

ESTUDO COMPUTACIONAL DE PARES IÔNICOS EM SOLUÇÃO

Universidade Federal do Rio Grande do Sul | Aluno: Jessé Neumann | Orientador: Dr. Hubert Stassen

INTRODUÇÃO

Líquidos iônicos apresentam diversas propriedades peculiares, que são largamente exploradas. Talvez a classe mais estudada de líquidos iônicos seja a daqueles cujo cátion contém anel imidazólico (figura 1). Todavia, ainda existem poucos trabalhos que tratem do comportamento de líquidos iônicos como solutos em solventes comuns. A Dinâmica Molecular, através da metodologia de *umbrella sampling*, oferece uma possibilidade de suprir esta carência, fornecendo informações estruturais e energéticas para este tipo de sistemas.

Caracterizar o comportamento do par iônico 1,2,3-trimetilimidazólio/imidazolato (figura 2) atuando como soluto em diferentes solventes (água, dimetilsulfóxido e clorofórmio).

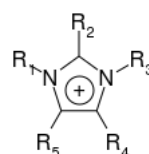


Figura 1 – Anel Imidazólico.

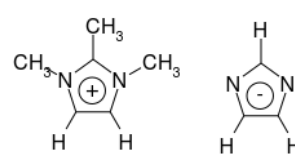


Figura 2 – Par iônico estudado.

METODOLOGIA

O primeiro passo deste trabalho foi a construção dos diferentes sistemas simulados, que consistiram de caixas cúbicas contendo o par iônico (inicialmente em contato e centralizado na caixa) e moléculas do solvente analisado, sob temperatura de 298,15 K e pressão de 1 bar. Depois, fixou-se o centro de massa do ânion no espaço e foram simuladas as trajetórias de afastamento do cátion. Das trajetórias de afastamento, foram definidas as distâncias a serem usadas na geração das configurações iniciais das simulações de *umbrella sampling*. O espaçamento entre as janelas, que tiveram tempo simulado de 10 ns, foi de 0,1 nm. Por fim, foram construídas as curvas dos Potenciais de Força Média (PFM), que fornecem a variação de ΔG em função da distância entre os centros de massa do cátion e do ânion.

As simulações e análises foram realizadas utilizando o pacote de softwares GROMACS.

RESULTADOS

As figuras 3-5 mostram as curvas dos PFMs obtidos, a partir dos quais foram calculadas as energias livres e constantes de associação (tabela 1).

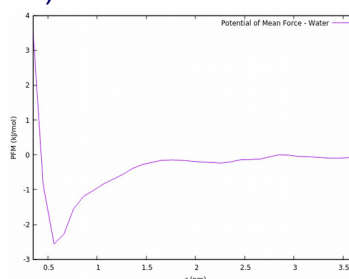


Figura 3 – PFM do sistema em água.

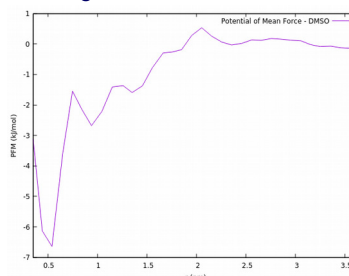


Figura 5 – PFM do sistema em DMSO.

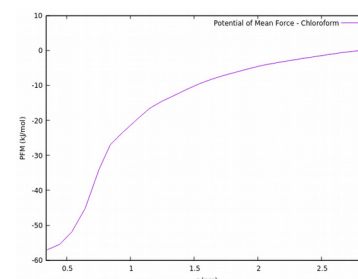


Figura 4 – PFM do sistema em clorofórmio.

Tabela 1 – Valores de energia livre ($\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$) e constantes de associação para os diferentes solventes.

Solvente	Constante	ΔG
Água	1,24	-0,525
Clorofórmio	$3,59 \times 10^8$	-48,8
DMSO	2,17	-1,92

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Apesar da falta de dados experimentais para avaliação da exatidão do método empregado, pode-se dizer que o mesmo oferece a possibilidade de avaliação, ao menos qualitativa, de um importante e pouco explorado aspecto de líquidos iônicos, podendo ser também aplicado no estudo de outras espécies iônicas.