

Estudo do efeito do CO₂ nas propriedades dinâmicas do líquido iônico 1-C₂mim-3-metil-imidazólio bis(trifluórsulfonil)imida

Tuanan C. Lourenço¹(PG), *Luciano T. Costa²(PQ)

costalt@gmail.com

¹Universidade Federal de Alfenas, Rua Gabriel Monteiro da Silva, 700, 37130-000, Alfenas, MG

²Universidade Federal Fluminense, Campus Valonguinho, Rua Outeiro de São João Batista, s/n, 24020-141, Niterói, RJ

Palavras Chave: Líquidos iônicos, CO₂, captura de gases.

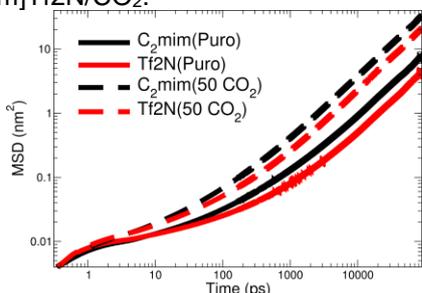
Introdução

Líquidos Iônicos (LIs) têm sido estudados para aplicações em Química Verde, e um destes usos é o sequestro¹ de gases poluentes. O LI 1-etil-3-metilimidazólio bis(trifluormetanosulfonil)imida [C₂mim]Tf₂N têm apresentado relativa afinidade por CO₂. Recentes estudos³ caracterizaram esta solubilidade no ponto de vista estrutural, mostrando que o gás possui a tendência de ocupar espaços vazios entre cátion e ânion, sem causar grandes modificações estruturais. O objetivo deste trabalho é caracterizar o aprisionamento do CO₂ do ponto de vista microscópico, mostrando mudanças nas propriedades do LI, como coeficiente de difusão, condutividade elétrica molar entre outros coeficientes de transporte.

Resultados e Discussão

Foram realizadas simulações computacionais por dinâmica molecular (DM) nos ensembles, *NpT* e *NVT* usando o pacote de simulação Gromacs. Os sistemas simulados possuem as seguintes quantidades de moléculas de CO₂: 0, 20, 50, 83, 173 e 204; e 160 pares de íons do LI. Todas as simulações foram realizadas em 313 K.

Figura 1. Deslocamento quadrático médio MSD para cátion e ânion nos sistemas [C₂mim]Tf₂N e [C₂mim]Tf₂N/CO₂.



Na Figura é mostrado o deslocamento médio quadrático (*MSD*, do inglês *mean square displacement*) para cátion e ânion, tanto para o LI puro e como na mistura com 50 moléculas do gás. Pode-se observar um comportamento conhecido como heterogeneidade dinâmica, no qual podemos encontrar 3 comportamentos distintos, um regime balístico, um regime subdifusivo e por fim o regime difusivo do qual podemos obter o coeficiente de

difusão para as espécies. Este perfil de *MSD* é uma característica típica² de LIs. Ao compararmos as curvas para o LI puro e a mistura, podemos ver que a presença do gás no sistema não altera o comportamento do *MSD*, ele apenas cria uma maior mobilidade do cátion e ânion o que pode ser evidenciado pelo aumento no coeficiente de difusão, como pode ser visto na Tabela 1.

Tabela 1: Coeficiente de difusão para o sistema [C₂mim]Tf₂N/CO₂ na temperatura de 313K.

n(CO ₂)	Ânion	Cátion	CO ₂
0	0,0084	0,0144	----
20	0,0102	0,0199	0,1719
50	0,0140	0,0231	0,1809
83	0,0164	0,0291	0,2587
173	0,0329	0,0569	0,3827

Como mostrado na literatura³ o gás ocupa espaços vazios entre cátion e ânion o que acaba por gerar um pequeno aumento no volume e consequentemente uma maior mobilidade das espécies, tais espaços são resultados da interação entre cátion e ânion, ou seja, consequência da termodinâmica desta interação. Da Tabela 1 pode-se observar que o ânion possui um aumento maior no coeficiente de difusão quando comparamos a mistura 0 e 204. Esta maior modificação pode ser resultado da interação preferencial do gás pelo ânion, como mostramos recentemente.³

Conclusões

A presença do CO₂ gera um aumento na mobilidade de cátion e ânion o que pode ser visto através do aumento do coeficiente de difusão, este aumento é causado pelo alojamento do gás entre as estruturas do LI. Tal comportamento pode ser visto também em outras propriedades como dinâmica translacional e condutividade elétrica molar.

Agradecimentos

A UNIFAL-MG, FAPEMIG, Capes, rede mineira de química e ao PPGQ UNIFAL-MG.

¹ Anderson, J. L.; Dixon, J. L.; Brennecke, J. F. *Accounts of Chemical Research*, **2007**, 40, 1208

² Borodin et al; *J. Phys. Chem. B* **2010**, 114, 6786

³ Lourenço, T. L.; Costa, L. T.; Van der Spoel, D. et al; *Environmental Science & Technology*, **2013**, 47, 7421