



Solubilidade do Sulfeto de Hidrogênio (H_2S) em líquidos iônicos baseados no cátion 1-butil-3-metilimidazólio $[C_4mim]^+$ por Dinâmica Molecular

Daniel Luiz Stamm Baldisserotto¹, Dr. Hubert Karl Stassen¹

¹ – Instituto de Química – Universidade Federal do Rio Grande do Sul – Porto Alegre, RS - Brasil

INTRODUÇÃO

- Como o CO_2 , o H_2S é considerado um tipo de impureza no gás natural que diminui a capacidade de combustão e corrói tubulações.
- Além disso, esse gás é tóxico e responsável por causar problemas respiratórios em trabalhadores da indústria de produção e refino de derivados de petróleo.[1]
- Desde os anos 80, são utilizadas aminas para remoção de H_2S do gás natural, porém essas são voláteis e contribuem com a poluição atmosférica.
- Líquidos iônicos são uma alternativa às aminas por possuírem alta pressão de vapor e mudanças em suas estruturas promovem interações diferentes com os gases de interesse

OBJETIVO

Simular diferentes líquidos iônicos baseados no cátion 1-butil-3-metilimidazólio através da dinâmica molecular e verificar as interações desses com o gás Sulfeto de Hidrogênio afim de determinar o líquido iônico mais adequado para solubilização desse gás.

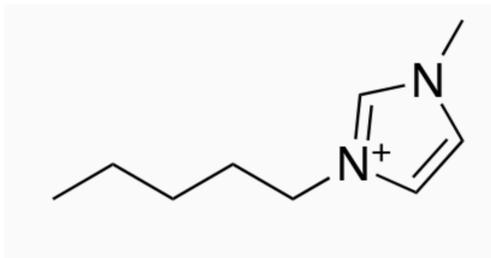


Figura 1. Cátion 1-butil-3-metilimidazólio ($[C_4mim]^+$)

METODOLOGIA

Com o pacote de softwares GROMACS[2], foram realizados três tipos de simulação, a primeira contendo apenas 400 pares iônicos correspondendo ao líquido de interesse em uma caixa cúbica com 12 nm de aresta com pressão e temperatura controladas por um tempo de 80 ns.

Com o líquido iônico equilibrado resultante da primeira simulação, a caixa cúbica é alongada na direção do eixo z a fim de inserir 200 moléculas de H_2S . Essas moléculas de gás são dispostas acima e abaixo de uma camada de líquido iônico já equilibrado na primeira simulação. Este novo sistema é simulado por 120 ns e nos fornece a informação da quantidade de gás solubilizado na camada de líquido iônico.

Na terceira simulação é criada uma caixa cúbica que contém 450 pares iônicos e 150 moléculas de H_2S dispostos de forma aleatória, essas simulações ocorrem até um tempo de 100 ns e servem para ajudar na investigação das interações que ocorrem entre os líquidos iônicos e o sulfeto de hidrogênio.

Os ânions utilizados nesse estudo foram tetrafluoroborato $[BF_4]^-$, acetato $[Acet]^-$, imidazolato $[Imid]^-$ e brometo $[Br]^-$

RESULTADOS

Com base na segunda simulação, torna-se possível integrar a densidade de sulfeto de hidrogênio presente na camada de líquido iônico, sendo possível comparar qual líquido iônico solubiliza mais esse gás.

Após os 120 ns de simulação obtivemos nessa integração: 606,46 $kg \cdot m^{-3} \cdot nm^{-1}$, 488,753 $kg \cdot m^{-3} \cdot nm^{-1}$, 413,405 $kg \cdot m^{-3} \cdot nm^{-1}$, 417,399 $kg \cdot m^{-3} \cdot nm^{-1}$ para os líquidos iônicos contendo os ânions tetrafluoroborato, acetato, imidazolato e brometo, respectivamente.

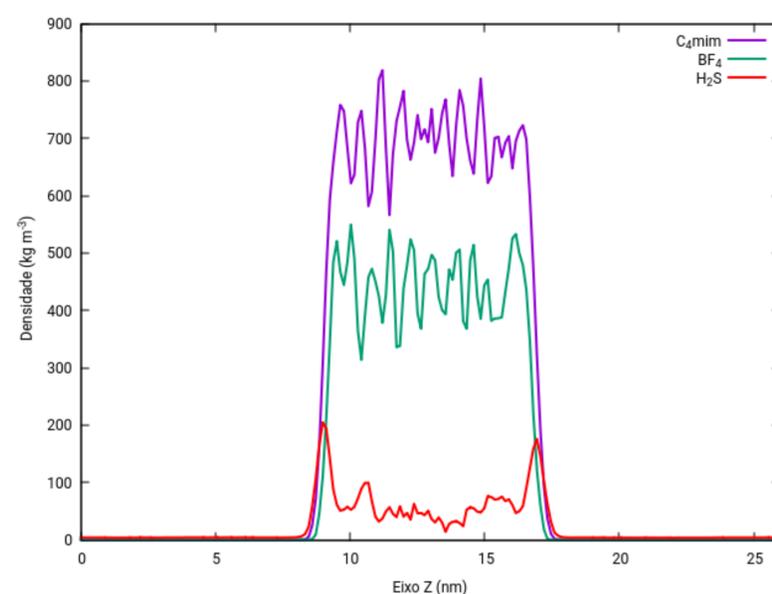


Figura 2. Densidade de H_2S na camada de $[C_4mim][BF_4]$

CONCLUSÃO

Dentre os líquidos iônicos estudados pela metodologia de dinâmica molecular, o mais adequado para solubilização do sulfeto de hidrogênio (H_2S) é o tetrafluoroborato de 1-butil-3-metilimidazólio ($[C_4mim][BF_4]$)

REFERÊNCIAS

1. Plechkova, N. V., Seddon, K. R. (2008) *Chem. Soc. Rev.*,37, 123-150
2. Berendsen, et al. (1995) *Comp. Phys. Comm.* 91: 43-56