



O MÉTODO DA EQUALIZAÇÃO DA ELETRONEGATIVIDADE NA DERIVAÇÃO DE CARGAS: APLICAÇÕES EM DINÂMICA E TERMODINÂMICA DE LÍQUIDOS IÔNICOS.

V Congresso Online Nacional de Química, 1ª edição, de 19/06/2023 a 22/06/2023

ISBN dos Anais: 978-65-5465-023-6

DOI: 10.54265/CPCZ2671

BRUM; Jonathan de Brito¹, COSTA; Cauê Torres de Oliveira Guedes², COSTA; Luciano Tavares da³

RESUMO

Os sais fundidos a temperatura ambiente (líquidos iônicos) são amplamente estudados na literatura por possuírem propriedades físico-químicas únicas, tais como baixa pressão de vapor e baixa volatilidade, sendo aplicados como solventes em síntese, em catálise e dispositivos eletroquímicos. Ao longo de décadas, modelos não polarizáveis e polarizáveis tem sido explorados no estudo das propriedades físico-químicas de líquidos iônicos puros e/ou suas misturas. Como são espécies formadas em grande parte por cátions orgânicos e ânions inorgânicos ou orgânicos, possibilitam uma combinação superior a 10^8 espécies, das quais se estima apenas menos de 10^3 até então investigadas. Neste trabalho, deseja-se explorar a utilização do Método da Equalização da Eletronegatividade (EEM - Electronegativity Equalization Method) aplicado a Teoria do Funcional da Densidade (DFT - Density Functional Theory), além do desenvolvimento de um programa de automatização dos cálculos que possibilite a combinação de uma gama de cátions e ânions. O EEM aplica uma equação de energia em função das eletronegatividades do átomo neutro e de sua dureza no estado fundamental. Uma base de dados de cátions e ânions de líquidos iônicos foi usada como entrada para o programa desenvolvido em Python, com um total de 61 cátions e 45 ânions. Os sistemas foram otimizados em sua forma isolada em fase gás pelo método xTB. Otimizações das geometrias no nível de teoria B3LYP/aug-cc-pVTZ serão realizadas no programa Psi4. Cálculos de single point e otimização serão realizados para as combinações de todos os cátions e ânions, para posterior análise das cargas aplicando-se o método EEM. Como perspectiva futura tais sistemas serão analisados em comparação com bancos de dados presentes na literatura, como também serão utilizados modelos estatísticos de modo a comparar as propriedades termodinâmicas como também a distribuição de cargas entre os íons isolados. Assim pretende-se neste trabalho, através de uma apresentação

¹ Universidade Federal Fluminense, jonathanbrito@id.uff.br

² Universidade Federal Fluminense, cauecosta@id.uff.br

³ Universidade Federal Fluminense, ltcosta@id.uff.br

oral, realizar um panorama sobre o conceito de eletronegatividade, apresentar as propriedades de líquidos iônicos e demonstrar como o método EEM, pode ser útil para a derivação de cargas para líquidos iônicos, com aplicações em simulações de Dinâmica Molecular e modelos termodinâmicos.

PALAVRAS-CHAVE: DFT, EEM, Eletronegatividade, Líquidos Iônicos, Físico-Química

¹ Universidade Federal Fluminense, jonathanbrito@id.uff.br

² Universidade Federal Fluminense, cauecosta@id.uff.br

³ Universidade Federal Fluminense, Itcosta@id.uff.br