

# Ambiente local e efeito da concentração de CO<sub>2</sub> na estrutura do líquido iônico 1-etil-3-metilimidazólio bis (trifluorsulfonil imida)/ emim[TFSI] .

Tuanan C. Lourenço<sup>1\*</sup> (IC), Wesley W. Santos<sup>1</sup> (IC), Luciano T. Costa<sup>1</sup> (PQ)

lourenco.tuanan@gmail.com

<sup>1</sup>Universidade Federal de Alfenas, rua: Gabriel Monteiro e Silva 700 -Alfenas – MG CEP 37130-000

Palavras Chave: Líquido Iônico, dinâmica molecular, CO<sub>2</sub>.

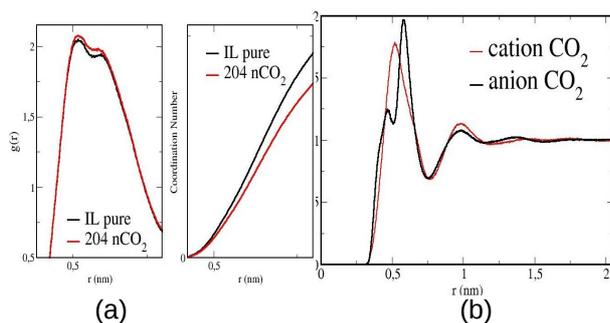
## Introdução

Líquidos Iônicos (LIs) têm sido muito estudados para usos aplicados em Química Verde, e um destes usos é o sequestro de gases poluentes, já que nos últimos anos temos enfrentado grandes problemas ambientais gerados pelas emissões destes gases na atmosfera.

O objetivo deste trabalho é estudar a interação do Líquido Iônico 1-etil-3-metilimidazólio bis(trifluorsulfonil)imida [emim]TFSI com o CO<sub>2</sub> visando o aprisionamento do gás no líquido.

## Resultados e Discussão

Simulações computacionais por Dinâmica Molecular (DM) foram realizadas para o estudo das interações entre [emim]TFSI e CO<sub>2</sub>, foram feitas simulações nos ensembles NpT e NVT dos sistemas nas seguintes composições 200 pares de de LI em 293, 313, 343, 400, 450 e 500 K. Para os sistemas contendo a mistura LI/CO<sub>2</sub> foram feitas simulações em uma temperatura fixa de 313 K com 160 pares de líquido iônico e diversas frações de CO<sub>2</sub>. Foram calculadas propriedades dinâmicas e estruturais para ambos sistemas.

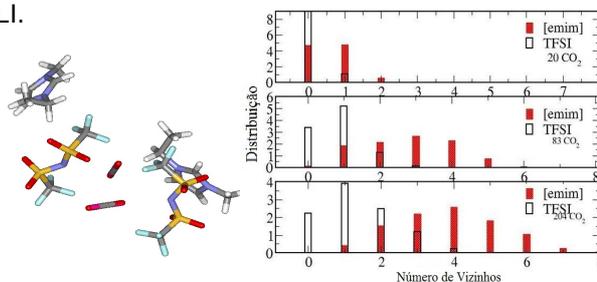


**Figura 1.** Função de distribuição radial de pares  $g(r)$  de centro de massa para cátion e ânion (a) e CO<sub>2</sub> e cátion, CO<sub>2</sub> anion (b)

A figura 1 (b) mostra a distribuição radial de pares  $g(r)$  de centro de massa para cátion e ânion em relação ao CO<sub>2</sub> a 313 K, onde podemos ver que o gás coordena-se primeiramente com o ânion e posteriormente com o cátion a uma distância maior, como podemos ver através da formação dos picos na distribuição radial de pares.

35ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

Pode-se ver na figura 1 (a) a função de distribuição radial de pares de centro de massa para cátion e ânion para o sistema LI puro e para a mistura LI/CO<sub>2</sub> contendo 204 moléculas de CO<sub>2</sub> onde pode-se ver um acréscimo no primeiro pico e uma diminuição no número de coordenação, isso pode ser explicado por uma aproximação das espécies geradas pelas novas interações existentes ali, pois agora há moléculas de CO<sub>2</sub> se coordenando com o LI.



**Figura 2** – Estrutura de coordenação do sistema LI/CO<sub>2</sub> retirada da Dinâmica molecular e histograma com distribuição de CO<sub>2</sub> em relação a cátion e ânion.

A figura 2 mostra a tendência do CO<sub>2</sub> ocupar espaços vazios (cavidades) entre as interações cátion-ânion o que pode explicar a baixa variação no volume do LI quando adicionado o CO<sub>2</sub>, tal comportamento é encontrado em outros LIs<sup>1</sup>, o histograma comprova a maior afinidade do gás por moléculas do ânion porém a altas concentrações encontramos um número significativo de CO<sub>2</sub> se coordenando com moléculas do cátion.

## Conclusões

Os resultados preliminares para estrutura local e densidade foram satisfatórios quando comparados com a literatura<sup>2,3</sup>

Pode-se ver uma forte afinidade do gás pelo LI, na qual o ânion desempenha papel importante.

## Agradecimentos

A FAPEMIG, CNPq e UNIFAL-MG

<sup>1</sup> J. Habasaki, et al; J. Chem. Phys 2008, 129, 194501

<sup>2</sup> Borodin et al; J. Phys. Chem. B 2010, 114, 6786-6798

<sup>3</sup> M. Watanabe et al; J. Phys. Chem. B 2009, 113, 10641