



Evento	Salão UFRGS 2018: SIC - XXX SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2018
Local	Campus do Vale - UFRGS
Título	Cálculos teóricos das interações entre o líquido iônico imidazolato de 1,3-dimetilimidazólio e água por simulações de dinâmica molecular
Autor	ANDRÉ DELFINO RODRIGUES
Orientador	HUBERT KARL STASSEN

Aluno: André Delfino Rodrigues

Cartão UFRGS: 00264526

Orientador: Prof. Dr. Hubert Karl Stassen

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

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

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.

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.

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.

Através de cálculos de funções de distribuição radial foi possível observar uma forte coordenação entre o átomo de hidrogênio da água e o átomo 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].

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.