

Estudo Teórico da Interação de Ânions de Líquidos Iônicos com SO₂

Daví A. C. Ferreira* (PG), Sara F. de A. Moraes (PG), Aída D. da F. Melo (PG), Simoni M. P. Meneghetti (PQ), Mario R. Meneghetti (PQ)

*quantum_foton@hotmail.com

Instituto de Química e Biotecnologia, Universidade Federal de Alagoas, Av. Lourival de Melo Mota, Cidade Universitária, Maceió-AL.

Palavras Chave: Líquidos Iônicos, Semiempírico, PM3, Captura de SO₂.

Introdução

Grças as suas propriedades singulares, os líquidos iônicos (LI) têm despertado interesse, da Academia até a indústria, dando destaque principalmente a sua potencial aplicação como solvente alternativo para diversos processos¹. Recentemente pesquisas apontaram a absorção de gases como SO₂, CS₂, CO₂ como aplicação promissora dos LI, entretanto somente alguns pesquisadores apresentam informações que apontam para a real natureza das interações entre LI e tais gases. Neste trabalho realizamos modelagem quântica a fim de comparar as interações estabelecidas entre diferentes ânions de LI com moléculas de SO₂ e CS₂, tomando como base estudos espectroscópicos realizados por Ando e Colaboradores².

Resultados e Discussão

Para a realização deste estudo, usamos o Método Semiempírico com Função de Base PM3 (*Parametric Model 3*) para determinar a geometria no equilíbrio para as espécies aniônicas SCN⁻ (TC), [N(CN)₂]⁻ (DC) e [N(SO₂CF₃)₂]⁻ (TFSI), para espécies neutras SO₂ e complexos aniônicos do tipo TC-SO₂, DC-SO₂ e TFSI-SO₂.

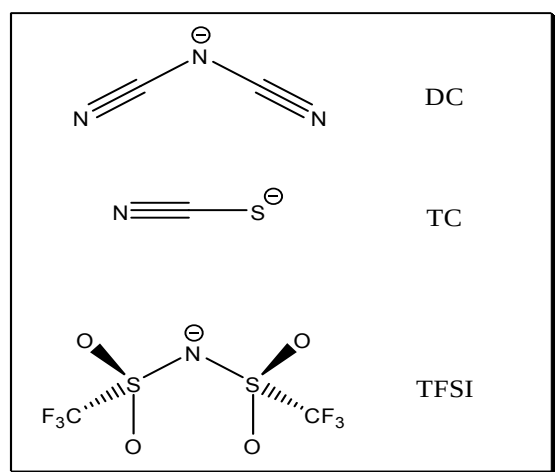


Figura 1 Ânions comumente usados em líquidos iônicos.

Todos os sistemas apresentam multiplicidade de spin simples. Dados experimentais de Ando e colaboradores apontam que dentre os LI estudados, o que apresenta maior capacidade de absorção de SO₂ são os que apresentam ânions do tipo TC,

seguido do TFSI, enquanto que a influência do DC ao menos foi informada. Tomando como base estas informações, determinamos, por métodos quânticos, a natureza da interação entre tais gases e os ânions citados. Observamos que, termodinamicamente, a formação do complexo do tipo TC-SO₂ é favorável ($\Delta H_f = -22.59$ kcal.mol⁻¹), quando comparada com TFSI-SO₂ ($\Delta H_f = -3.17$ kcal.mol⁻¹) e DC-SO₂ ($\Delta H_f =$

Tabela 1. Energias e variações de cargas para os adutos ânion-gás.

Complexo	ΔH_f (kcal/mol)	$ \Delta q $
TC-SO ₂	-22,90	0,429
TFSI-SO ₂	-03,17	0,336
DC-SO ₂	+30,91	0,240

+30.91 kcal.mol⁻¹). Determinamos também a diferença de carga eletrostática no ponto de interação Ânion_{LI}-gás: TC-SO₂ ($|\Delta q| = 0.429$), TFSI-SO₂ ($|\Delta q| = 0.336$) e DC-SO₂ ($|\Delta q| = 0.240$), o que aponta uma relação de estabilidade de complexos e caráter iônico da interação Ânion_{LI}-gás.

Conclusões

Observamos que a absorção dos gases está relacionada o favorecimento termodinâmico do processo de complexação Ânion_{LI}-gás e que quanto maior o caráter iônico da interação Ânion_{LI}-gás, mais estável será o complexo Ânion_{LI}-gás e, com isso, maior a capacidade de captura de moléculas do gás.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq, BNB e FAPEAL pelo suporte financeiro.

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

2 Ando, R. A. et. al.; *J. Phys. Chem B* **2007**, 111, 8717.