

265

ESTRUTURAÇÃO EM MISTURAS DE LÍQUIDOS IÔNICOS COM ACETONITRILA. *Elisa Bielski, Jones de Andrade, Hubert Karl Stassen (orient.) (UFRGS).*

Desenvolveu-se simulações de dinâmica molecular (DM) em misturas do líquido iônico (LI) 1-etil-3-metilimidazólio tetrafluorborato com o solvente orgânico acetonitrila (AN). Com o objetivo de elucidar o efeito de diferentes concentrações da AN na estruturação do LI, calculou-se funções de distribuição radiais (RDFs) e espaciais (SDFs) para todas as espécies da mistura, variando sistematicamente a proporção da AN frente ao LI. Escolheu-se frações molares (em termos de AN) de 0, 0, 25, 0, 5, 0, 75 e 1, bem como soluções de uma molécula de AN em LI e uma molécula de LI em AN para representar a diluição infinita. Os resultados preliminares mostram coordenações básicas cátion-ânion, cátion-AN, AN-AN e ânion-AN controladas por interações eletrostáticas, bem como as regiões preferenciais de competição para a coordenação da AN. Estudos avançados com outros solventes orgânicos e de formação de agregados estão sendo efetuados. (Fapergs).