

Interação de SO₂ e CS₂ com Líquidos Iônicos Imidazólicos.

Rômulo A. Ando (PQ)* e Paulo S. Santos (PQ) raando@iq.usp.br

Laboratório de Espectroscopia Molecular – Instituto de Química – USP – Departamento de Química Fundamental – Av. Prof. Lineu Prestes, 748, B4T – CEP 05508-000 – São Paulo – SP.

Palavras Chave: líquidos iônicos, espectroscopia Raman, dióxido de enxofre, dissulfeto de carbono, CO₂.

Introdução

Os líquidos iônicos (LI), que por definição são compostos iônicos com temperatura de fusão abaixo de 100°C, têm despertado enorme interesse devido a sua potencialidade de substituir os solventes orgânicos convencionais nos mais diversos processos. Além de alta estabilidade química e térmica, esses compostos apresentam pressão de vapor praticamente nula, e o mais importante, permitem a sintonia de propriedades através da utilização de diferentes cátions e ânions.¹ Em particular, uma das aplicações mais promissoras é a utilização de LI para a absorção de moléculas nocivas ao meio ambiente, como SO₂, CS₂, CO₂, entre outras.² A maioria dos trabalhos na literatura demonstra a grande capacidade dos LI para este fim, porém poucos discutem os aspectos fundamentais envolvidos na interação entre as espécies. Neste trabalho foi realizada uma comparação entre a interação de uma molécula polar (SO₂) e uma apolar (CS₂), com uma série de líquidos iônicos imidazólicos, utilizando técnicas espectroscópicas e computacionais.

Resultados e Discussão

A Figura 1 mostra alguns dos cátions e ânions investigados, assim como as respectivas siglas numericamente utilizadas para designá-los.

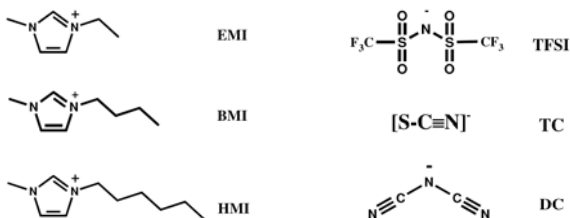


Figura 1. Cátions e ânions formadores de líquidos iônicos.

As Figuras 2 (a) e (b) mostram os espectros Raman dos líquidos iônicos formados pelos cátions EMI, BMI e HMI e o ânion TFSI, saturados com SO₂ e CS₂, respectivamente. Analisando a intensidade da banda de estiramento simétrico do SO₂, $\nu_s(\text{SO}_2)$, em relação às bandas do LI (Figura 2a), pode-se observar que não há dependência da quantidade de SO₂ dissolvida com o tamanho da cadeia do cátion.

Já no caso do CS₂ (Figura 2b), é observado um aumento gradativo da intensidade relativa da banda

$\nu_s(\text{CS}_2)$ com o tamanho da cadeia do cátion, o que é razoável, já que quanto maior a cadeia, maior a quantidade de regiões apolares na estrutura do LI.

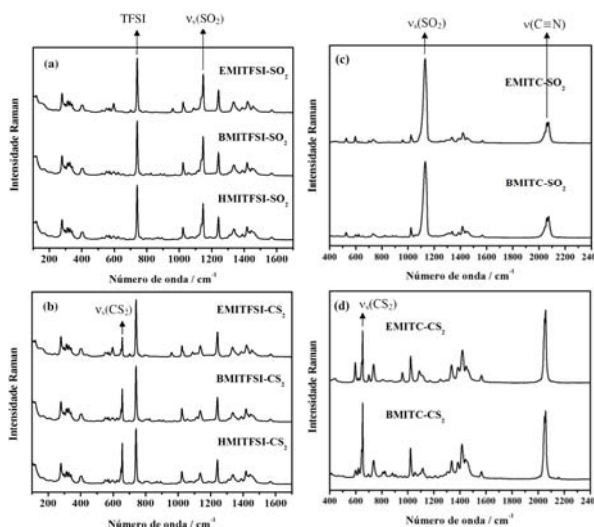


Figura 2. Espectros Raman dos líquidos iônicos saturados com SO₂ e CS₂.

As Figuras 2 (c) e (d) mostram os espectros dos líquidos iônicos EMITC e BMITC saturados com SO₂ e CS₂, respectivamente. Pode-se observar pela intensidade da banda $\nu_s(\text{SO}_2)$ a maior capacidade de absorção de SO₂ dos LI formados pelo ânion TC, devido à interação específica entre o ânion TC e o SO₂.³ No caso do CS₂ também foi observada uma maior capacidade de absorção, e assim como nos LI formados por TFSI, uma dependência da quantidade absorvida com o tamanho da cadeia.

Conclusões

A absorção de SO₂ pelos líquidos iônicos investigados mostrou-se quase que exclusivamente dependente da espécie aniônica, enquanto que a absorção de CS₂, além do ânion, depende também do tamanho da cadeia carbônica.

Agradecimentos

Os autores agradecem à FAPESP e ao CNPq.

¹ Weingartner, H. *Angew. Chem. - Int. Ed.* **2008**, *47*, 654.

² Heldebrandt, D. J.; Yonker, C. R.; Jessop, P. G. e Phan, L. *Chem. - Eur. J.* **2009**, *15*, 7619.

³ Ando, R. A.; Siqueira, L. J. A.; Bazito, F. C.; Torresi, R. M.; Santos, P. S. *J. Phys. Chem B* **2007**, *111*, 8717.