



Conectando vidas Construindo conhecimento



XXXIII SIC SALÃO INICIAÇÃO CIENTÍFICA

Evento	Salão UFRGS 2021: SIC - XXXIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2021
Local	Virtual
Título	Solubilidade do Sulfeto de Hidrogênio (H ₂ S) em líquidos iônicos baseados no cátion 1-butil-3-metilimidazólio [C ₄ mim] ⁺ por Dinâmica Molecular
Autor	LEANDRO SEGAT PERINI
Orientador	HUBERT KARL STASSEN

Solubilidade do Sulfeto de Hidrogênio (H₂S) em Líquidos iônicos baseados no cátion 1-butil-3-metilimidazólio [C₄mim]⁺ 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 CO₂ no gás natural diminuem a sua capacidade de combustão (fenômeno conhecido como sour gas). Normalmente são utilizadas aminas para remoção de CO₂ e H₂S, 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 H₂S 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 H₂O 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. Os resultados extraídos e analisados são de densidade parcial no interior da caixa de simulação e as funções de distribuição radial (RDFs). Após os gráficos plotados é evidente uma tendência de diminuição da eficiência da fisorção do gás pelo líquido iônico com o aumento da concentração de água presente no sistema, e, portanto, a eficácia do método proposto depende de baixas concentrações de água associada ao líquido iônico no sistema.

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Autor: Leandro Segat Perini

Orientador: Hubert Karl Stassen