

Ana Carolina L.C.Vicente e Paulo F.B.Gonçalves

Instituto de Química - Universidade Federal do Rio Grande do Sul

INTRODUÇÃO

A acumulação de dióxido de carbono na atmosfera é uma das principais causas do aquecimento global. Uma maneira de retirá-lo da atmosfera é fazendo a ciclo-adição, catalisada por líquidos iônicos, de dióxido de carbono em epóxidos.

Observou-se que os líquidos iônicos, comparados com outros catalisadores, promovem um excelente rendimento; além disso, a sua pressão de vapor é desprezível e apresenta boas propriedades de solvatação.

Em particular o nosso estudo está focado na transferência de carga entre as espécies envolvidas na reação.

MÉTODOS

-Método: Teoria do funcional da densidade (DFT) utilizando software Gaussian 09®

-Funcional: ω -B97XD

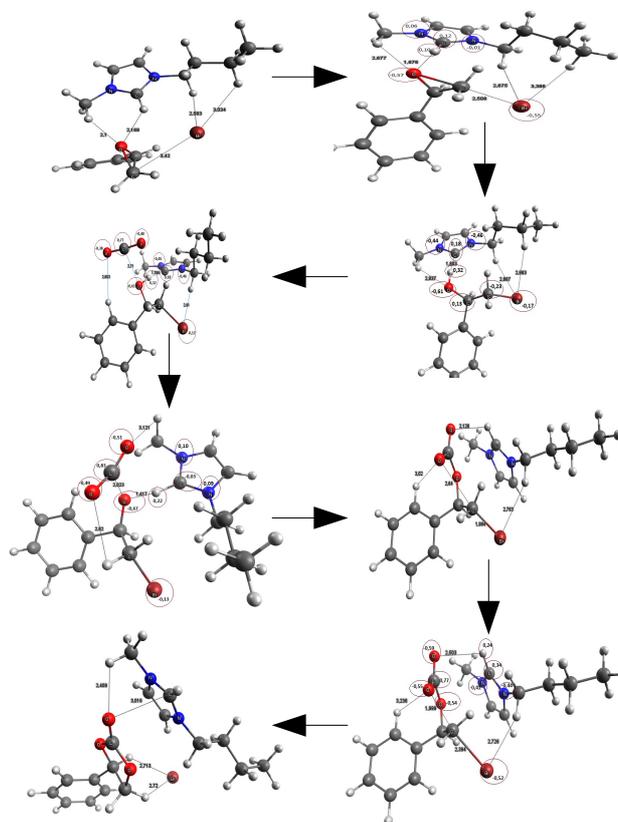
-Base: 6-31G(d,p)

-Otimização Geométrica e Análise vibracional.

Para a análise da transferência de carga entre as espécies, utilizou-se a metodologia baseada no potencial eletrostático **ChelpG** (Charges from Electrostatic Potential, Grid method).

DESENVOLVIMENTO

Analisando a mudança de cargas do sistema, é possível ver um rompimento da ligação entre o C do imidazólio e o hidrogênio, e uma nova ligação entre o Br e o C do epóxido; além da formação da ligação entre o H do imidazólio e o O do epóxido. Em seguida fica claro que não há mudanças de cargas com a aproximação do CO₂. Finalmente vemos que a quebra de ligação do Br-C a volta do H ao imidazólio nos dá a possibilidade da formação de um carbonato cíclico.



CONCLUSÃO

Com base na análise das cargas das espécies envolvidas na reação, é observado um aumento na densidade eletrônica dos N do imidazólio. Isto deve-se à redistribuição da carga gerada pela quebra da ligação C-H do imidazólio. Na etapa seguinte, a carga do C do epóxido aumenta, devido à nova ligação C-Br. Também é observado que o sistema essencialmente não altera suas cargas com a chegada do CO₂. Por outro lado, o retorno do H ao imidazólio faz com que o O fique mais negativo e ataque o C do CO₂. Na etapa final, vemos que o carbono aumenta sua carga com a quebra da ligação C-Br, concluindo a formação de um carbonato cíclico. Com base nos resultados obtidos, é possível concluir que o líquido iônico participa na reação não somente como solvente, mas como catalisador.

Bibliografia: Girard, Anne-Lise; Simon, Nathália; Zanatta, Marcileia; Marmitt, Sandro; Gonçalves, Paulo; Dupont, Jairton. Insights on recyclable catalytic system composed of task-specific ionic liquids for the chemical fixation of carbon dioxide. *Green Chem.*, 2014,16, 2815-2825