



**Universidade:  
presente!**

**UFRGS**  
PROPEAQ



**XXXI SIC**

21. 25. OUTUBRO • CAMPUS DO VALE

<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2019: SIC - XXXI SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2019
<b>Local</b>	Campus do Vale - UFRGS
<b>Título</b>	Solubilidade do Sulfeto de Hidrogênio (H <sub>2</sub> S) em líquidos iônicos baseados no cátion 1-butil-3-metilimidazólio [C <sub>4</sub> mim] <sup>+</sup> por Dinâmica Molecular
<b>Autor</b>	DANIEL LUIZ STAMM BALDISSEROTTO
<b>Orientador</b>	HUBERT KARL STASSEN

## **Solubilidade do Sulfeto de Hidrogênio (H<sub>2</sub>S) em líquidos iônicos baseados no cátion 1-butil-3-metilimidazólio [C<sub>4</sub>mim]<sup>+</sup> por Dinâmica Molecular**

Nome do autor: Daniel Luiz Stamm Baldisserotto

Nome do orientador: Dr. Hubert Karl Stassen

Universidade Federal do Rio Grande do Sul – Departamento de Físico-Química

O gás natural é uma fonte de energia derivada de combustíveis fósseis muito utilizada para geração de eletricidade, fabricação de gás de cozinha e combustível veicular. Esse gás é principalmente composto de metano e outros alcanos, porém, na mistura, também pode ser encontrado óxidos de nitrogênio (NO<sub>x</sub>), dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) e sulfeto de hidrogênio (H<sub>2</sub>S). O sulfeto de hidrogênio é um gás altamente corrosivo e tóxico, além de ser muito danoso à saúde humana.

No estudo em questão foram realizadas simulações de dinâmica molecular a fim de encontrar líquidos iônicos que possuam a capacidade de solubilizar o sulfeto de hidrogênio (H<sub>2</sub>S) de forma eficiente. O método convencional da retirada do H<sub>2</sub>S em processos petroquímicos é o uso de aminas, essas são compostos voláteis que contribuem com a poluição do ar. Líquidos iônicos são uma alternativa por terem uma baixa pressão de vapor, baixo ponto de fusão e muitas vezes são líquidos em temperatura ambiente.

O pacote de softwares GROMACS foi utilizado para a investigação da interação do gás H<sub>2</sub>S com os líquidos iônicos nos quais o cátion escolhido foi 1-butil-3-metilimidazólio [C<sub>4</sub>mim]<sup>+</sup> e os ânions foram: tetrafluoroborato [BF<sub>4</sub>]<sup>-</sup>, acetato [Acet]<sup>-</sup> e imidazolato [Imid]<sup>-</sup> e brometo [Br]<sup>-</sup>.

Foi observada a tendência dos líquidos contendo acetato e tetrafluoroborato de serem mais indicados para a solubilização do gás. Na literatura é reconhecido que líquidos iônicos contendo em seu ânion halogênios tendem a ser melhores no processo de captura de H<sub>2</sub>S. As simulações envolvendo o ânion brometo estão sendo realizadas e ainda não apresentaram resultados.