



Evento	Salão UFRGS 2020: SIC - XXXII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2020
Local	Virtual
Título	Efeito da água na solubilidade do sulfeto de hidrogênio (H ₂ S) em líquidos iônicos de acetato de C ₄ MIM ⁺ por dinâmica molecular
Autor	LEANDRO SEGAT PERINI
Orientador	HUBERT KARL STASSEN

Efeito da água na solubilidade do sulfeto de hidrogênio (H_2S) em líquidos iônicos de acetato de C_4MIM^+ por dinâmica molecular.

O sulfeto de hidrogênio é um gás que afeta o sistema respiratório e neurológico, pesquisas indicam que trabalhadores da indústria petroquímica sofrem de desmaios e problemas a intoxicação por este gás¹. Além disso, a presença dele e do CO_2 no gás natural diminuem a sua capacidade de combustão (fenômeno conhecido como sour gas). Normalmente são utilizadas aminas para remoção de CO_2 e H_2S , essas são voláteis e contribuem para a poluição atmosférica. Líquidos iônicos se apresentam como uma solução desse problema por possuir baixa pressão de vapor e mudanças na estrutura promovem interações diferentes com os gases de interesse. Partindo de resultados prévios que analisaram líquidos iônicos formados por diferentes cátions e suas interações com H_2S o objetivo atual do trabalho é analisar a influência da água presente nos líquidos iônicos na fisorção do gás pelo líquido iônico. Utilizando o método de dinâmica molecular é possível prever o comportamento da mistura (sulfeto de hidrogênio + líquido iônico) com diferentes concentrações de H_2O presente no líquido iônico. O software utilizado para dinâmica molecular é o GROMACS e os testes são realizados utilizando variações de concentração de água no líquido iônico e variações de tempo de simulação. Com base nos resultados obtidos nas simulações tendo três parâmetros de concentração de água diferentes (0%, 25% e 50%) podemos apontar uma diminuição da fisorção do H_2S com o aumento da concentração de água presente no sistema e assim sugerindo que a eficácia do líquido iônico na fisorção desse gás está relacionada com uma baixa concentração de H_2O presente no sistema.

Autor: Leandro Segat Perini

Orientador: Prof.Dr. Hubert Karl Stassen

Instituição: Universidade Federal do Rio Grande do Sul