



Evento	XXI FEIRA DE INICIAÇÃO À INOVAÇÃO E AO DESENVOLVIMENTO TECNOLÓGICO – FINOVA/2012
Ano	2012
Local	Porto Alegre - RS
Título	Preparação de Líquidos Iônicos
Autor	SABRINA PORCIUNCULA DA SILVA
Orientador	JAIRTON DUPONT

Líquidos iônicos (LIs) baseados nos cátions 1,3-dialquil-imidazólio são os mais investigados e utilizados por apresentarem propriedades físico-química singulares tais como: baixa pressão de vapor, estabilidade térmica e solubilidades dos gases nos LIs, sendo esta a mais estudada atualmente. O constante aumento de CO₂ na atmosfera tem gerado grandes impactos ambientais, portanto a busca por uma forma eficiente de capturar esse gás emitido se faz cada vez mais necessária e devido à alta solubilidade do CO₂ os LIs foram vistos como uma alternativa promissora. Este trabalho de iniciação científica visa à síntese de líquidos iônicos monocatiônicos derivados do cátion 1-butil-3-metilimidazólio (BMI) e seus derivados, mbmim.CH₃SO₃ (3-metil-1-butil-3-metilimidazólio), dmbmim.CH₃SO₃ (3-metil-1-butil-3,3-dimetilimidazólio), dmpmim.CH₃SO₃ (3-metil-1-propil-3,3-dimetilimidazólio) e seus derivados fluorados contendo triflúor propano (CF₃emim.N(Tf)₂ e CF₃emim.PF₆) bem com um derivado com uma ramificação direta no cátion tbmim.N(Tf)₂ (3-metil-tert-butilimidazólio).

O procedimento experimental para a síntese do 1-butil-3-metilimidazólio inicia com a preparação do alquilante através de uma reação de substituição nucleofílica, tendo como reagentes o álcool correspondente (Butanol), Cloreto de Metanossulfonila, Trietilamina e Diclorometano (solvente). O produto dessa reação é o Butil Metanossulfonato, que é usado na reação seguinte com Metil-Imidazólio (previamente destilado) à temperatura ambiente até ocorrer a formação de cristais de 1-butil-3-metil Imidazólio Metanossulfonato. A purificação é feita através da recristalização em acetona.

Uma vez sintetizado o líquido, obtemos seus derivados através de uma simples troca do ânion (Metanossulfonato) utilizando como reagentes: KPF₆, NaBH₄ e LiNTf₂ obtendo como produtos BMI.PF₆, BMI.BH₄, BMI.N(Tf)₂.

O procedimento experimental para a síntese mbmim.CH₃SO₃ inicia da mesma forma que o anterior porém usando o álcool 3-metil-1-butanol, obtendo como produto 3-metil-1-butil Metanossulfonato. Este é usado na reação seguinte com Metil-Imidazólio à temperatura de 60°C, durante 24h. Ocorre a formação de cristais de mbmim.CH₃SO₃. A purificação é feita em acetona.

Uma vez sintetizado o líquido, obtemos seus derivados através de uma simples troca do ânion (Metanossulfonato) utilizando como reagentes: KPF₆, e LiN(Tf)₂ obtendo como produtos mbmim.PF₆, mbmim.N(Tf)₂.

O mesmo procedimento é utilizado na síntese dmbmim.CH₃SO₃ e seus derivados e dmpmim.CH₃SO₃ e seus derivados. Devido ao impedimento estérico a reação de síntese do dmpmim.CH₃SO₃ se dá à 130°C, durante 24h.

A síntese dos LIs com ramificação direta no cátion exige uma metodologia diferente, já que usando o álcool correspondente a reação que ocorre é 100% de eliminação. O procedimento experimental inicia com a adição de glicoxal, tert-butil amina e água destilada, ao atingir a temperatura de 60°C é adicionado paraformaldeído seguido do carbonato de amônio lentamente, a reação é refluxada por 4h. O produto obtido é o tert-butilimidazólio. Em seguida é feita uma metilação com iodeto de metila à 50°C, durante 18h, obtendo como produto tbmim.I.

Uma vez sintetizado o líquido, obtemos seus derivados através de uma simples troca do ânion (Metanossulfonato) utilizando como reagentes: LiN(Tf)₂ obtendo como produto tmmim.N(Tf)₂. Para a síntese dos LIs contendo trifluoropropano é utilizado 1-iodo-3,3,3-trifluoropropano como alquilante, o que requer alguns cuidados especiais uma vez que o ânion é o iodeto e facilmente se oxida. O procedimento experimental consiste na reação entre 1-iodo-3,3,3-trifluoropropano e Metil-Imidazólio, à 40°C, durante 24h. Ocorre a formação de cristais de CF₃emim.I, que devem ser mantidos ao abrigo de luz.

Uma vez sintetizado o líquido, obtemos seus derivados através de uma simples troca do ânion (Iodeto) utilizando como reagentes: KPF₆, e LiN(Tf)₂ obtendo como produtos CF₃emim.PF₆, CF₃emim.N(Tf)₂.

A pureza de todos os LIs obtidos foi determinada por ressonância magnética nuclear de hidrogênio (RMN ¹H) com um instrumento Anasazi Instruments Inc. 60 MHz utilizado rotineiramente em nossa pesquisa.

Assim a partir da obtenção destes LIs podemos realizar testes eficientes de captura do CO₂, contribuindo desta forma para uma melhora e/ou diminuição da emissão deste gás na atmosfera.