



SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA
XXVIII SIC

paz no plural



Evento	Salão UFRGS 2016: SIC - XXVIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2016
Local	Campus do Vale - UFRGS
Título	Pares Iônicos em Solução
Autor	JESSÉ GUILHERME MARIANO NEUMANN
Orientador	HUBERT KARL STASSEN

Autor: Jessé G. M. Neumann
Orientador: Dr. Hubert Karl Stassen
Instituição de ensino: Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Estudo Computacional de Pares Iônicos em Solução

Tanto na indústria como no meio acadêmico, líquidos iônicos despertam o interesse devido à perspectiva de aplicações na “química verde”, como também por propriedades como pressão de vapor desprezível (e portanto não-volatilidade), alta estabilidade térmica, boa capacidade de solvatação (tanto solutos polares como apolares) e boa condutividade intrínseca. Entretanto, apesar da intensa pesquisa sobre líquidos iônicos atuando como solventes, pouco se estuda o seu papel como solutos.

Neste trabalho, pretende-se analisar o comportamento dos pares iônicos 1,3-dimetilimidazólio/imidazolato e 1,2,3-trimetilimidazólio/imidazolato em solventes comuns (água, clorofórmio e DMSO), utilizando simulações de Dinâmica Molecular, mais especificamente através da construção do Potencial de Força Média, através da metodologia de *umbrella sampling*, a fim de determinar a energia livre de dissociação ou associação entre cátion e ânion para cada par iônico.

O Potencial de Força Média (W) fornece a energia livre (ΔG) em função da distância entre os centros de massa do cátion e do ânion (r), e pode ser expresso pela seguinte equação:

$$W(r) = -k_B T \ln g(r) \quad (1)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann, T é a temperatura absoluta e $g(r)$ é a função de distribuição radial para o sistema. A função de distribuição radial está relacionada com a probabilidade de que a coordenada espacial r assumira um determinado valor; assim sendo, valores de r correspondendo a regiões de alta energia possuem menor probabilidade de amostragem. Para contornar o problema da amostragem deficiente, utiliza-se o método de *umbrella sampling*, em que particiona-se o intervalo de r que se deseja analisar em “janelas” ou intervalos menores, nos quais adiciona-se à energia do campo de força potenciais harmônicos do tipo

$$U(r) = k(r - r_0)^2 \quad (2)$$

onde k é a constante de força e r_0 é o valor de r perto do qual se deseja realizar a amostragem.

Aplicando-se a metodologia acima descrita para o par iônico 1,2,3-trimetilimidazólio/imidazolato, construiu-se a curva do Potencial de Força Média para o sistema em clorofórmio e também em água, para o processo de afastamento dos íons, partindo-se da distância mínima entre os centros de massa. O sistema em clorofórmio consistiu do par iônico e 2583 moléculas do solvente em uma caixa de simulação cúbica de aresta igual a 7,15536 nm; já o sistema em água consistiu do par iônico e 13463 moléculas do solvente em uma caixa de simulação cúbica de aresta igual a 7,40000 nm. As simulações foram realizadas para ambos os sistemas sob pressão de 1 bar e temperatura de 298,15 K. A variação de energia livre referente ao processo de dissociação do par iônico em clorofórmio foi de 50,0 kJ mol⁻¹, ao passo que a variação de energia livre para o mesmo processo em água foi de -26,8 kJ mol⁻¹. Ainda, é possível obter a constante de equilíbrio do processo. Sabe-se que a energia livre de Gibbs está relacionada à constante de equilíbrio (K) pela expressão

$$\Delta G = -RT \ln K \quad (3)$$

onde R é a constante dos gases e T é a temperatura absoluta. Para a dissociação em clorofórmio, $K_{\text{Clorofórmio}} = 1,74 \times 10^{-9}$; para a dissociação em água, $K_{\text{Água}} = 4,96 \times 10^4$.