



|                   |  |
|-------------------|--|
| <b>Evento</b>     | Salão UFRGS 2022: SIC - XXXIV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS |
| <b>Ano</b>        | 2022   |
| <b>Local</b>      | Campus Centro - UFRGS  |
| <b>Título</b>     | Comportamento associativo de Líquidos iônicos em água                |
| <b>Autor</b>      | LEANDRO SEGAT PERINI   |
| <b>Orientador</b> | HUBERT KARL STASSEN  |

## **Comportamento associativo de Líquidos iônicos em água.**

Líquidos iônicos são compostos iônicos líquidos à temperatura ambiente que apresentam baixas pressões de vapor e boa estabilidade térmica, tais características, se comparadas com as de solventes orgânicos convencionais, tornam os líquidos iônicos uma classe de solventes mais amigáveis ao meio ambiente com menor potencial de contaminação. Outra característica relevante de tais compostos é a possibilidade de alteração de suas propriedades através de alterações em sua estrutura molecular como, por exemplo, ponto de fusão e viscosidade. O objetivo deste trabalho é avaliar o comportamento em água de líquidos iônicos com a estrutura baseada no anel imidazólico com diferentes tamanhos de cadeias substituintes e apresentando cloro como ânion. O trabalho é realizado através de simulações computacionais pelo método de dinâmica molecular utilizando o software GROMACS, onde observamos e avaliamos as interações entre cátion, ânion e solvente com o decorrer do tempo. Sistemas são montados contendo diferentes quantidades de pares iônicos solvatados em água, e passam por um processo inicial de minimização energética em vácuo com o ensemble NVT para obtenção de um sistema inicial com pares iônicos associados e tamanho adequado. Posteriormente o sistema é adicionado de água e simulado no ensemble NTP, tendo duração de 10 nanosegundos ou mais com temperatura e pressão constantes de 298,15 K e 1 bar. Sistemas contendo 2 pares iônicos demonstram tendência associativa para cátions do tipo HMI enquanto sistemas idênticos contendo BMI não demonstram tendência associativa entre cátions durante nenhum momento das simulações. Análises mais profundas sobre estrutura dos sistemas estão em andamento para que haja maior entendimento sobre o comportamento de tais sistemas e sistemas mais complexos.

Autor: Leandro Segat Perini

Orientador: Hubert Karl Stassen