



# XIX SBOQT

Simpósio Brasileiro de Química Teórica 2017

12 a 17/Nov, 2017, Águas de Lindóia/SP, Brasil

## **Estudo das Propriedades Físico-Químicas do Líquido Iônico 1-Butil-3-Metil-Imidazólio Bis(Trifluormetanosulfonil)Imida ([BMIm][Tf<sub>2</sub>N]) Puro e em Solução Aquosa**

Gabriel J. C. Araujo (PG), Tuanan da Costa Lourenço (PG), Luciano T. Costa (PQ)

*Instituto de Química, Universidade Federal Fluminense. R. São João Batista, 2-188 -  
Centro, Niterói - RJ*

**Abstract:** Líquidos Iônicos (LIs) são uma classe de materiais compostos por cátion e ânion que em sua maioria possuem ponto de fusão inferior a 100°C. Devido a possibilidade de apresentar propriedades físico-químicas diferenciadas (criadas a partir de simples modificações em sua estrutura química) como, baixa pressão de vapor, baixa inflamabilidade, grande solubilidade de compostos orgânicos e inorgânicos, estabilidade térmica e química, seu espectro de aplicação torna-se amplo, desde aplicações biológicas [1] a materiais para captura e separação de gases [2]. Para se obter uma melhor performance destas aplicações é necessário o entendimento das interações entre os solventes envolvidos no processo. Sabe-se que a água é um solvente amplamente utilizado industrialmente e, portanto, é altamente relevante entender como se dá a interação entre os líquidos e os efeitos destas interações sobre suas propriedades físico-químicas. Devido à facilidade de se correlacionar efeitos estruturais e propriedades termodinâmicas, a dinâmica molecular (DM) tem sido amplamente utilizada para este tipo de estudo. Porém, para que os resultados obtidos da simulação computacional sejam consistentes com as propriedades medidas experimentalmente, é fundamental o desenvolvimento de um campo de força que reproduza de maneira correta as interações entre as espécies químicas do sistema. No caso de LIs o procedimento é um pouco mais complexo que para compostos moleculares, já que além das interações eletrostáticas a dispersão de carga confere propriedades como baixa pressão de vapor, boa condutividade iônica, entre outras [3]. Dois efeitos devem ser levados em conta: a polarização e a transferência de carga entre os íons. Isso ocorre devido ao grande número e diferentes tipos de interações entre cátion e ânion, reduzindo as cargas efetivas dos íons para menores do que um inteiro em fase condensada [4]. Nos últimos anos modelos de campo de força polarizáveis e não-polarizáveis têm sido desenvolvidos com o intuito de reproduzir esses efeitos [5]. Os campos não-polarizáveis possuem como vantagem um menor custo computacional, possibilitando estudar sistemas maiores e mais complexos. Por outro lado, à medida que o LI interage com outro solvente, os íons são dissociados e é razoável considerar suas cargas como



# XIX SBOQT

## Simpósio Brasileiro de Química Teórica 2017

12 a 17/Nov, 2017, Águas de Lindóia/SP, Brasil

inteiras, segundo Köddermann *et al.* [6]. No presente trabalho, estudos por simulação de dinâmica molecular (DM) das propriedades físico-químicas, estruturais e dinâmicas do Líquido Iônico [BMIm][Tf<sub>2</sub>N] puro e em sistemas aquosos com diferentes frações de água (5%, 10%, 20%, 50%, 90% e 95%) têm sido realizados. Densidade, coeficientes de difusividade, função de distribuição radial (RDF) e tensão superficial são os parâmetros calculados de modo a avaliar os efeitos produzidos pela mistura de água e LI. Para isso, foram utilizados dois campos de força [6,7] de forma comparativa para assim propormos uma re-parametrização. Um deles, campo de força não-polarizável desenvolvido por Zhong *et al.*, no qual as cargas totais dos íons foram escaladas por um fator de 0,8 de modo a reproduzir a transferência de carga entre íons e as propriedades termodinâmicas do LI puro [BMIm][Tf<sub>2</sub>N] em fase condensada. No outro campo de força, desenvolvido por Köddermann *et al.*, para LIs do tipo [C<sub>n</sub>MIm][Tf<sub>2</sub>N], as cargas foram mantidas inteiras e os parâmetros intermoleculares (interações de Lennard-Jones) ajustados de maneira empírica a fim de se reproduzir dados experimentais, como densidade e coeficientes de difusão, obtidos por espectroscopia de NMR. O campo de força usado para simular a molécula de água foi o do tipo TIP4P [8]. Os resultados obtidos têm sido comparados com os valores experimentais disponíveis na literatura [9,10] de modo a se avaliar tanto a reprodutibilidade dos dados resultantes de cada campo de força no sistema de LI puro e em mistura aquosa, como também esclarecer os fenômenos provenientes da interação da água com o LI a nível molecular.

**Key-words:** Líquido Iônico, Água, Dinâmica Molecular, Campo de Força

**Support:** Os autores gostariam de agradecer ao suporte financeiro dado pela CAPES, CNPQ e FAPERJ e ao PPGQ-UFF.

### References:

- [1] T. L. Greaves, C. J. Drummond, *Chem. Rev.*, 108, 206–237, (2008).
- [2] E. D. Bates, R. D. Mayton, I. Ntai, J. H. Davis Jr., *J. Am. Chem. Soc.*, 124 (6), 926–927, (2002).
- [3] Y. Zhang, E. J. Maginn, *J. Phys. Chem. B*, 116, 10036-10048, (2012).
- [4] C. Schröder, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 14, 3089, (2012).
- [5] F. Dommert, L. Delle Site, C. Holm et al., *ChemPhysChem*, 13, 1625 – 1637, (2012).
- [6] T. Köddermann, D. Paschek, R. Ludwig, *ChemPhysChem*, 14, 3368 – 3374, (2013).
- [7] X. Zhong, Z. Liu, D. Cao, *J. Phys. Chem. B*, 115, 10027–10040, (2011).
- [8] W. Jorgensen, J. Chandrasekhar, J. Madura, R. Impey, M. Klein, *J. Chem. Phys.*, 79, 926, (1983).
- [9] H. Tokuda, K. Hayamizu, K. Ishii, M. A. B. H. Susan, M. Watanabe, *J. Phys. Chem. B*, 109, 6103, (2005).
- [10] A-LP. Rollet, M. Porion, M. Vaultier, et al., *J. Phys. Chem. B*, 111, 11888–11891 (2007).