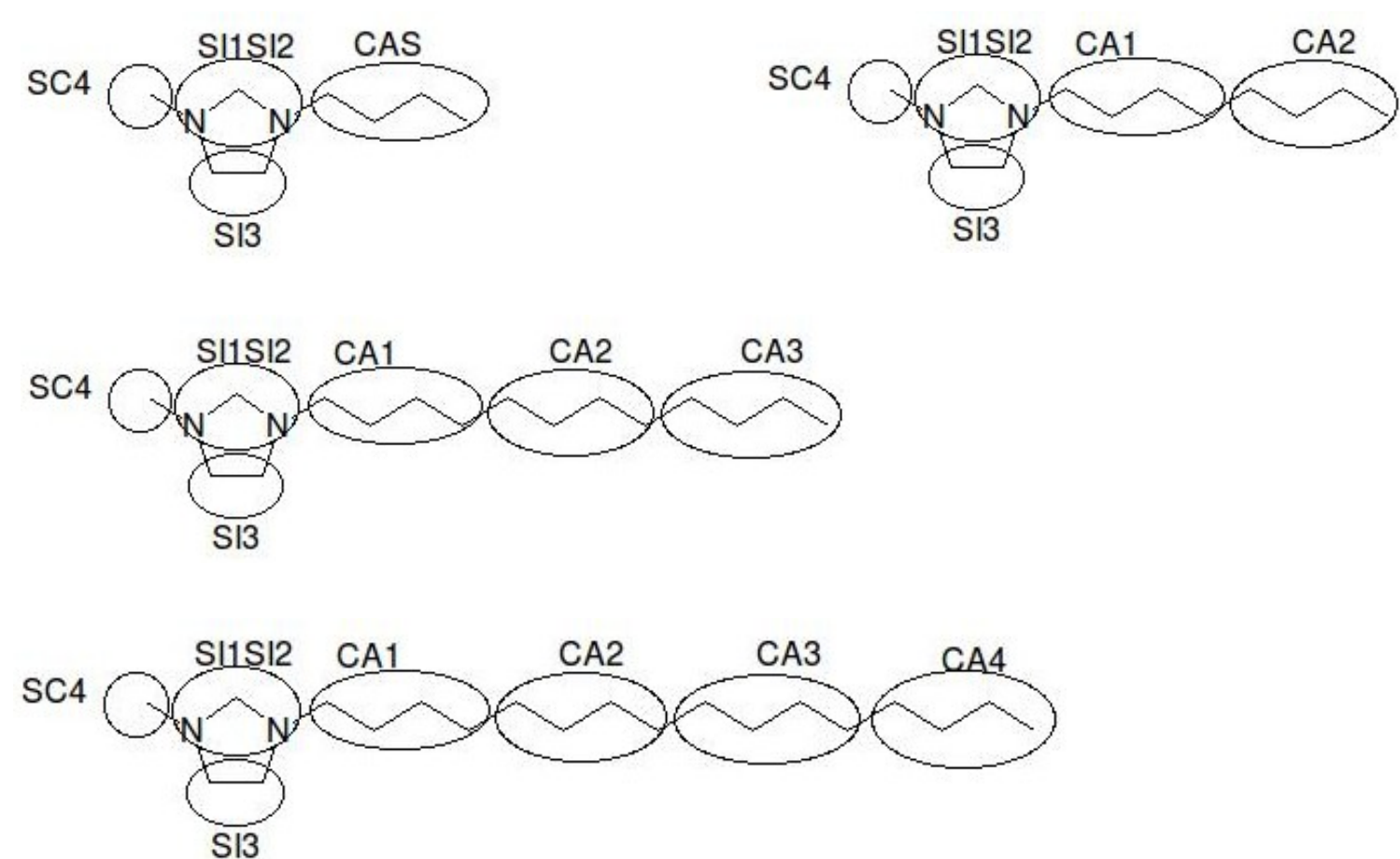
Universidade Federal do Rio Grande do Sul | Instituto de Química | Jessé G. M. Neumann¹, Hubert Karl Stassen²

INTRODUÇÃO

Líquidos iônicos são, essencialmente, compostos iônicos que possuem ponto de fusão abaixo de 100 °C. Entre suas principais características, destacam-se: baixa pressão de vapor, alta capacidade de solvatação, baixa volatilidade e sua reciclabilidade. Sua utilização como solventes é muito favorável, tanto do ponto de vista ambiental como para a saúde humana. Devido a tais características, torna-se importante a realização de um estudo das propriedades dessas substâncias a nível microscópico, algo que é possível através de simulações por dinâmica molecular. Dentre os métodos de simulação por dinâmica molecular, é válido destacar a metodologia *Coarse Grain*, que torna viável a simulação de longos tempos e de sistemas complexos, como por exemplo proteínas e compostos com grandes cadeias alquílicas.

METODOLOGIA

Os respectivos cátions de cada líquido iônico foram subdivididos em grupos, conforme esquema representado a seguir:



Sempre buscou-se aliar longos tempos de simulação com o mínimo custo computacional possível. O campo de força Martini, um campo do tipo *Coarse Grain*, se enquadra nestas características e foi adotado para a realização deste projeto. Sua filosofia consiste em considerar, em média, quatro átomos pesados como uma única partícula esférica. Este fato permite sua aplicação no estudo computacional de uma vasta gama de sistemas complexos, como por exemplo biomembranas, algo que demandaria muito tempo quando realizado através de métodos mais convencionais.

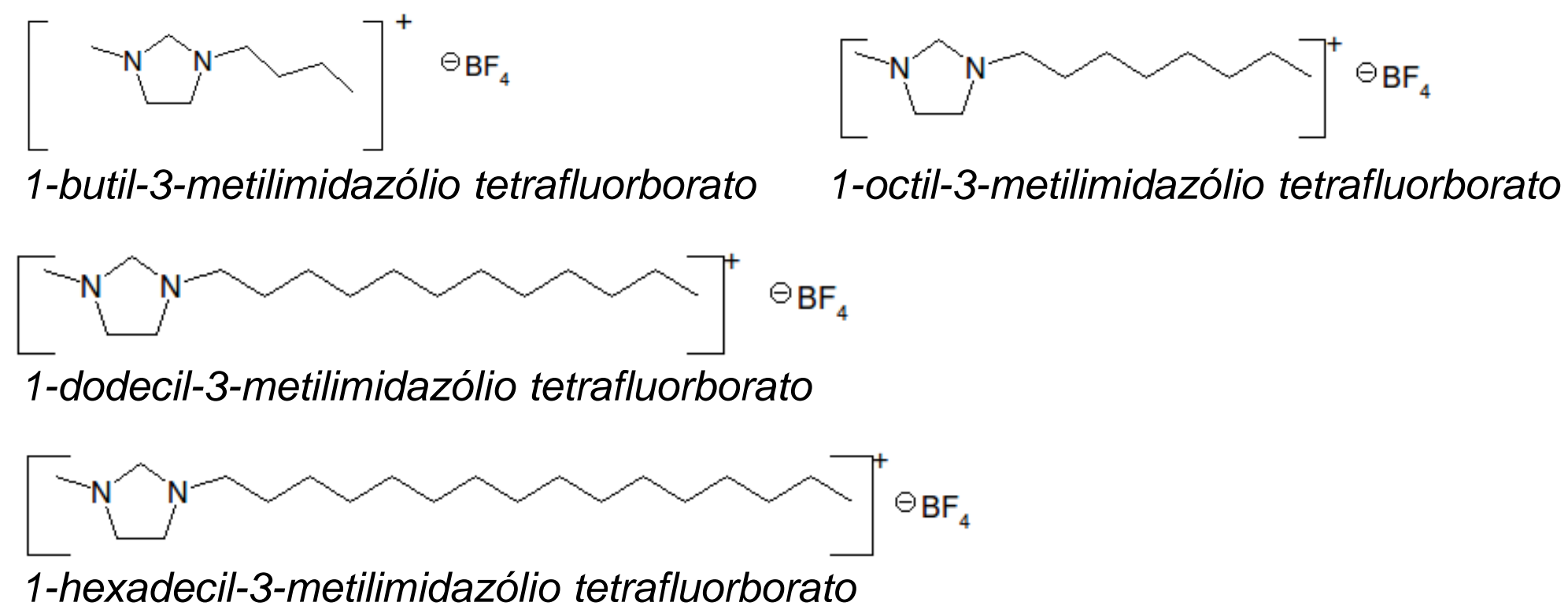
No início do trabalho, foram realizadas simulações que seguem o modelo atômico (*All Atom*), onde cada átomo do sistema é considerado individualmente. A finalidade desta etapa foi a obtenção de dados para, posteriormente, ser possível a comparação com os resultados obtidos através da metodologia *Coarse Grain* empregada. As simulações consistiram das seguintes etapas: criação da caixa de simulação, compressão da caixa até que o volume apresentasse pouca variação entre as simulações, aquecimento do sistema e posterior resfriamento e equilíbrio. Utilizou-se o *ensemble* NpT, onde são mantidos constantes número de partículas, pressão e temperatura.

Os parâmetros utilizados para avaliar a precisão da metodologia *Coarse Grain* foram densidade e distribuição radial de pares.

As simulações e análises foram feitas com o pacote de softwares GROMACS.

OBJETIVO

O estudo teve por finalidade, através de simulações de dinâmica molecular, fornecer descrição microscópica para os seguintes líquidos iônicos:



RESULTADOS

Após as simulações, foram comparadas as densidades obtidas em ambos os modelos, *All Atom* e *Coarse Grain*. Os resultados são apresentados na tabela abaixo:

Líquido iônico	Densidade – <i>All Atom</i>	Densidade – <i>Coarse Grain</i>
1-butil-3-metilimidazólio tetrafluorborato	1200 kg/m ³	1204,43 kg/m ³
1-octil-3-metilimidazólio tetrafluorborato	1100 kg/m ³	1125,53 kg/m ³
1-dodecil-3-metilimidazólio tetrafluorborato	1050 kg/m ³	1077,32 kg/m ³
1-hexadecil-3-metilimidazólio tetrafluorborato	1020 kg/m ³	1038,05 kg/m ³

Também foram calculadas as distribuições radiais de pares para os modelos *Coarse Grain* (CG) e *All Atom* (AA), a fim de avaliar a precisão do método adotado (ver figuras 1-4, onde as abreviações BMI e C16MI/C16 referem-se, respectivamente, aos líquidos iônicos 1-butil-3-metilimidazólio tetrafluorborato e 1-hexadecil-3-metilimidazólio tetrafluorborato).

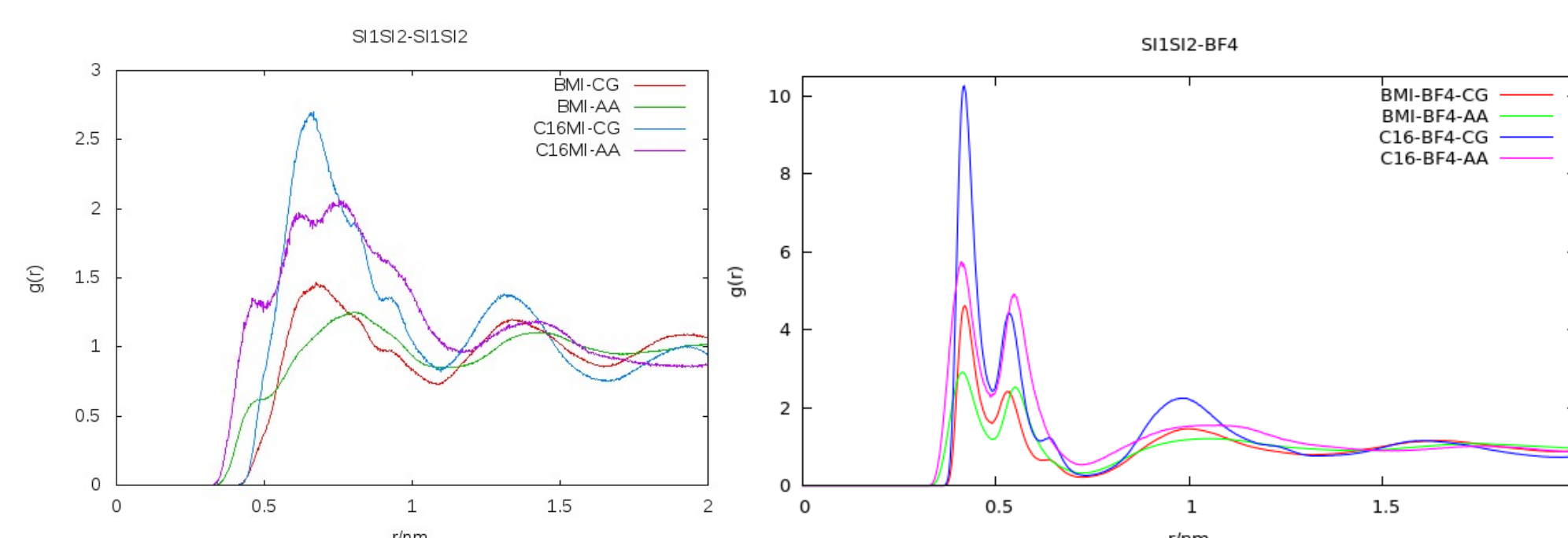


Fig. 1: RDF para os sítios SI1SI2.

Fig. 2: RDF para os sítios SI1SI2 e BF4.

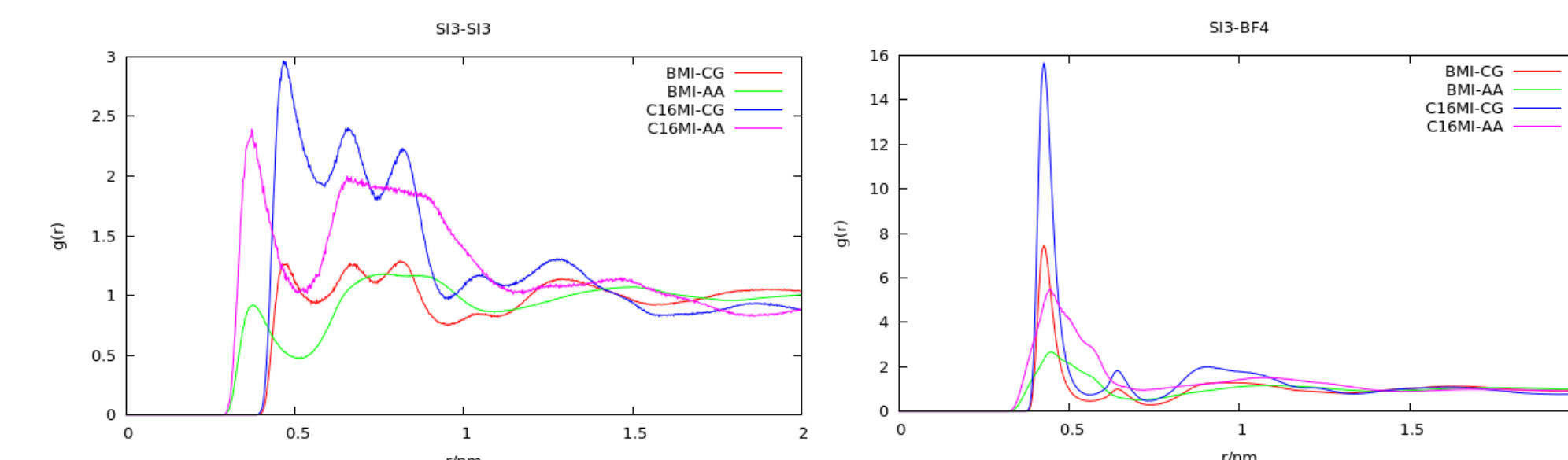


Fig. 3: RDF para os sítios SI3.

Fig. 4: RDF para os sítios SI3 e BF4.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

A partir dos resultados apresentados, pode-se dizer que, para as propriedades analisadas, o modelo proposto fornece uma descrição razoavelmente precisa para os líquidos iônicos estudados. Eventuais discrepâncias entre modelo *Coarse Grain* e modelo *All Atom* requerem um estudo mais aprofundado.