

Cálculo de viscosidade por simulação dinâmica molecular de não-equilíbrio para líquidos iônicos.

Luciano T. Costa¹(PQ)*, Mariny Fabiéle Cabral Coelho¹(IC).

* costalt@gmail.com

¹Universidade Federal de Alfenas - Rua Gabriel Monteiro da Silva 700, Centro, Alfenas-MG.

Palavras Chave: *dinâmica molecular, viscosidade, líquidos iônicos.*

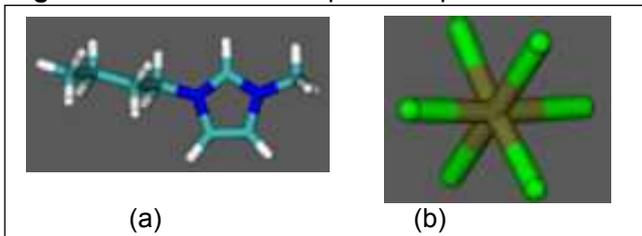
Introdução

Líquidos iônicos exibem a capacidade de dissolver uma variedade de materiais incluindo sais inorgânicos, graxas, proteínas, aminoácidos, surfactantes, açúcares, polissacarídeos e solventes orgânicos. São compostos altamente polares e estáveis termicamente acima de 300° C. Além disso, devido sua baixa pressão de vapor são não voláteis, podendo ser usados em diversos processos industriais de extração frente aos compostos orgânicos convencionais. O estudo de propriedades de transportes pode auxiliar diversos processos em que estes líquidos vem sendo utilizados.

Resultados e Discussão

Simulações por dinâmica molecular de equilíbrio (EMD) e não-equilíbrio (NEMD) tem sido realizadas para o sistema hexafluorofosfato de 1-butil-3-metilimidazólio e serão amplamente discutidos a cerca dos modelos frequentemente usados na literatura, como o modelo de átomos unidos (*united-atom model*), em que átomos de hidrogênio estão implícitos em grupos CH, CH₂ e CH₃, e modelos explícitos, conhecidos como *all-atoms*. (Fig. 1) Para o cálculo da viscosidade temos constatado o que recente trabalho evidência, ou seja, a importância de uma correta descrição do modelo para reproduzir propriedades em concordância com dados experimentais. Da mesma forma, diferentes resultados são obtidos variando-se o método de cálculo da propriedade.

Figura 1. Modelos explícitos para o cátion



1-butil-3-metilimidazólio (a) e ânion hexafluorofosfato (b).

Para o cálculo da viscosidade foi usado um método perturbacional, em que uma aceleração é aplicada ao sistema numa dada direção, tal como descrito por Hess.¹ Pequenas perturbações são realizadas de forma a permitir que o sistema não

escape para longe do equilíbrio. A Fig 2 mostra o resultado para bmimPF₆ à 300 K usando-se o modelo de átomos unidos. Para melhorar a estatística do cálculo, partiu-se de três configurações iniciais não correlacionadas. O valor médio calculado após regressão linear foi de 25,2 mPas, em acordo com dados da literatura.² Cálculos com o modelos *all-atoms* estão sendo realizados, bem como a validação de um potencial que descreva melhor a viscosidade destes sistemas em diferentes temperaturas.

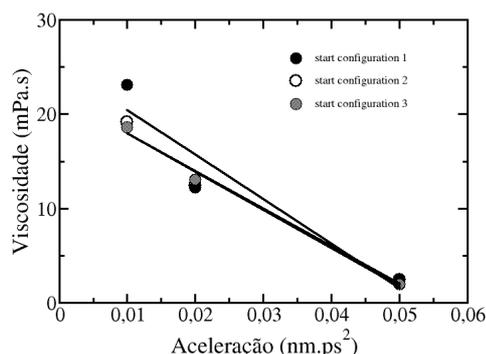


figura 2. Viscosidade calculada por simulação NEMD para o sistema bmimPF₆ à 300 K partindo-se de configurações iniciais não correlacionadas, diferentes.

Conclusões

Os resultados revelam a importância de incluir explicitamente todos os átomos no modelo molecular, para a correta reprodução de dados de viscosidade. A validação do modelo permitirá que futuros cálculos possam realizar um tipo de *screening* para uma classe de líquidos iônicos e desta forma prever propriedades de transportes para uma variedade destes compostos, o que vem sendo realizado.

Agradecimentos

Agradecemos a Fapemig pela bolsa IC da aluna.

¹ Hess, B. J. Chem. Phys. **2002**, 116, 209-217.

² Picálek, J. e Kolafa, J. Molecular Simulation. **2009**, 35, 685-690.