



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2015: SIC - XXVII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2015
<b>Local</b>	Porto Alegre - RS
<b>Título</b>	Estudo teórico das propriedades de líquidos iônicos do tipo imidazólio através da metodologia Coarse Grain
<b>Autor</b>	JESSÉ GUILHERME MARIANO NEUMANN
<b>Orientador</b>	HUBERT KARL STASSEN

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

### **Estudo teórico das propriedades de líquidos iônicos do tipo imidazólio através da metodologia *Coarse Grain***

Líquidos iônicos são, essencialmente, compostos iônicos que possuem ponto de fusão abaixo de 100 °C. Pode-se destacar que possuem baixa pressão de vapor, têm forte habilidade de solvatação, não são inflamáveis, sua reciclagem é viável e podem solubilizar compostos orgânicos, inorgânicos e polímeros. Devido à baixa volatilidade, a aplicação como solventes é altamente favorável, tanto do ponto de vista ambiental, como para a saúde humana. Outras aplicações interessantes dos líquidos iônicos são na catálise em síntese orgânica e como fungicidas. Estes são apenas alguns exemplos das várias aplicações destes compostos.

Simulações por dinâmica molecular são capazes de fornecer descrição microscópica para sistemas como líquidos iônicos. Visando realizar simulações longas e minimizar o custo computacional, no presente estudo adotou-se o campo de força Martini, um campo do tipo *Coarse Grain*, cuja filosofia consiste em considerar, em média, quatro átomos pesados como uma única partícula esférica; esta característica também permite estudar sistemas de alta complexidade, como biomembranas, algo que normalmente demandaria muito tempo. A princípio, foram realizadas simulações que seguiam o modelo atomístico (*All Atom*), onde cada átomo do sistema é considerado individualmente. O objetivo desta etapa foi obter dados para futuras comparações com os resultados obtidos através do modelo *Coarse Grain*. As simulações consistiram das seguintes etapas: criação da caixa de simulação, compressão da caixa até que o volume apresentasse pouca variação entre uma simulação e outra, aquecimento do sistema e posterior resfriamento e equilíbrio. Foi adotado o *ensemble* NpT, em que são mantidos constantes o número de partículas, a pressão e a temperatura.

Com a finalidade de avaliar a precisão do modelo *Coarse Grain* adotado, foram calculadas e comparadas as densidades e distribuições radiais de pares referentes a ambos os modelos, *All Atom* e *Coarse Grain*. As densidades calculadas para o modelo *Coarse Grain* apresentaram valores pouco maiores que aquelas calculadas para o modelo atomístico, com o erro máximo não passando de 3%. As distribuições radiais de pares também apresentaram razoável concordância para ambos os modelos.