

Cálculos teóricos das interações entre o líquido iônico imidazolato de 1,3-dimetilimidazólio e água por simulações de dinâmica molecular

André Delfino Rodrigues, Prof. Dr. Hubert Karl Stassen

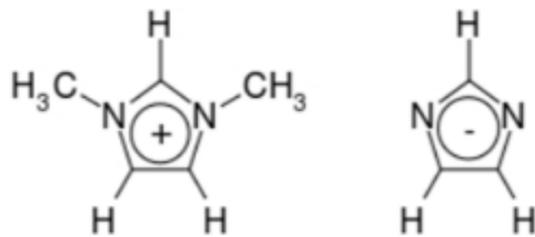
Instituto de Química, Grupo de Química Teórica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Introdução

Simulações de dinâmica molecular com o líquido iônico imidazolato de 1,3-dimetilimidazólio foram realizadas pelo GROMACS 4.5.5, em sistemas contendo água, em frações molares 1:1 e 3:2 (líquido iônico - água), com o campo de força Amber [1]. A temperatura e a pressão dos sistemas foram mantidas constantes a 330 K e a 1 bar, respectivamente.

Metodologia

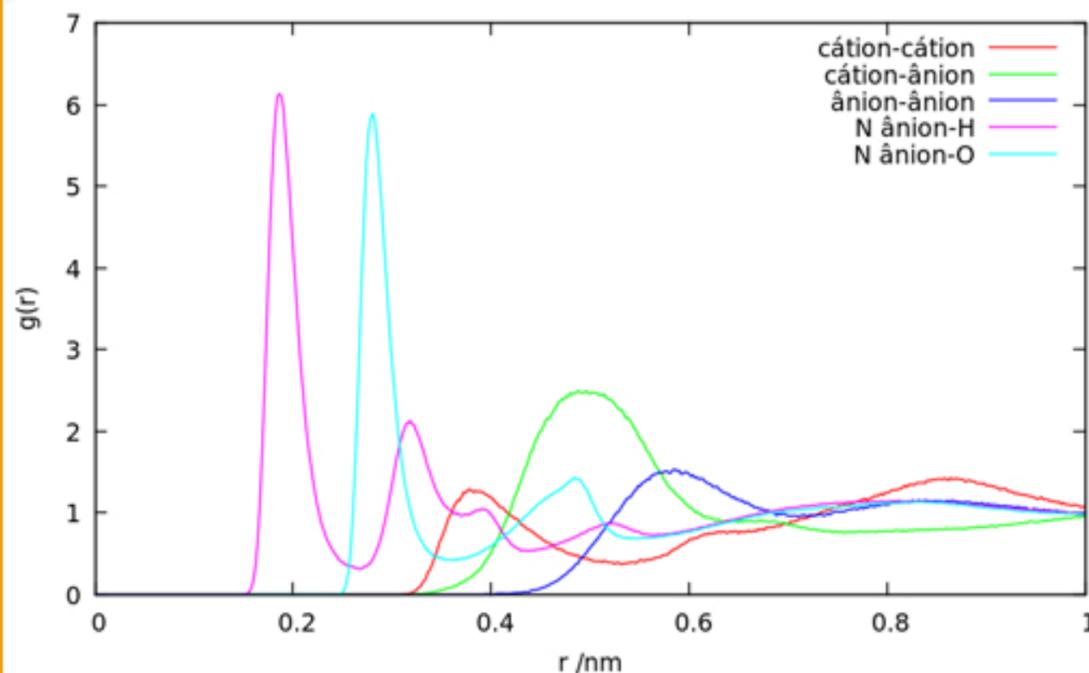
A simulação inicial consistia de um sistema bifásico, em que a água ocupava a fase superior e o líquido iônico ocupava a fase inferior da caixa. Ao longo de sucessivas simulações verificou-se a homogeneização completa do sistema devido à solvatação dos pares iônicos pela água. A densidade da mistura assumiu um valor constante de 1153 g.cm^{-3} para a caixa na proporção 1:1 e de 1154 g.cm^{-3} para a caixa na proporção 3:2 durante as simulações.



Imidazolato de 1,3-dimetilimidazólio

As energias de interação coulombianas e de Lennard-Jonnes entre o par iônico e o solvente foram calculadas ao longo da dissolução. Em geral, observou-se que as interações de Lennard-Jonnes entre o cátion e a água e entre o ânion e a água atingiram um valor médio de -4 kJ.mol^{-1} e de 8 kJ.mol^{-1} , respectivamente. Para as interações coulombianas, observou-se um valor médio de -8 kJ.mol^{-1} entre o cátion e a água e de -80 kJ.mol^{-1} entre o ânion e a água, indicando que as interações de origem coulombianas são mais intensas, sendo responsáveis pela grande capacidade desse líquido iônico de atrair moléculas de água.

Cálculos de funções de distribuição radial foram realizados para o sistema de fração molar 1:1 e os resultados estão apresentados no gráfico abaixo, em que $g(r)$ define as funções de distribuição radial de cada interação e r é a distância, dada em nanômetros.



Assim, foi possível observar uma forte coordenação entre os átomos de hidrogênio da água e os átomos de nitrogênio dos ânions (0,9 prótons da água por nitrogênio), que ocorre devido à formação de intensas ligações de hidrogênio, já observadas em estudos do par iônico em solventes orgânicos [2]. Além disso, observou-se que a função de distribuição radial entre cátions apresenta o primeiro pico em distâncias mais curtas do que entre cátion e ânion.

Pode-se, então, concluir que houve forte estabilização do líquido iônico pelas moléculas de água, que se coordenam preferencialmente aos ânions.

Referências

- [1] J. de Andrade, E. S. Boes and H. Stassen, *J. Phys. Chem. B*, 2002, **106**, 13344-13351.
 [2] Marcileia Zanatta, Anne-Lise Girard, Graciane Marin, Gunter Ebeling, Francisco P. dos Santos, Chiara Valsecchi, Hubert Stassen, Paolo R. Livotto, William Lewis, Jairton Dupont, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2016, **18**, 18297.

Agradecimentos