

TRANSIÇÕES DE FASE, ESTRUTURA E REOLOGIA DO LÍQUIDO IÔNICO ACETATO DE COLINA.

Ícaro Francescato Tavares de Souza^{1*}, Edvaldo Sabadini², Mauro Carlos Costa Ribeiro¹

1. Instituto de Química, Universidade de São Paulo, São Paulo 05508-000, Brasil

2. Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, São Paulo 13083-861. Brasil

*icaro.francescato.souza@usp.br

Palavras chave: Acetato de Colina. Espectroscopia Raman, Reologia

Introdução

Espectroscopia vibracional, em especial a espectroscopia Raman, oferece informações diretas das conformações da colina a partir das bandas de estiramento C–N. Tais conformações também marcam diferenças no comportamento reológico atribuído à viscoelasticidade do material, ou seja, é possível relacionar mudanças estruturais locais com mudanças estruturais em escala estendida.

Resultados e Discussão

O acetato de colina ([Cho][Ac]) funde em 335 K. Apesar de sua aparência ainda cristalina a 330 K, o espectro Raman em baixas frequências nesta temperatura já mostra uma tendência de mudança na conformação local se comparado com o espectro a 298 K. Quando em fase sólida e em temperatura ambiente, a colina se apresenta na conformação gauche (715 cm⁻¹), ao passo que quando a amostra é aquecida a banda da conformação anti (770 cm⁻¹) se evidencia após a fusão, concomitante a permanência da gauche.

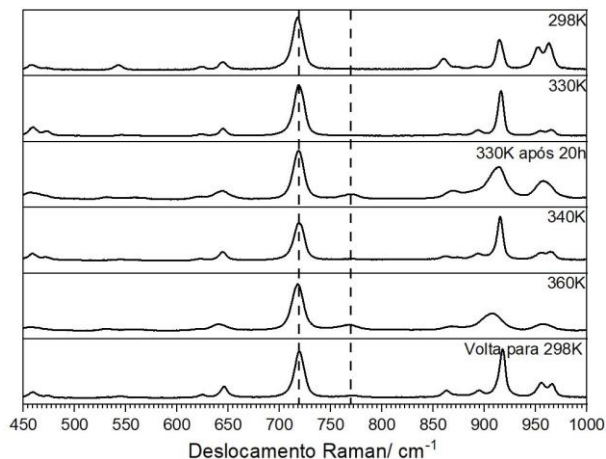


Figura 1. Espectros Raman do [Cho][Ac] em diferentes temperatura

Também se observa o mesmo padrão na variação do módulo elástico em função da frequência de oscilação. Quando em 320K o líquido iônico apresenta o maior valor de G' e de η^* , o que concorda com a evidência de uma mudança estrutural que leva a transição de fase.

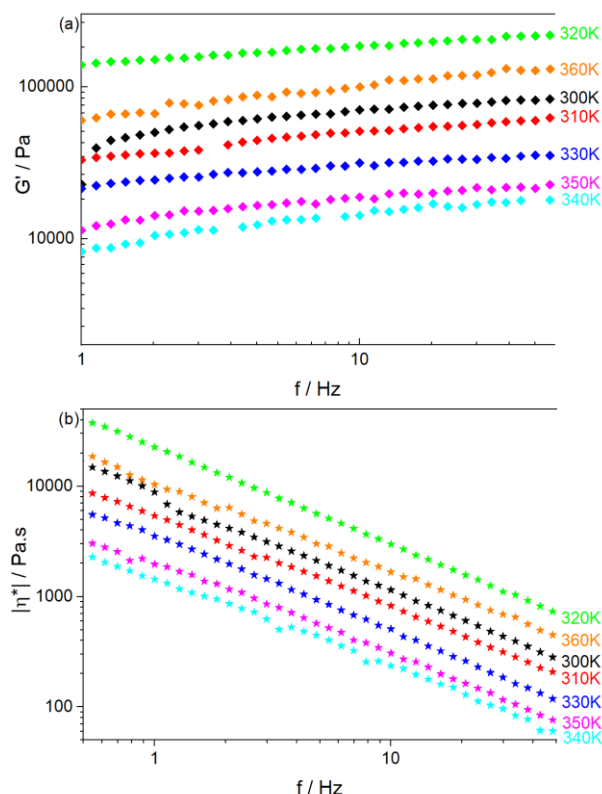


Figura 2. Dependência do módulo elástico, G' (a) e da viscosidade complexa, η^* (b) com a frequência de cisalhamento para diferentes temperaturas.

O alto valor de G' a 320K indica que a estrutura do [Cho][Ac] é mais “solid-like” nessa temperatura, com o aquecimento a estrutura do material o torna capaz de dissipar mais energia. A fusão do líquido iônico é lenta e ocorre apenas quando a estrutura das ligações de hidrogênio se estende dado a presença da conformação anti na fase líquida.

Conclusões

Mudanças conformacionais causam mudanças estruturais refletidas no módulo elástico e na viscosidade complexa do líquido iônico, devido a orientação das ligações de hidrogênio cátion-ânion que se tornam mais estendidas.

Agradecimentos

Ao CNPq e a FAPESP pelas bolsas e financiamento no Laboratório de Espectroscopia Molecular do IQ-USP.