

238

LIQUIDOS IONICOS DO TIPO DIALQUILIMIDAZOLIO. *Alexandre Bazzo, Jones de Andrade, Hubert Karl Stassen (orient.)* (UFRGS).

O final do século passado caracterizou-se por um grande aumento na preocupação ambiental mundial. Produtos químicos danosos ao meio ambiente tornaram-se um problema de extrema importância e o desenvolvimento de novas técnicas que possam solucionar esse problema se fazem necessárias. O objetivo do estudo foi determinar a resposta de líquidos iônicos (RTMS) frente a diferentes situações físico-químicas aplicando a metodologia da DM (dinâmica molecular). Neste estudo foi utilizado o cátion 1-etil-3-metilimidazolio junto ao anion trifluoracetato, este cátion não possui simetria, sendo assim se comporta como um líquido na temperatura ambiente. Parâmetros como comprimento de ligação, ângulo e ângulos diedros foram calculados via Gauss View e o campo de força aplicado sobre os RTMS já havia sido parametrizado anteriormente. A densidade utilizada foi de 1.285g/cm^3 com variações. O uso desta família de líquidos se mostrou eficiente por não ser agressivo ao meio ambiente e pela sua eficiência na catalise e determinação de enzimas em laboratórios. (PIBIC).