



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ**  
**CENTRO DE TECNOLOGIA**  
**DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA**  
**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**

**LUCAS HENRIQUE GOMES DE MEDEIROS**

**DETERMINAÇÃO DE PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DE LÍQUIDOS  
IÔNICOS EM CONDIÇÕES DE ALTA PRESSÃO E ALTA TEMPERATURA**

**FORTALEZA**

**2022**

LUCAS HENRIQUE GOMES DE MEDEIROS

DETERMINAÇÃO DE PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DE LÍQUIDOS IÔNICOS  
EM CONDIÇÕES DE ALTA PRESSÃO E ALTA TEMPERATURA

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do título de mestre em Engenharia Química. Área de concentração: Processos Químicos e Bioquímicos.

Orientador: Prof. Dr. Hosiberto Batista de Sant'Ana.

Coorientador: Prof. Dr. Filipe Xavier Feitosa.

FORTALEZA

2022

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação  
Universidade Federal do Ceará  
Biblioteca Universitária

Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

---

- D32d de Medeiros, Lucas Henrique Gomes.  
DETERMINAÇÃO DE PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DE LÍQUIDOS IÔNICO-COS EM  
CONDIÇÕES DE ALTA PRESSÃO E ALTA TEMPERATURA / Lucas Henrique Gomes de Medeiros. –  
2022.  
158 f. : il. color.
- Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Tecnologia, Programa de Pós-  
Graduação em Engenharia Química, Fortaleza, 2022.  
Orientação: Prof. Dr. Hosiberto Batista de Sant'Ana.  
Coorientação: Prof. Dr. Filipe Xavier Feitosa.
1. Líquidos iônicos. 2. Densidade. 3. Modelagem termodinâmica. 4. Forças intermoleculares. I. Título.  
CDD 660
-

LUCAS HENRIQUE GOMES DE MEDEIROS

DETERMINAÇÃO DE PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DE LÍQUIDOS IÔNICOS  
EM CONDIÇÕES DE ALTA PRESSÃO E ALTA TEMPERATURA

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do título de mestre em Engenharia Química. Área de concentração: Processos Químicos e Bioquímicos.

Aprovada em: \_\_\_/\_\_\_/\_\_\_.

BANCA EXAMINADORA

---

Prof. Dr. Hosiberto Batista de Sant'Ana (Orientador)  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

---

Prof. Dra. Silvana Mattedi e Silva  
Universidade Federal da Bahia (UFBA)

---

Prof. Dr. Nathan Sombra Evangelista  
Universidade Federal de Lavras (UFLA)

A todos que estiveram presente durante essa jornada.

## **AGRADECIMENTOS**

Aos meus pais, Leonilda Gomes Costa de Medeiros e Antônio Francisco de Medeiros, por todo o apoio e motivação durante todos os momentos.

Aos meus amigos do grupo de pesquisa GPTA, por todas as experiências, auxílios e conhecimentos compartilhados.

Aos Professores Dr. Hosiberto Batista de Sant'Ana e Dr. Filipe Xavier Feitosa por toda orientação, suporte e discussões.

À Instituição FUNCAP, pelo apoio financeiro com a manutenção da bolsa de auxílio. Como também à CAPES pelo apoio às informações científicas por meio do portal de periódicos.

*“O desejo por conhecimento molda o homem”*

(Patrick Rothfuss)

## RESUMO

Líquidos iônicos (LIs) têm ganhado grande atenção nas últimas décadas por conta do seu baixo impacto ambiental quando comparado aos solventes convencionais que são utilizados em processos químicos. Neste trabalho, a determinação de propriedades volumétricas (densidade) em alta pressão e alta temperatura (HPHT) para os seguintes líquidos iônicos trietilsulfônio bis(trifluorometilsulfonil) imida  $[(C_2)_3S][NTf_2]$ , 2,3-dimetil-1-propilimidazólio bis(trifluorometilsulfonil) imida  $[C_3C_1C_1Im][NTf_2]$ , 1-metil-1-propilpirrolidínio bis(trifluorometilsulfonil) imida  $[C_3C_1Pyr][NTf_2]$ , 3-butil-1,2-dimetilimidazólio bis(trifluorometilsulfonil) imida  $[C_4C_1C_1Im][NTf_2]$ , 1-butil-3-metilimidazólio iodeto  $[C_4C_1Im][I]$ , 3-hexil-1-metilimidazólio iodeto  $[C_6C_1Im][I]$ , 3-metil-1-propilimidazólio iodeto  $[C_3C_1Im][I]$ , 1-metil-3-octilimidazólio trifluorometanossulfonato  $[C_8C_1Im][OTF]$ , 1-butil-1-metilpirrolidínio dicianamida  $[C_4C_1Pyr][DCA]$  e 1-etil-3-metilimidazólio acetato  $[C_2C_1Im][C_1COO]$  foi efetuada em ampla faixa de  $P$  e  $T$  utilizando um densímetro de tubo vibrante. Observou-se que a densidade aumenta na seguinte ordem:  $[C_4C_1Pyr][DCA] < [C_2C_1Im][C_1COO] < [C_8C_1Im][OTF] < [C_6C_1Im][I] < [C_4C_1C_1Im][NTf_2] < [C_3C_1Pyr][NTf_2] < [C_3C_1C_1Im][NTf_2] < [(C_2)_3S][NTf_2] < [C_4C_1Im][I] < [C_3C_1Im][I]$ , em concordância com suas interações intermoleculares e eficiência de empacotamento estrutural. Utilizando a equação de Tammann-Tait, os dados experimentais de densidade foram correlacionados com um desvio médio relativo absoluto ( $\%DMRA$ ) menor que 0,025 % para todos os líquidos iônicos estudados. A partir desses dados, as seguintes propriedades derivativas foram calculadas: compressibilidade isotérmica ( $\kappa_T$ ), expansividade isobárica ( $\alpha_p$ ), coeficiente de pressão térmico ( $\gamma_p$ ) e pressão interna ( $P_i$ ). Além disso, comparando o desvio médio relativo absoluto entre a densidade experimental e a estimada pelos modelos de contribuição de grupos (CG) avaliados neste trabalho, observou-se que o modelo proposto por Paduszynski e Domanska apresentou os melhores resultados, com  $\%DMRA$  médio de 0,87 %.

**Palavras-chave:** líquidos iônicos; densidade; modelagem termodinâmica; forças intermoleculares.



## ABSTRACT

Ionic liquids (ILs) have gained special attention in the last decades because of their low environmental impact when compared to organic solvents used in chemical processes. In this work, high pressure and high temperature (HPHT) volumetric properties (density) determination for the following ionic liquids triethylsulfonium bis(trifluoromethylsulfonyl) imide  $[(C_2)_3S][NTf_2]$ , 2,3-dimethyl-1-propylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl) imide  $[C_3C_1C_1Im][NTf_2]$ , 1-methyl-1-propylpyrrolidinium bis(trifluoromethylsulfonyl) imide  $[C_3C_1Pyr][NTf_2]$ , 3-butyl-1,2-dimethylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl) imide  $[C_4C_1C_1Im][NTf_2]$ , 1-butyl-3-methylimidazolium iodide  $[C_4C_1Im][I]$ , 3-hexyl-1-methylimidazolium iodide  $[C_6C_1Im][I]$ , 3-methyl-1-propylimidazolium iodide  $[C_3C_1Im][I]$ , 1-methyl-3-octylimidazolium trifluoromethanesulfonate  $[C_8C_1Im][OTF]$ , 1-butyl-1-methylpyrrolidinium dicyanamide  $[C_4C_1Pyr][DCA]$ , and 1-ethyl-3-methylimidazolium acetate  $[C_2C_1Im][C_1COO]$  were determined in a wide  $P$  and  $T$  range by using a vibrating tube densimeter. It was observed density increase in the following order:  $[C_4C_1Pyr][DCA] < [C_2C_1Im][C_1COO] < [C_8C_1Im][OTF] < [C_6C_1Im][I] < [C_4C_1C_1Im][NTf_2] < [C_3C_1Pyr][NTf_2] < [C_3C_1C_1Im][NTf_2] < [(C_2)_3S][NTf_2] < [C_4C_1Im][I] < [C_3C_1Im][I]$ , according with their intermolecular interactions and structural packing efficiency. By using a Tammann-Tait equation, these experimental density data were correlated with an average absolute relative deviation (%AARD) less than 0.025 % for all ionic liquids studied. From this data, the following derivative properties were calculated: isothermal compressibility ( $\kappa_T$ ), isobaric expansivity ( $\alpha_p$ ), thermal pressure coefficient ( $\gamma_v$ ), and internal pressure ( $P_i$ ). Furthermore, when comparing the average absolute relative deviation between experimental density and estimated by the group contribution models, it was observed that Paduszynski and Domanska model presented the best results, with average %AARD of 0.87%.

**Keywords:** ionic liquids; density; thermodynamic modeling; intermolecular forces.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Estruturas dos cátions utilizados na síntese de LIs .....	33
Figura 2 – Aplicações dos líquidos iônicos .....	34
Figura 3 – Líquido iônico de tarefa específica .....	35
Figura 4 – Esquema de síntese de LI prático.....	36
Figura 5 – Exemplo de líquido iônico aprótico .....	36
Figura 6 – Exemplo de líquido polliônico.....	37
Figura 7 – Exemplo de um bio-LI genérico .....	38
Figura 8 – Líquidos iônicos com diferentes tamanhos de cátions.....	38
Figura 9 – Variação do número de carbonos ligados ao cátion.....	39
Figura 10 – Exemplo de divisão estrutural.....	41
Figura 11 – Divisão estrutural proposta por Gardas e Coutinho (2008) .....	41
Figura 12 – Divisão estrutural proposta por Jacquemin et al. (2008b, 2008a).....	42
Figura 13 – Divisão estrutural proposta por Qiao et al. (2010).....	42
Figura 14 – Divisão estrutural proposta por Lazzús (2010).....	43
Figura 15 – Divisão estrutural proposta por Paduszyński e Domańska (2012).....	43
Figura 16 – Estruturação pelo modelo proposto por Taherifard e Raeissi (2016) .....	43
Figura 17 – Publicações nos últimos cinco anos .....	44
Figura 18 – Publicações reportadas no ILThermo.....	45
Figura 19 – Publicações sobre densidade em alta pressão .....	45
Figura 20 – Esquematização do aparato experimental .....	48
Figura 21 – Comportamento da densidade com a pressão .....	58
Figura 22 – Densidade experimental para os líquidos iônicos com semelhança entre cátion e ânion.....	59
Figura 23 – Densidade experimental para os LIs sem relação estrutural direta.....	60
Figura 24 – Comparação da densidade com dados reportados na literatura .....	61
Figura 25 – Comparativo da densidade na menor pressão avaliada com os dados reportados na literatura .....	61
Figura 26 – Comparação dos dados experimentais com a literatura .....	62
Figura 27 – Comportamento da compressibilidade isotérmica com a pressão.....	66
Figura 28 – Compressibilidade isotérmica para os LIs com ânion [I] .....	67
Figura 29 – Densidade experimental para os LIs sem relação estrutural direta.....	68
Figura 30 – Comportamento da expansividade isobárica com a pressão.....	70

Figura 31 – Expansividade isobárica para os LIs com ânion [I] .....	71
Figura 32 – Densidade experimental para os LIs sem relação estrutural direta .....	72
Figura 33 – Comportamento da pressão interna para os LIs com ânion [NTf <sub>2</sub> ].....	74
Figura 34 – Comportamento da pressão interna para os LIs com ânion [I] .....	75
Figura 35 – Comportamento da pressão interna para LIs sem similaridade estrutural .....	76
Figura 36 – Comportamento da densidade com o desvio relativo .....	80
Figura 37 – Densidade experimental e desvio relativo para os LI com ânion [I].....	81
Figura 38 – Densidade experimental em função do desvio relativo .....	82

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Método de determinação experimental da densidade .....	40
Tabela 2 – Detalhamento dos materiais utilizados .....	49
Tabela 3 – Estrutura dos líquidos iônicos.....	50
Tabela 4 – Coeficientes utilizados para determinação da densidade de referência ([NTf <sub>2</sub> ]) .	63
Tabela 5 – Coeficientes utilizados para determinação da densidade de referência ([I]) .....	63
Tabela 6 – Coeficientes utilizados para a densidade de referência (sem similaridade) .....	63
Tabela 7 – Coeficientes ajustáveis utilizados na Equação (3), parâmetro independente da temperatura utilizado na Equação (1), e desvio padrão e desvio médio relativo absoluto ([NTf <sub>2</sub> ]) .....	64
Tabela 8 – Coeficientes ajustáveis utilizados na Equação (3), parâmetro independente da temperatura utilizado na Equação (1), e desvio padrão e desvio médio relativo absoluto ([I]).....	64
Tabela 9 – Coeficientes ajustáveis utilizados na Equação (3), parâmetro independente da temperatura utilizado na Equação (1), e desvio padrão e desvio médio relativo absoluto (sem similaridade) .....	64
Tabela 10 – Desvio médio relativo absoluto para cada modelo avaliando o ânion [NTf <sub>2</sub> ].....	77
Tabela 11 – Desvio médio relativo absoluto para cada modelo avaliando o ânion [I].....	78
Tabela 12 – Desvio médio relativo absoluto para cada modelo avaliando LIs sem similaridade .....	78

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

<b>HPHT</b>	High Pressure and High Temperature
<b>DMRA</b>	Desvio Médio Relativo Absoluto
<b>LIs</b>	Líquidos Iônicos
<b>CAS</b>	Chemical Abstracts Service
<b>IoLiTec</b>	Ionic Liquid Technologies
<b>NIST</b>	National Institute of Standards and Technology
<b>[(C<sub>2</sub>)<sub>3</sub>S][NTf<sub>2</sub>]</b>	Trietilsulfônio bis(trifluorometilsulfonil) imida
<b>[C<sub>3</sub>C<sub>1</sub>C<sub>1</sub>Im][NTf<sub>2</sub>]</b>	2,3-dimetil-1-propilimidazólio bis(trifluorometilsulfonil) imida
<b>[C<sub>3</sub>C<sub>1</sub>Pyr][NTf<sub>2</sub>]</b>	1-Metil-1-propilpirrolidínio bis(trifluorometilsulfonil) imida
<b>[C<sub>4</sub>C<sub>1</sub>C<sub>1</sub>Im][NTf<sub>2</sub>]</b>	3-butil-1,2-dimetilimidazólio bis(trifluorometilsulfonil) imida
<b>[C<sub>8</sub>C<sub>1</sub>Im][OTF]</b>	1-metil-3-octilimidazólio trifluorometanossulfonato
<b>[C<sub>4</sub>C<sub>1</sub>Pyr][DCA]</b>	1-butil-1-metilpirrolidínio dicianamida
<b>[C<sub>2</sub>C<sub>1</sub>Im][C<sub>1</sub>COO]</b>	1-etil-3-metilimidazólio acetato
<b>[C<sub>4</sub>C<sub>1</sub>Im][I]</b>	1-butil-3-metilimidazólio iodeto
<b>[C<sub>6</sub>C<sub>1</sub>Im][I]</b>	3-hexil-1-metilimidazólio iodeto
<b>[C<sub>3</sub>C<sub>1</sub>Im][I]</b>	3-metil-1-propilimidazólio iodeto

## LISTA DE SÍMBOLOS

®	Marca registrada
%	Porcentagem
$\rho$	Densidade da amostra ( $\text{kg/m}^3$ )
$\rho_{ref}$	Densidade de referência ( $\text{kg/m}^3$ )
$T$	Temperatura (K)
$P$	Pressão (MPa)
$P_{atm}$	Pressão de referência (MPa)
$P_i$	Pressão interna, (MPa)
$\kappa_T$	Compressibilidade Térmica ( $\text{GPa}^{-1}$ )
$\alpha_p$	Expansividade Térmica ( $\text{K}^{-1}$ )
$\gamma_v$	Coefficiente de pressão térmico ( $\text{GPa/K}$ )
$\rho_{exp}$	Densidade experimental ( $\text{kg/m}^3$ )
$\rho_{calc}$	Densidade calculada ( $\text{kg/m}^3$ )
$\sigma$	Desvio padrão ( $\text{kg/m}^3$ )

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b> .....	29
<b>1.1</b>	<b>Objetivo geral</b> .....	32
<i>1.1.1</i>	<i>Objetivos específicos</i> .....	32
<b>2</b>	<b>REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</b> .....	33
<b>2.1</b>	<b>Classificações dos líquidos iônicos</b> .....	34
<i>2.1.1</i>	<i>Líquidos iônicos de tarefa</i> .....	35
<i>2.1.2</i>	<i>Líquidos iônicos próticos</i> .....	35
<i>2.1.3</i>	<i>Líquidos iônicos apróticos</i> .....	36
<i>2.1.4</i>	<i>Líquidos poli-iônicos</i> .....	36
<i>2.1.5</i>	<i>Líquidos bio-iônicos</i> .....	37
<b>2.2</b>	<b>Densidade</b> .....	38
<i>2.2.1</i>	<i>Densidade dos líquidos iônicos</i> .....	38
<i>2.2.1.1</i>	<i>Determinação experimental da densidade</i> .....	40
<i>2.2.1.2</i>	<i>Modelos de contribuição de grupos</i> .....	41
<i>2.2.2</i>	<i>Literatura reportada para os líquidos iônicos estudados</i> .....	44
<b>3</b>	<b>MATERIAIS E MÉTODOS</b> .....	47
<b>3.1</b>	<b>Líquidos iônicos</b> .....	47
<b>3.2</b>	<b>Determinação experimental da densidade</b> .....	47
<i>3.2.1</i>	<i>Descrição operacional e calibração do equipamento</i> .....	47
<i>3.3.1</i>	<i>Injeção das amostras e determinação da densidade</i> .....	51
<b>3.3</b>	<b>Propriedades termodinâmicas derivativas</b> .....	52
<i>3.3.1</i>	<i>Compressibilidade isotérmica (<math>\kappa_T</math>)</i> .....	53
<i>3.3.2</i>	<i>Expansividade isobárica (<math>\alpha_P</math>)</i> .....	53
<i>3.3.3</i>	<i>Coefficiente de pressão térmico (<math>\gamma_V</math>)</i> .....	54
<i>3.3.4</i>	<i>Pressão interna (<math>P_i</math>)</i> .....	54
<b>3.4</b>	<b>Comparativo entre modelos de contribuição de grupo</b> .....	54

<b>4</b>	<b>RESULTADOS E DISCUSSÃO</b> .....	<b>56</b>
<b>4.1</b>	<b>Densidade dos líquidos iônicos</b> .....	<b>56</b>
<b>4.2</b>	<b>Propriedades derivativas</b> .....	<b>62</b>
<b>4.3</b>	<b>Densidade estimada utilizando modelos de contribuição de grupos</b> .....	<b>77</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b> .....	<b>84</b>
	<b>APÊNDICE A – DENSIDADE EXPERIMENTAL</b> .....	<b>95</b>
	<b>APÊNDICE B – DENSIDADE CALCULADA PELA EQUAÇÃO DE TAMMANN-TAIT</b> .....	<b>100</b>
	<b>APÊNDICE C – COMPRESSIBILIDADE ISOTÉRMICA</b> .....	<b>105</b>
	<b>APÊNDICE D – EXPANSIVIDADE ISOBÁRICA</b> .....	<b>108</b>
	<b>APÊNDICE E – COEFICIENTE DE PRESSÃO TÉRMICO</b> .....	<b>111</b>
	<b>APÊNDICE F – PRESSÃO INTERNA</b> .....	<b>114</b>
	<b>APÊNDICE G – DENSIDADE DETERMINADA PELOS MODELOS DE CONTRIBUIÇÃO DE GRUPOS</b> .....	<b>117</b>
	<b>ANEXO A – SOFTWARE OCTOPUS</b> .....	<b>151</b>
	<b>ANEXO B – DIVISÃO ESTRUTURAL DOS LÍQUIDOS IÔNICOS NO OCTOPUS</b> .....	<b>152</b>



## 1 INTRODUÇÃO

Com o desenvolvimento da tecnologia e maior acesso à informação, estudos relacionados a processos que causem menos danos ao meio ambiente ganham mais espaço, fazendo com que seu impacto seja um importante fator na análise da viabilidade técnico-econômica dos projetos de processos. Dessa forma, alguns materiais são reavaliados, em decorrência do impacto negativo que causam ao processo, enquanto outros materiais, buscando minimizar o uso de componentes mais danosos, são desenvolvidos. Dentro das substâncias desenvolvidas para redução do uso de componentes prejudiciais ao meio ambiente entram os líquidos iônicos (LIs).

Líquidos iônicos (LIs) podem ser definidos como substâncias compostas principalmente por íons e são formadas por cátions orgânicos e ânions que podem ser tanto orgânicos como inorgânicos (WELTON, 2004). Apesar de alguns estudos apontarem a toxicidade de algumas classes de líquidos iônicos frente a organismos como bactérias, algas e peixes (VENTURA *et al.*, 2013), quando confronta-se LIs e solventes orgânicos convencionais, o baixo impacto ambiental causado pelos líquidos iônicos os torna candidatos para substituição dos solventes orgânicos utilizados na indústria (KLOMFAR; SOUČKOVÁ; PÁTEK, 2015). Isso é possível devido as suas propriedades únicas, tais como: baixa temperatura de fusão, pressão de vapor negligenciável, estabilidade térmica e química, baixa inflamabilidade e solubilidade em compostos orgânicos e inorgânicos (CURRÁS *et al.*, 2011; DAKKACH *et al.*, 2018; DE PABLO *et al.*, 2018; KHAN *et al.*, 2017; KLOMFAR; SOUČKOVÁ; PÁTEK, 2015; KODAMA *et al.*, 2018; MARCINKOWSKI *et al.*, 2019; MASTER; MALEK, 2021; RABARI *et al.*, 2014; XU *et al.*, 2017).

Outra característica importante desses solventes está relacionada ao grande número de arranjos estruturais possíveis entre cátions e ânions (WELTON, 2018). Essa particularidade dos LIs tem papel fundamental sobre a síntese dos solventes, possibilitando a configuração de líquidos iônicos para aplicações industriais específicas (MUSIAŁ *et al.*, 2020; OKUNIEWSKI; PADUSZYŃSKI; DOMAŃSKA, 2016). Dentre estas aplicações, citam-se: processos de separação de gás, sínteses orgânicas, solventes para reações catalíticas, solventes para biopolímeros, e eletrólitos para baterias (DOMAŃSKA; ŻOLEK-TRYZNOWSKA; POBUDKOWSKA, 2009; GONÇALVES *et al.*, 2011; ICHIKAWA; KATO; OHNO, 2019; LETHESH; SHAH; MUTALIB, 2014; SANTOS *et al.*, 2016; SAS *et al.*, 2018; VIEIRA *et al.*, 2020; WATANABE *et al.*, 2016; YANG *et al.*, 2014).

O conhecimento das propriedades físico-químicas dos LIs é fundamental na melhor aplicação em processos industriais. Dentre essas propriedades, a densidade ( $\rho$ ) é imprescindível para o entendimento dos efeitos estruturais que ocorrem em decorrência da configuração química dos LIs. Além disso, a determinação desta propriedade tem valor tanto acadêmico como industrial, especialmente em condições operacionais de alta pressão e alta temperatura (HPHT), podendo ser utilizada na determinação da capacidade de equipamentos, determinação de vazões do processo e sistemas de transferência de calor, por exemplo (FOX; MCDONALD; PRITCHARD, 2004). Quando a determinação experimental da densidade não é possível, a utilização de métodos de contribuição de grupos (CG), que são reconhecidamente utilizados na literatura, torna-se uma forma viável na análise desta propriedade e seus efeitos em diversas condições operacionais de pressão e temperatura (EVANGELISTA *et al.*, 2014; GARDAS; COUTINHO, 2008; LAZZÚS, 2010; PADUSZYŃSKI; DOMAŃSKA, 2012; QIAO *et al.*, 2010; TAHERIFARD; RAEISSI, 2016).

A combinação entre cátion e ânion afeta diretamente o comportamento dos líquidos iônicos devido à ação das forças intermoleculares entre as estruturas que constituem o solvente. Com isso, analisar diferentes combinações de líquidos iônicos é essencial para compreender a ação causada nas propriedades físico-químicas por conta da mudança do cátion, do ânion ou a variação do tamanho da cadeia lateral na estrutura do solvente.

Visando analisar os efeitos decorrentes das alterações estruturais na composição dos líquidos iônicos trietilsulfônio bis(trifluorometilsulfonyl) imida  $[(C_2)_3S][NTf_2]$ , 2,3-dimetil-1-propilimidazólio bis(trifluorometilsulfonyl) imida  $[C_3C_1C_1Im][NTf_2]$ , 1-metil-1-propilpirrolidínio bis(trifluorometilsulfonyl) imida  $[C_3C_1Pyr][NTf_2]$ , 3-butil-1,2-dimetilimidazólio bis(trifluorometilsulfonyl) imida  $[C_4C_1C_1Im][NTf_2]$ , 1-butil-3-metilimidazólio iodeto  $[C_4C_1Im][I]$ , 3-hexil-1-metilimidazólio iodeto  $[C_6C_1Im][I]$ , 3-metil-1-propilimidazólio iodeto  $[C_3C_1Im][I]$ , 1-metil-3-octilimidazólio trifluorometanossulfonato  $[C_8C_1Im][OTF]$ , 1-butil-1-metilpirrolidínio dicianamida  $[C_4C_1Pyr][DCA]$  e 1-etil-3-metilimidazólio acetato  $[C_2C_1Im][C1COO]$  quando submetidos a condições operacionais de altas pressões e altas temperaturas  $P = (0,2 \text{ até } 100,0)$  MPa e  $T = (298,15 \text{ até } 398,15)$  K, respectivamente. Com esses dados, foi possível identificar o comportamento das forças atrativas e repulsivas nos líquidos iônicos, como também a influência do efeito de empacotamento entre o cátion e o ânion. Os dados de densidade obtidos foram ajustados com a equação de Tammann-Tait. A partir deles, as seguintes propriedades derivadas foram determinadas: compressibilidade isotérmica ( $\kappa_T$ ), expansividade isobárica ( $\alpha_p$ ), coeficiente de pressão térmico ( $\gamma_p$ ) e pressão interna ( $P_i$ ). Por fim, para a avaliação de cenários onde a determinação experimental da densidade não é possível, foram utilizados sete modelos de

contribuição de grupos já consolidados na literatura, a saber: Evangelista *et al.* (2014), Gardas e Coutinho (2008), Jacquemin *et al.* (2008b, 2008a), Qiao *et al.* (2010), Lazzús (2010), Padaszyński e Domańska (2012) e Taherifard e Raeissi (2016). Os modelos foram selecionados visando avaliar a metodologia mais adequada para determinação da densidade dos líquidos iônicos na ausência de dados experimentais.

## 1.1 Objetivo geral

O objetivo geral foi determinar experimentalmente a densidade dos seguintes líquidos iônicos: Trietilsulfônio bis(trifluorometilsulfonil) imida  $[(C_2)_3S][NTf_2]$ , 2,3-dimetil-1-propilimidazólio bis(trifluorometilsulfonil) imida  $[C_3C_1C_1Im][NTf_2]$ , 1-metil-1-propilpirrolidínio bis(trifluorometilsulfonil) imida  $[C_3C_1Pyr][NTf_2]$ , 3-butil-1,2-dimetilimidazólio bis(trifluorometilsulfonil) imida  $[C_4C_1C_1Im][NTf_2]$ , 1-butil-3-metilimidazólio iodeto  $[C_4C_1Im][I]$ , 3-hexil-1-metilimidazólio iodeto  $[C_6C_1Im][I]$ , 3-metil-1-propilimidazólio iodeto  $[C_3C_1Im][I]$ , 1-metil-3-octilimidazólio trifluorometanossulfonato  $[C_8C_1Im][OTF]$ , 1-butil-1-metilpirrolidínio dicianamida  $[C_4C_1Pyr][DCA]$  e 1-etil-3-metilimidazólio acetato  $[C_2C_1Im][C_1COO]$ . A partir dessa propriedade, discutir o comportamento estrutural e a influência das forças intermoleculares em um amplo domínio de pressão (0,2 até 100,0 MPa) e temperatura (298,15 até 398,15 K).

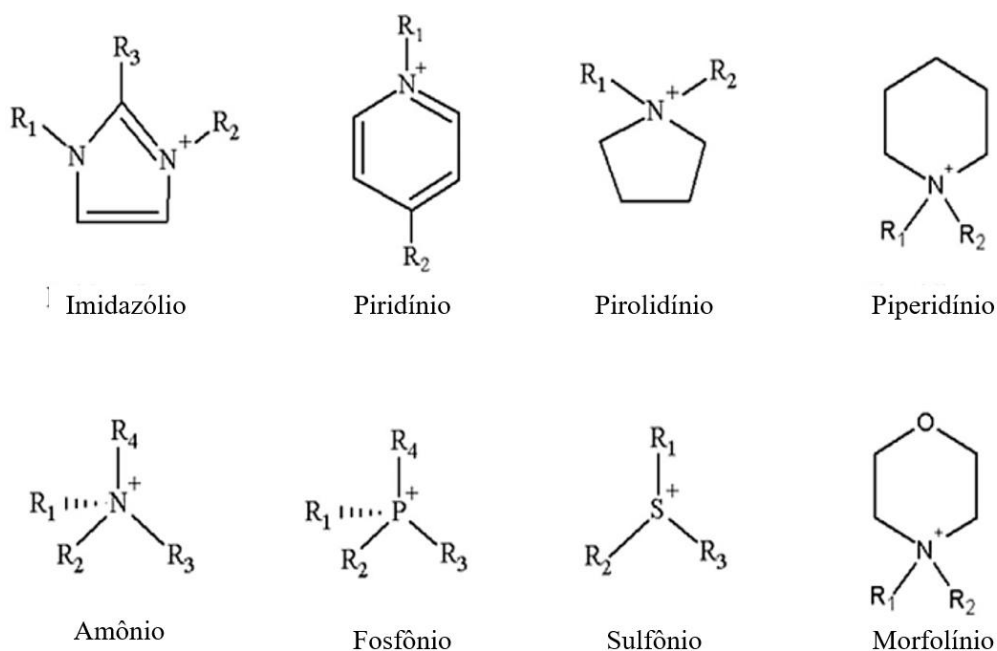
### 1.1.1 Objetivos específicos

- Ajustar os dados de densidade obtidos experimentalmente utilizando uma equação do tipo Tammann-Tait;
- Determinar as seguintes propriedades derivadas a partir dos dados de densidade: compressibilidade isotérmica ( $\kappa_T$ ), expansividade isobárica ( $\alpha_p$ ), coeficiente de pressão térmico ( $\gamma_p$ ), e pressão interna ( $P_i$ );
- Verificar os efeitos decorrente da variação estrutural dos líquidos iônicos nas propriedades derivadas;
- Avaliar sete diferentes modelos de contribuição de grupos reportados na literatura para estimar a densidade dos líquidos iônicos avaliados.

## 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Líquidos iônicos (LIs) podem ser definidos como sais orgânicos com baixo ponto de fusão, geralmente menores que 373,15 K (KAUR; KUMAR; SINGLA, 2022). Devido apresentarem baixo impacto ambiental, os LIs são cotados como possíveis substituintes para os solventes orgânicos, convencionalmente utilizados na indústria (KLOMFAR; SOUČKOVÁ; PÁTEK, 2015). Por serem estruturalmente formados através da interação entre cátions e ânions, há diversas possibilidades de formulação desses compostos, tornando-se possíveis diversas configurações estruturais para os LIs. Por essa razão, a literatura utiliza o termo “*designer solvents*” (solventes de desing) para estas substâncias. Esta é uma característica marcante dessa classe de materiais, já que o ajuste das propriedades físico-químicas podem ser alteradas de acordo com o cátion e o ânion que formam a estrutura do composto (WILKES, 2002). A Figura 1 apresenta os cátions mais comuns utilizados na síntese de líquidos iônicos.

Figura 1 - Estruturas dos cátions utilizados na síntese de LIs.



Fonte: Wang *et al.* (2016, com adaptações).

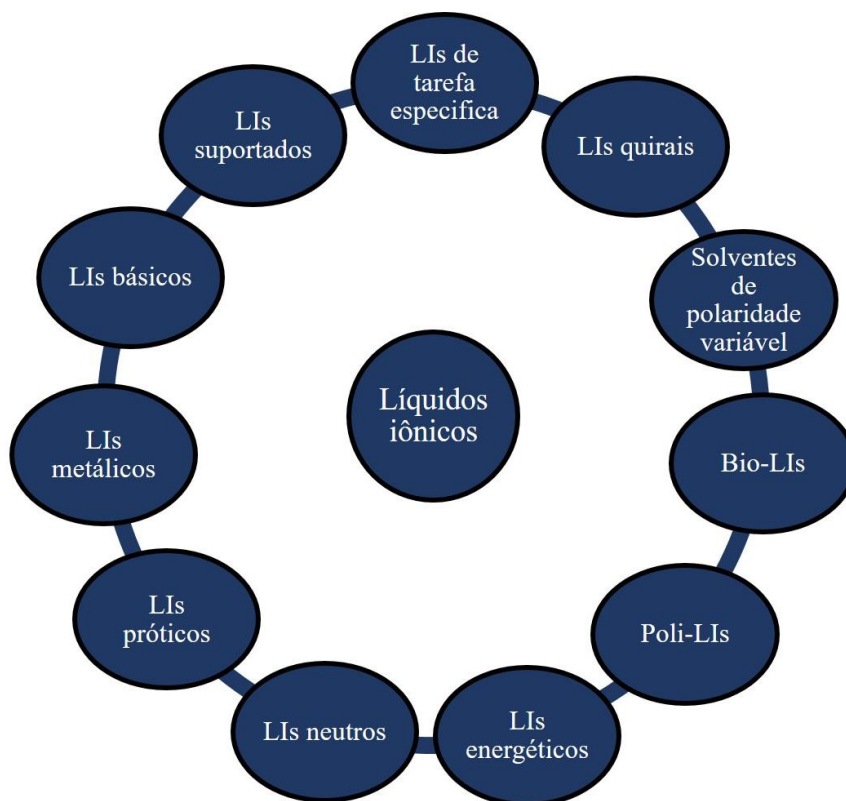
Outra característica das estruturas dos líquidos iônicos é possuírem cátions volumosos, sendo responsáveis por assimetrias estruturais na sua interação com diferentes ânions. O reflexo dessa interação pode ser observado nas propriedades físico-químicas dos LIs, como por exemplo, em seu baixo ponto de fusão. Por este motivo, os LIs apresentam propriedades

bastante específicas em decorrência da ação das forças intermoleculares reinantes, tais como: pressão de vapor negligenciável, serem líquidos em ampla faixa de temperatura, baixa inflamabilidade e solubilidade em compostos orgânicos e inorgânicos (CURRÁS *et al.*, 2011; DAKKACH *et al.*, 2018; DE PABLO *et al.*, 2018; KHAN *et al.*, 2017; KLOMFAR; SOUČKOVÁ; PÁTEK, 2015; KODAMA *et al.*, 2018; MARCINKOWSKI *et al.*, 2019; MASTER; MALEK, 2021; RABARI *et al.*, 2014; XU *et al.*, 2017).

## 2.1 Classificações dos líquidos iônicos

Como mencionado, por conta das inúmeras formas de estruturação entre cátions e ânions, há diversas possibilidades de desenvolvimento líquidos iônicos com propriedades distintas e específicas para cada aplicação, logo, tornou-se necessário a classificação de cada material em grupos de líquidos iônicos com características semelhantes. A Figura 2 apresenta as principais categorias.

Figura 2 - Aplicações dos líquidos iônicos



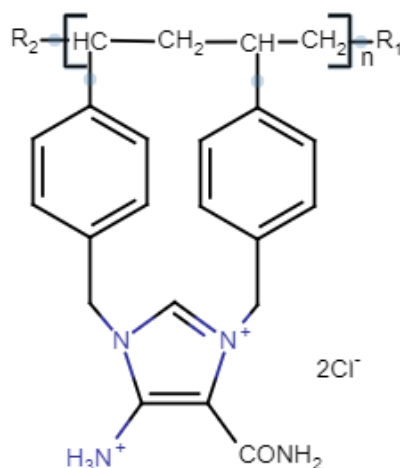
Fonte: Singh e Savoy (2020, com adaptações).

### 2.1.1 Líquidos iônicos de tarefa

Os líquidos iônicos presentes nessa subclasse são formados por compostos que apresentam, além da estrutura básica dos LIs (cátion e ânion), também possuem um grupo funcional ligado a um desses dois íons. Esses materiais podem atuar com meio reacional e exercer a função de catalisador para a reação (REZAE NEZHAD *et al.*, 2019). A Figura 3 mostra um exemplo de líquido iônico de tarefa à base de imidazólio.

O líquido iônico mostrado na Figura 3 foi utilizado por Xu *et al.* (2019) para o processo de recuperação de metais do grupo da platina. O material apresentou alta eficiência na extração dos metais propostos em diversas condições experimentais.

Figura 3 - Líquido iônico de tarefa específica

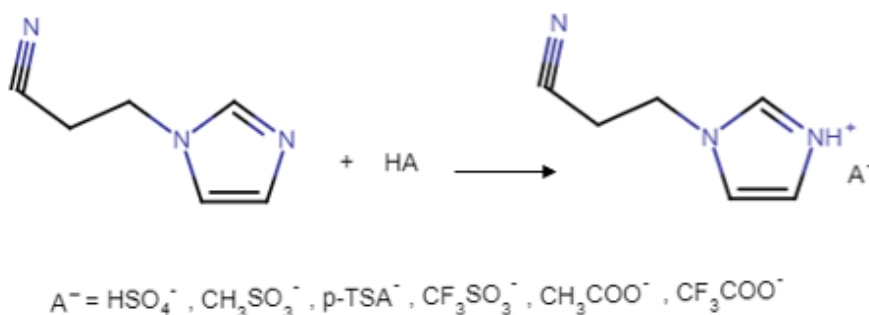


Fonte: Xu *et al.* (2019, com adaptações).

### 2.1.2 Líquidos iônicos próticos

Os líquidos iônicos próticos são derivados da reação de neutralização entre um ácido e uma base de Brønsted. Esta neutralização resulta em fortes ligações de hidrogênio (PALUMBO *et al.*, 2020), simplificam o processo de síntese de LIs pertencentes a esta classe, como também proporcionam menores custos de síntese e menores toxicidades, quando comparados com outras subclasses de líquidos iônicos (ÁLVAREZ *et al.*, 2010). A Figura 4 apresenta um exemplo da esquematização da síntese de um líquido iônico prótico.

Figura 4 - Esquema de síntese de LI prótico



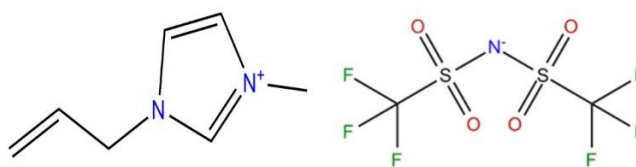
**Fonte:** Khan *et al.* (2017, com adaptações).

Uma das aplicações recentes dessa subclasse de líquidos iônicos é como eletrólitos em baterias, já que os eletrólitos comumente utilizados apresentam problemas como alto custo de produção, problemas de segurança e impacto ambiental acentuado (GARCÍA-GARABAL *et al.*, 2021).

### 2.1.3 Líquidos iônicos apróticos

Os líquidos iônicos apróticos são formados por cátions orgânicos e fortes ligações de hidrogênio. Diferente dos líquidos iônicos próticos, os LIs apróticos formam-se a partir de uma reação de quaternização, com troca aniônica, além de possuírem maior estabilidade estrutural (JIN *et al.*, 2021). A estrutura dessa subclasse de LI apresenta cátions como: imidazólio, pirrolidínio, amônio, sulfônio e fosfônio (MARZOUKI; ZARROUGUI; GHODBANE, 2021), como mostrado na Figura 5.

Figura 5 - Exemplo de líquido iônico aprótico



**Fonte:** Marzouki, Zarrougui, e Ghodbane (2021).

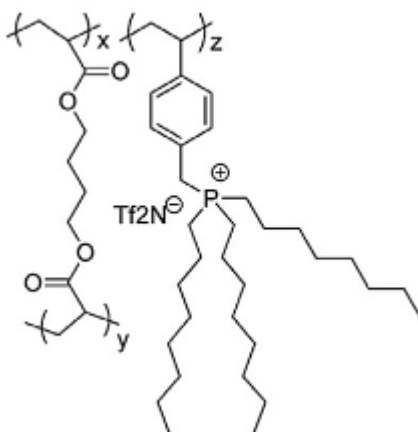
### 2.1.4 Líquidos poli-iônicos

Esses líquidos iônicos são formados quando a unidade principal da estrutura é repetida em vários meros, formando o polímero. Isso permitir combinar as propriedades



mecânicas dos líquidos iônicos com o controle de dimensão dos polímeros (HAJIPOUR; RAFIEE, 2015). A Figura 6 apresenta um exemplo de um líquido poli-iônico baseado em fosfônio.

Figura 6 - Exemplo de líquido poli-iônico



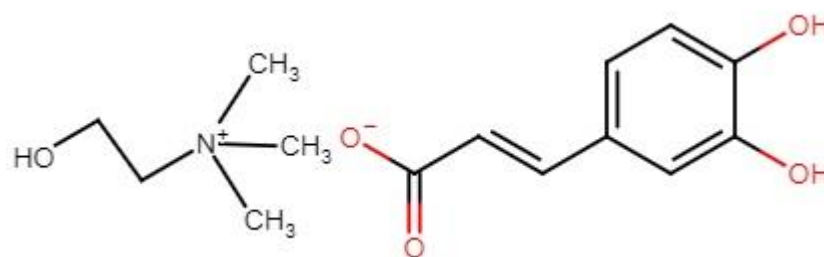
Fonte: Nulwala, Mirjafari e Zhou (2018, com adaptações).

As principais aplicações para essa subclasse de LIs estão em membranas de separação de CO<sub>2</sub> por conta da grande afinidade e alta seletividade relativa ao momento quadrupolo (KAMMAKAKAM *et al.*, 2020). Outras aplicações estão em supercapacitores, materiais mesoporosos, e em materiais termorresponsivos (BISWAS; BANERJEE; MANDAL, 2019).

### 2.1.5 Líquidos bio-iônicos

Por conta da limitação de uso de alguns líquidos iônicos em virtude de sua toxicidade, como aqueles compostos por longas cadeias de alquilimidazólio, essa classe foi desenvolvida inteiramente por biomateriais (FUKAYA *et al.*, 2007). Como são baseados em biocompostos, esses materiais apresentam baixa toxicidade e biodegradabilidade (SINGH; SAVOY, 2020). A Figura 7 apresenta um bio-LI genérico.

Figura 7 - Exemplo de um bio-LI genérico



Fonte: Sharma *et al.* (2021, com adaptações).

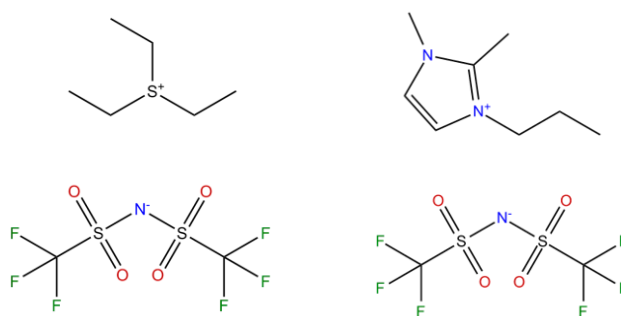
## 2.2 Densidade

Como já citado, as propriedades dos líquidos iônicos são reflexos das interações entre o cátion e o ânion que o formam, possibilitando diferentes configurações para cada mudança na formulação do líquido iônico. Por meio de medidas experimentais de densidade, em uma ampla faixa de  $P$  e  $T$ , é possível conhecer a inter-relação entre a estrutura dos LIs e as condições operacionais.

### 2.2.1 Densidade dos líquidos iônicos

Para os líquidos iônicos a densidade segue o comportamento líquidos regulares, ou seja, diminuindo com a temperatura e aumentando com a pressão. No entanto, destaca-se os efeitos estruturais decorrentes da formulação do líquido iônico. O primeiro efeito está relacionado ao empacotamento estrutural entre cátion e ânion. A Figura 8 destaca dois líquidos iônicos que possuem diferentes tamanhos de cátion.

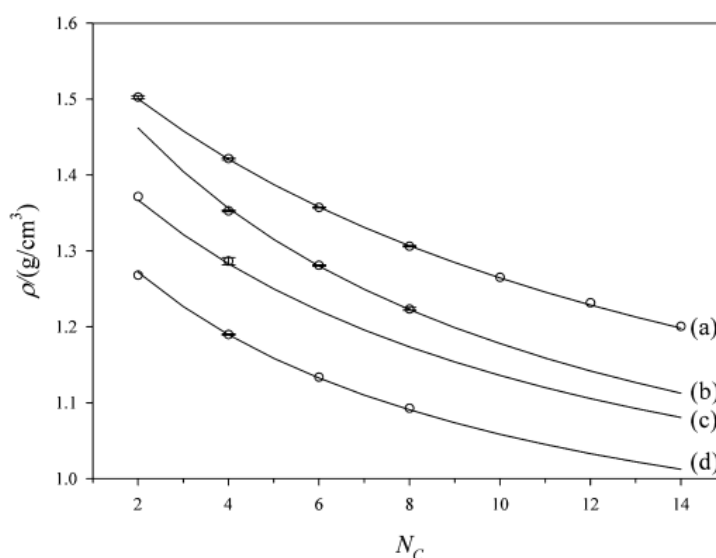
Figura 8 - Líquidos iônicos com diferentes tamanhos de cátions



Fonte: Elaborado pelo autor (2022).

O efeito de simetria entre cátions e ânion faz com que a densidade dos componentes seja diferente. A título de exemplo, pode-se ilustrar a diferença de densidade entre os LIs mostrados na Figura 8 em virtude do diferente empacotamento que está diretamente relacionado ao impedimento estérico. Dessa forma, o líquido iônico da esquerda estará mais condensado, apresentando maiores valores de densidade para as mesmas condições experimentais (DZIDA *et al.*, 2019), por exemplo, para a pressão de 50,00 MPa e temperatura de 348,15 K, a densidade para o LI da esquerda será  $1448,50 \text{ kg/m}^3$ , enquanto para o LI da direita será  $1442,21 \text{ kg/m}^3$ . Outro ponto de comparação está relacionado ao aumento do número de carbonos ligados ao cátion. A Figura 9 apresenta o efeito da variação da cadeia alquil em diferentes líquidos iônicos baseados em quatro ânions distintos.

Figura 9 - Variação do número de carbonos ligados ao cátion



**Fonte:** Montalbán *et al.* (2015, com adaptações).

Legenda: N<sub>c</sub>, número de carbonos. Ânions: a) [NTf<sub>2</sub>]<sup>-</sup>; b) [PF<sub>6</sub>]<sup>-</sup>; c) [OTf]<sup>-</sup>; e d) [BF<sub>4</sub>]<sup>-</sup>

Como se nota na Figura 9, em todos os casos a densidade diminuiu com o aumento da cadeia alquil ligada ao cátion. Salinas *et al.* (2015) atribuem a diminuição da densidade com o aumento da cadeia alquil ao acréscimo de regiões não polares, que irão ocupar maior área do que as regiões polares, afetando as forças de interação, assim diminuindo a densidade.

### 2.2.1.1 Determinação experimental da densidade

Por ser uma propriedade de fácil determinação, diversas técnicas podem ser empregadas para a determinação experimental da densidade. A Tabela 1 sumariza alguns métodos experimentais mais utilizados para sua determinação.

Tabela 1 - Método de determinação experimental da densidade

Método	Princípio	Vantagens	Desvantagens
Picnometria	Um aparato com volume fixo e de massa conhecida, é preenchido com a amostra a ser analisada. Por meio da variação da massa do aparato com a amostra e sem a amostra, utiliza-se a relação básica de massa sobre o volume e determina-se a densidade.	- Metodologia simplificada; - Baixo custo de operação.	- Quantidade elevada de amostra; - Faixa de operação limitada; - Imprecisão de medidas.
Balança hidrostática	Baseia-se no princípio de Arquimedes, onde o peso da amostra será equivalente à quantidade de água, ou gás, deslocado, com essa variação, a densidade é determinada.	- Facilidade de utilização; - Baixo custo operacional.	- Imprecisão de medidas.
Densímetro de tubo vibrante	Determina a densidade da amostra através do período de vibração do tubo em U dentro do sistema. O equipamento reconhece a variação no período de vibração do tubo seco e compara com o tubo totalmente preenchido pela amostra. De posse deste resultado e conhecendo-se uma relação matemática pré-estabelecida entre o período e a densidade de um fluido padrão, a densidade da amostra é determinada.	- Determinação rápida da densidade; - Alta repetibilidade nas medidas; - Alta precisão nas medidas; - Ampla faixa de pressão e temperatura.	- Custo do equipamento; - Calibração utilizando fluidos de referência; - Viscosidade pode afetar a medida.

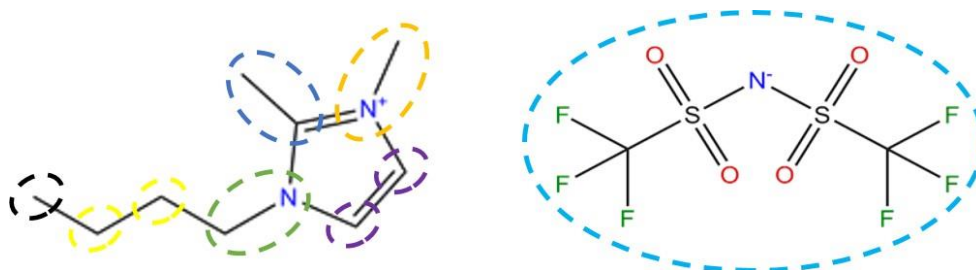
**Fonte:** Elaborado pelo autor (2022).

### 2.2.1.2 Modelos de contribuição de grupos

Os modelos de contribuição de grupos (CG) são caracterizados por estimar diversas propriedades físico-químicas, entre elas a densidade, de compostos através da divisão estrutural em segmentos moleculares menores. Diversos modelos de CG são reportados na literatura para estimar a densidade de líquidos iônicos em diferentes condições de pressão e temperatura. Estes modelos diferem, em grande parte dos casos, pela metodologia aplicada para o cálculo, bem como pela configuração dos grupos estruturais.

A Figura 10 apresenta um exemplo dessa divisão para o líquido iônico 3-butil-1,2-dimetilimidazólio bis(trifluorometilsulfonil) ( $[C_4C_1C_1][NTf_2]$ ) imida pelo modelo de CG proposto por Evangelista *et al.* (2014), aplicável para pressões de até 300,0 MPa e para faixa de temperatura de  $T = (252,62 \text{ até } 473,15) \text{ K}$  com desvio médio relativo absoluto (DMRA) de 0,83%.

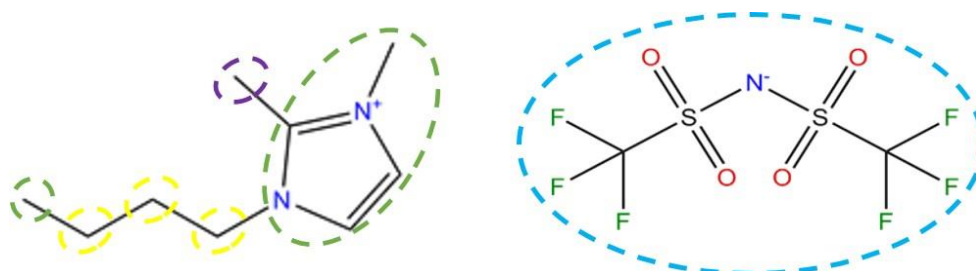
Figura 10 - Exemplo de divisão estrutural



**Fonte:** Evangelista *et al.* (2015, com adaptações).

A Figura 11 apresenta a divisão estrutural para o  $[C_4C_1C_1][NTf_2]$  através do modelo de CG proposto por Gardas e Coutinho (2008), aplicável para pressões de até 100,0 MPa e faixa de temperatura de  $T = (272,15 \text{ até } 393,15) \text{ K}$  com DMRA de 1,49% para os LIs avaliados neste modelo.

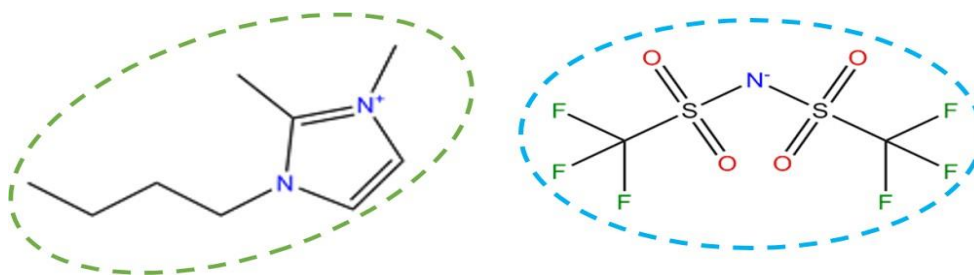
Figura 11 - Divisão estrutural proposta por Gardas e Coutinho (2008)



**Fonte:** Gardas e Coutinho (2008, com adaptações).

A Figura 12 apresenta a divisão estrutural para o modelo proposto por Jacquemin et al. (2008b, 2008a), que consideram a estrutura completa para a divisão dos grupos. Este modelo é aplicável para pressões de até 207,0 MPa e faixa de temperatura de  $T = (273,0 \text{ até } 423,0)$  K, com DMRA de 0,36%.

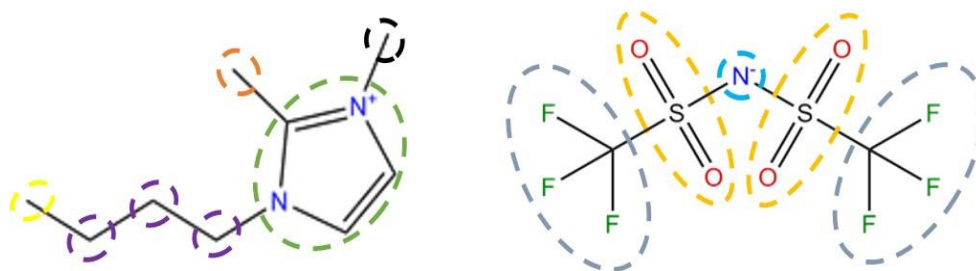
Figura 12 - Divisão estrutural proposta por Jacquemin et al. (2008b, 2008a)



**Fonte:** Jacquemin et al. (2008<sup>b</sup>, 2008<sup>a</sup>, com adaptações).

A estruturação proposta por Qiao et al. (2010) é mostrada na Figura 13, onde além do cátion, o ânion também apresenta subdivisões estruturais. Este modelo avaliou diferentes faixas de pressão e temperatura a depender do LI. Para a validação do modelo, os autores utilizaram dados experimentais de apenas três líquidos iônicos, obtendo um erro relativo de 0,27%.

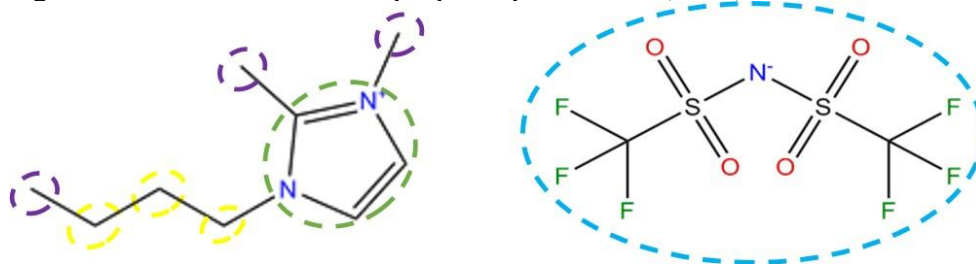
Figura 13 - Divisão estrutural proposta por Qiao et al. (2010)



**Fonte:** Qiao et al. (2010, com adaptações).

A exemplificação do modelo proposto por Lazzús (2010) é mostrado na Figura 14 para o  $[\text{C}_4\text{C}_1\text{C}_1][\text{NTf}_2]$ . Este modelo é aplicável para pressões de até 207,0 MPa e para faixa de temperatura de  $T = (258,0 \text{ até } 393,15)$  K, com DMRA de 0,73%.

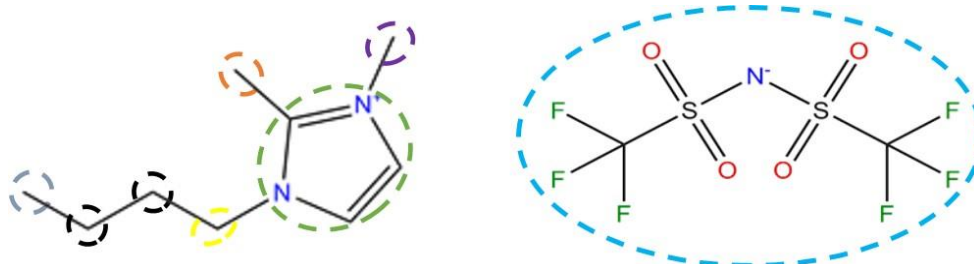
Figura 14 - Divisão estrutural proposta por Lazzús (2010)



**Fonte:** Lazzús (2010, com adaptações).

Já o modelo proposto por Padaszyński e Domańska (2012), há diferenciação entre as contribuições dos compostos que estão ligados diretamente ao cátion/ânion central. A construção das estruturas em blocos possibilita a aplicação para uma grande quantidade de estruturas em pressões de até 300,0 MPa e faixa de temperatura de  $T = (251,0 \text{ até } 473,0) \text{ K}$  com desvio médio relativo absoluto de 0,45%. A divisão estrutural para o  $\text{Li} [\text{C}_4\text{C}_1\text{C}_1][\text{NTf}_2]$  é mostrada na Figura 15.

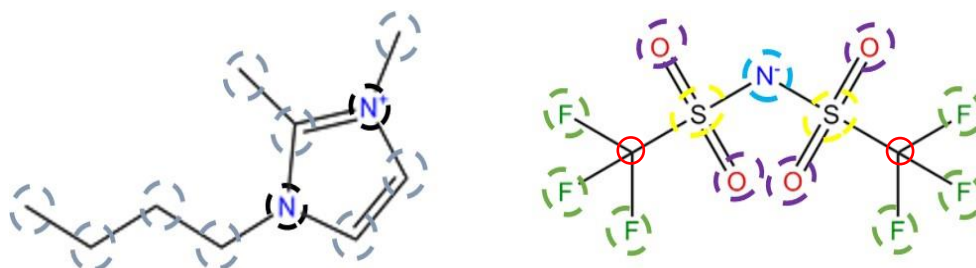
Figura 15 - Divisão estrutural proposta por Padaszyński e Domańska (2012)



**Fonte:** Padaszyński e Domańska (2012, com adaptações).

Outra forma de estruturar uma molécula para determinação por contribuição de grupos é utilizando os átomos que formam as estruturas, como apresentado por Taherifard e Raeissi (2016). A Figura 16 exibe um exemplo de estruturação utilizando o modelo dos autores.

Figura 16 - Estruturação pelo modelo proposto por Taherifard e Raeissi (2016)



**Fonte:** Taherifard e Raeissi (2016, com adaptações).

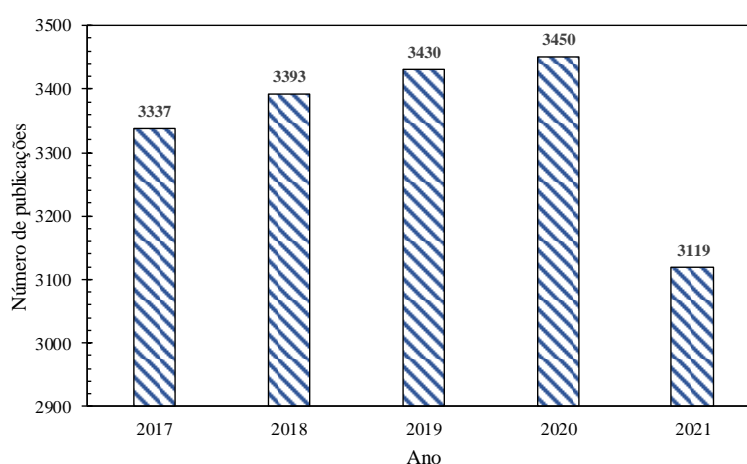
Como observado na Figura 16, os autores propõem a contagem unitária de cada átomo presente na estrutura, sendo uma vantagem por possibilitar a construção de diversas moléculas, como também facilitando a aplicação em problemas de projeto molecular auxiliado por computador (do inglês *Computer-Aided molecular design - CAMD*). Para este líquido iônico a estrutura básica seria: 9 carbonos, 17 hidrogênios, e 2 nitrogênios, formando o cátion. 4 oxigênios, 6 fluoreos, 2 enxofres, 2 carbonos e 1 nitrogênio formando o ânion. Taherifard e Raeissi (2016) ainda consideram uma estrutura básica referente à cadeia alquil acima de 2 carbonos e a quantidade de anéis presentes na estrutura do líquido iônico. Este modelo é aplicável para pressões de até 300,0 MPa e faixa de temperatura de  $T = (217,58 \text{ até } 473,15 \text{ K}$ , com desvio médio relativo absoluto de 0,95%.

Com isso, quando não há possibilidades da determinação experimental da densidade, os modelos citados fornecem uma rota para contornar este problema. Baseando-se nos desvios relativos reportados pelos autores dos modelos de CG, pela consolidação e confiabilidade reportada na literatura, o modelo de contribuição de grupo proposto por Padaszyński e Domańska (2012) é indicado na ausência de dados experimentais.

### 2.2.2 Literatura reportada para os líquidos iônicos estudados

A Figura 17 apresenta o número de publicações reportadas na plataforma “*web of Science*” para os últimos cinco anos contendo a palavra “Ionic liquid” no título do artigo.

Figura 17 - Publicações nos últimos cinco anos



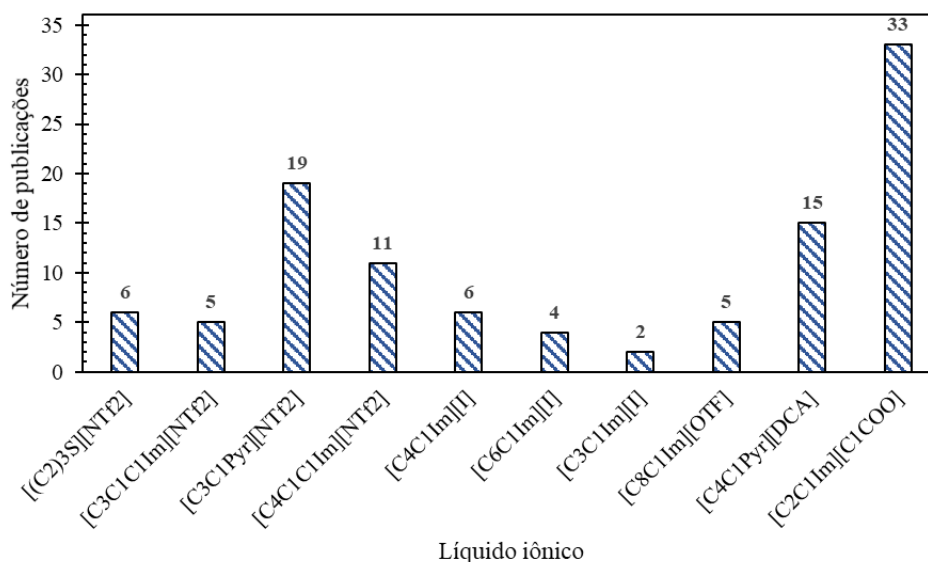
**Fonte:** Web of Science (consultado em 21 de janeiro de 2022).

Observa-se que mais de 16 mil artigos foram publicados relacionados ao tópico geral de líquidos iônicos no último quinquênio, evidenciando o interesse por esses solventes na



atualidade. Já para os líquidos iônicos avaliados, a Figura 18 mostra o número de publicações relacionados à densidade para todas as condições de pressão dos componentes, os dados estão disponíveis na plataforma NIST-ILThermo, com última atualização em julho de 2021.

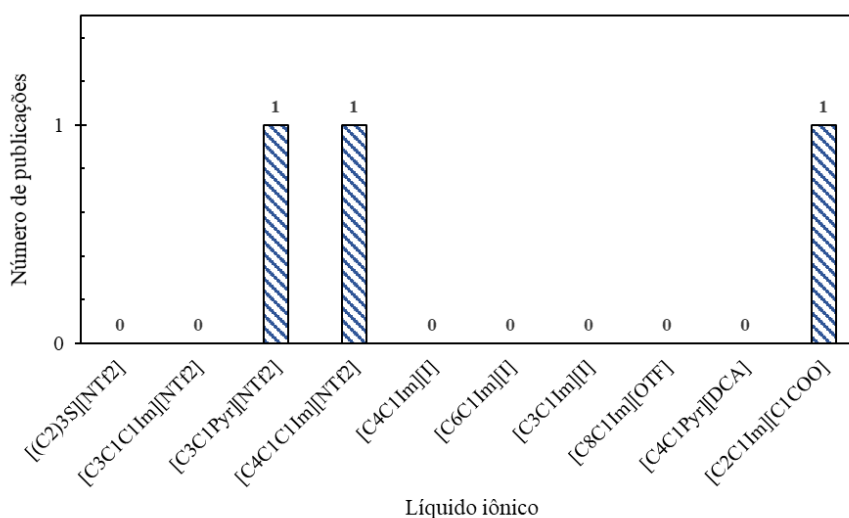
Figura 18 - Publicações reportadas no ILThermo



Fonte: ILThermo (consultado em 21 de janeiro de 2022).

A partir da Figura 18, observa-se que há poucas publicações, principalmente relacionado aos LIs com ânion [I]. Isto se deve à viscosidade destes LIs que dificultam sobremaneira a determinação experimental da densidade. A Figura 19 apresenta as publicações que avaliaram o comportamento da densidade em pressões superiores a 0,10 MPa.

Figura 19 - Publicações sobre densidade em alta pressão



Fonte: ILThermo (consultado em 21 de janeiro de 2022).

Observa-se que poucos trabalhos foram realizados para pressões maiores que 0,10 MPa, evidenciando a relevância dos dados que serão apresentados posteriormente.

### 3 MATERIAIS E MÉTODOS

Esta seção apresenta informações sobre os líquidos iônicos utilizados, bem como o detalhamento operacional da metodologia realizada para a determinação experimental da densidade.

#### 3.1 Líquidos iônicos

A Tabela 2 sumariza algumas informações relativas aos LIs utilizados neste trabalho (número CAS, teor de água, e a pureza dos compostos). A Tabela 3 reporta as estruturas dos líquidos iônicos estudados nesta dissertação. Todos os líquidos iônicos foram adquiridos da IoLiTec<sup>®</sup> e foram utilizados conforme recebidos do fornecedor. A quantidade de água nas amostras foi determinada utilizando o método Karl Fischer (Metrohm 870 KF Titrino plus) utilizando como solução diluente clorofórmio/metanol na proporção 3:1 (vol/vol).

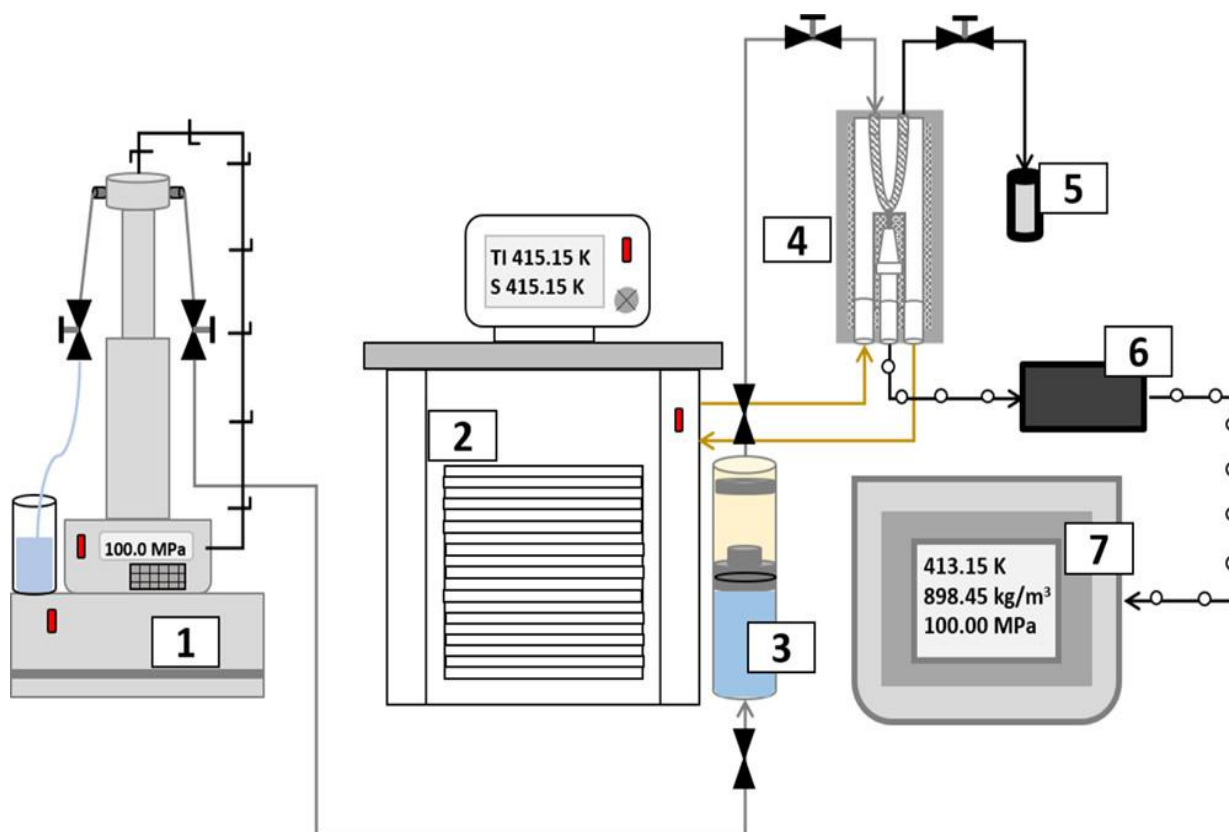
#### 3.2 Determinação experimental da densidade

A seção descreve o procedimento de determinação da densidade abordada para os líquidos iônicos avaliados neste trabalho, bem como a metodologia aplicada para o cálculo das propriedades derivativas e densidade determinada por meio dos modelos de contribuição de grupos.

##### 3.2.1 Descrição operacional e calibração do equipamento

A determinação experimental da densidade ( $\rho$ ) foi realizada utilizando um densímetro de tubo vibrante (Anton Paar DMA HPM), com incerteza de  $\pm 0,01 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ , na faixa de pressão e temperatura de  $P = (0,2 \text{ até } 100,0) \text{ MPa}$  e  $T = (298,15 \text{ até } 398,15) \text{ K}$ , respectivamente. A Figura 20 apresenta um desenho esquemático do aparato experimental utilizado neste trabalho. O controle da pressão do equipamento foi assegurado por meio de uma bomba seringa Teledyne ISCO 65D que utiliza água como fluido hidráulico, com incerteza padrão de  $\pm 0,70 \text{ MPa}$  e com pressão de operação na faixa  $0,07 \text{ até } 139,00 \text{ MPa}$ . Para a manutenção da temperatura do sistema utilizou-se um banho termostático (Julabo FP50/Germany), que apresenta incerteza padrão de  $0,10 \text{ K}$ , e temperatura de operação na faixa  $223,15 \text{ até } 473,15 \text{ K}$ .

Figura 20 - Esquemática do aparato experimental



**Fonte:** Alves *et al.* (2022)

Legenda: 1: Bomba seringa; 2: Banho termostático; 3: Célula de alta pressão; 4: Densímetro de tubo vibrante; 5: Transdutor de pressão; 6: DMA HPM e 7: Interface mPDS.

O procedimento de calibração seguiu o modelo proposto por Comuñas *et al.* (2008), em que dois fluidos de referência foram necessários para cobrir uma faixa ampla de densidades. Para tal, foram escolhidos fluidos com amplo banco de dados na literatura, a saber: água deionizada (com resistividade  $18,20 \pm 0,20 \text{ M}\Omega \cdot \text{cm}$  em  $298,15 \text{ K}$ ) e nitrogênio (White Martins/Brazil, pureza nominal 99,996%). Para a validação da calibração utilizou-se tolueno (Sigma Aldrich/USA, com pureza nominal 99,50%). Quando comparado com o banco de dados do *National Institute of Standards and Technology* (NIST) para a faixa de temperatura  $T = (303,15 \text{ até } 468,15) \text{ K}$  e pressões até  $100,0 \text{ MPa}$ , o desvio padrão obtido foi de  $0,58 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$  (com desvio médio de 0,07%) (CHACON; FEITOSA; DE SANT'ANA, 2020).

Tabela 2 - Detalhamento dos materiais utilizados

Componente	Acrônimo	CAS	Teor de água (%)	Pureza (%)
Trietilsulfônio bis(trifluorometilsulfonyl) imida	[(C <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> S][NTf <sub>2</sub> ]	321746-49-0	0,06±0,02 <sup>a</sup>	≥0,99 <sup>b</sup>
2,3-dimetil-1-propilimidazólio bis(trifluorometilsulfonyl) imida	[C <sub>3</sub> C <sub>1</sub> C <sub>1</sub> Im][NTf <sub>2</sub> ]	169051-76-7	0,01±0,006 <sup>a</sup>	≥0,99 <sup>b</sup>
1-Metil-1-propilpirrolidínio bis(trifluorometilsulfonyl) imida	[C <sub>3</sub> C <sub>1</sub> Pyr][NTf <sub>2</sub> ]	223437-05-6	0,01±0,006 <sup>a</sup>	≥0,99 <sup>b</sup>
3-butil-1,2-dimetilimidazólio bis(trifluorometilsulfonyl) imida	[C <sub>4</sub> C <sub>1</sub> C <sub>1</sub> Im][NTf <sub>2</sub> ]	350493-08-2	0,24±0,04 <sup>a</sup>	≥0,99 <sup>b</sup>
1-metil-3-octilimidazólio trifluorometanossulfonato	[C <sub>8</sub> C <sub>1</sub> Im][OTF]	403842-84-2	0,17±0,04 <sup>a</sup>	≥0,99 <sup>b</sup>
1-butil-1-metilpirrolidínio dicianamida	[C <sub>4</sub> C <sub>1</sub> Pyr][DCA]	370865-80-8	0,14±0,04 <sup>a</sup>	≥0,98 <sup>b</sup>
1-etil-3-metilimidazólio acetato	[C <sub>2</sub> C <sub>1</sub> Im][C <sub>1</sub> COO]	143314-17-4	0,48±0,02 <sup>a</sup>	≥0,95 <sup>b</sup>
1-butil-3-metilimidazólio iodeto	[C <sub>4</sub> C <sub>1</sub> Im][I]	65039-05-6	0,31±0,02 <sup>a</sup>	≥0,98 <sup>b</sup>
3-hexil-1-metilimidazólio iodeto	[C <sub>6</sub> C <sub>1</sub> Im][I]	178631-05-5	0,32±0,02 <sup>a</sup>	≥0,98 <sup>b</sup>
3-metil-1-propilimidazólio iodeto	[C <sub>3</sub> C <sub>1</sub> Im][I]	119171-18-5	0,38±0,02 <sup>a</sup>	≥0,98 <sup>b</sup>

<sup>a</sup> Método Karl Fischer  
<sup>b</sup> Informação do fornecedor

**Fonte:** Elaborado pelo autor (2022).

Tabela 3 - Estrutura dos líquidos iônicos

Acrônimo	Cátion	Ânion
$[(C_2)_3S][NTf_2]$		
$[C_3C_1C_1Im][NTf_2]$		
$[C_3C_1Pyr][NTf_2]$		
$[C_4C_1C_1Im][NTf_2]$		
$[C_8C_1Im][OTf]$		
$[C_4C_1Pyr][DCA]$		
$[C_2C_1Im][C_1COO]$		
$[C_4C_1Im][I]$		
$[C_6C_1Im][I]$		I
$[C_3C_1Im][I]$		

Fonte: Elaborado pelo autor (2022).

### 3.3.1 Injeção das amostras e determinação da densidade

Inicialmente, cada amostra foi inserida no cilindro de alta pressão de forma cuidadosa, visando evitar o contato dos líquidos iônicos com a umidade presente no ar. Antes do início da determinação experimental de cada líquido iônico, todo o sistema do densímetro e conexões foi limpo com acetona, visando a remoção de possíveis contaminantes e resíduos que possam interferir na medida da densidade. Após isso, ocorreu a secagem de todo o equipamento com a injeção de um solvente volátil (*n*-hexano). Por fim, o densímetro e suas conexões foram submetidos a vácuo com o auxílio de uma bomba a vácuo V-710 Bunchi/Switzerland. Após essa etapa, o cilindro contendo a amostra foi conectado à bomba e ao densímetro para que ocorresse a transferência dos LIs para o tubo em U. A pressão do aparato contendo a amostra foi elevada através de uma rampa de pressão aplicada lentamente pela bomba provocando a transferência da amostra para o interior do densímetro. Para assegurar que todo o sistema estivesse preenchido com a amostra, observou-se dois fatores: a elevação da densidade exibida na interface do densímetro (exemplificado pelo mPDS na Figura 16) e a purga realizada na saída do tubo vibrante. Tais observações garantiram que o sistema esteja completamente carregado de amostra e livre da presença do ar.

A próxima etapa consistiu em adequar as condições operacionais definidas para o trabalho. O banho termostático foi ajustado para a temperatura de trabalho (iniciando em 298,15 até 398,15 K) e aguardou-se tempo suficiente para que a variação da temperatura do tubo vibrante fosse  $\pm 0,02$  K do valor desejado. Com o equilíbrio térmico alcançado, utilizou-se a bomba seringa para ajustar as pressões de trabalho (iniciando em 0,2 até 100,0 MPa). De forma semelhante, aguardou-se tempo suficiente para que a variação da pressão do sistema atingisse a margem admitida no trabalho ( $\pm 0,07$  MPa). O procedimento de determinação foi feito variando-se todo o intervalo de pressões para uma temperatura fixada. A posteriori, definiu-se uma nova temperatura e o procedimento foi repetido.

Com a amostra no sistema e as condições de trabalho alcançadas, a determinação da densidade foi realizada através da vibração de um tubo em U preenchido com a amostra submetida para análise. O equipamento reconhece a variação do período de oscilação natural do tubo vibrante sem a amostra e compara com o valor obtido quando o aparato contém a amostra a ser determinada. O equipamento foi calibrado por meio da determinação de um polinômio obtido no processo de calibração do equipamento que descreve o comportamento da densidade da amostra a partir dos períodos de oscilação detectados pelo equipamento, dessa forma, determinando a densidade do material.

É importante mencionar que características físico-químicas das amostras podem afetar a determinação da densidade, por exemplo, o efeito de amortecimento causado pela alta viscosidade de algumas amostras. Devido isso, quantificou-se os efeitos causados por essa característica seguindo o procedimento descrito por Gaciño *et al.* (2015) para correção dos valores de densidade. Dessa forma, verificou-se que o fator de correção para a densidade era menor que  $1,0 \text{ kg/m}^3$ . Como a correção era inferior a incerteza experimental, determinada como  $1,9 \text{ kg/m}^3$  para todo o conjunto de dados experimentais, os efeitos causados pela viscosidade foram negligenciados.

### 3.3 Propriedades termodinâmicas derivativas

Uma forma de avaliar o efeito da estrutura dos líquidos iônicos é por meio da análise das propriedades derivadas da densidade. Uma das formas de determinar estas propriedades é a partir de uma função da densidade, como exemplo, cita-se equações do tipo Tammann-Tait. A partir da derivada dessa função mantendo pressão ou temperatura constantes, pode-se obter propriedades, tais como: compressibilidade isotérmica ( $\kappa_T$ ), expansividade isobárica ( $\alpha_p$ ), coeficiente de pressão térmico ( $\gamma_v$ ) e pressão interna ( $P_i$ ). A Equação (1) apresenta uma das formas da função tipo Tammann-Tait.

$$\rho(T, P) = \frac{\rho(T, P_{Ref})}{\left[1 - c \cdot \ln\left(\frac{B + P}{B + P_{ref}}\right)\right]} \quad (1)$$

onde:  $\rho(T, P_{Ref})$  é a densidade na pressão de referência, determinada pela Equação (2);  $c$  denota o termo independente da temperatura,  $B$  define o efeito da compressibilidade com relação à temperatura, determinada pela Equação (3);  $P$  é a pressão do sistema e;  $P_{ref}$  é a pressão de referência adotada, geralmente a menor pressão avaliada.

$$\rho(T, P_{Ref}) = a_0 + a_1 \cdot T + a_2 \cdot T^2 \quad (2)$$

onde:  $a_0$ ,  $a_1$  e  $a_2$  são parâmetros ajustados para a densidade de referência;  $T$  é a temperatura do sistema.

$$B(T) = b_0 + \frac{b_1}{T} \quad (3)$$



onde:  $b_0$  e  $b_1$  são coeficientes ajustáveis.

Os parâmetros iniciais utilizados na equação de Tammann-Tait foram obtidos utilizando o algoritmo de Levenberg-Marquardt disponível no *software* MatLab. Com os parâmetros iniciais, a regressão dos coeficientes finais foi feita utilizando o método GRG não linear disponível no MS-Excel, minimizando como função objetivo o desvio médio relativo absoluto, mostrado na Equação (4). desvio padrão ( $\sigma$ ) foi determinado pela Equação (5).

$$\%DMRA = \frac{\sum_{i=1}^{N_p} \left| \frac{\rho_{calc} - \rho_{exp}}{\rho_{exp}} \right|_i}{N_p} \cdot 100 \quad (4)$$

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{N_p} (\rho_{calc} - \rho_{exp})^2_i}{N_p - k}} \quad (5)$$

onde:  $N_p$  representa o número de pontos experimentais e;  $k$  o número de parâmetros ajustáveis.

### 3.3.1 Compressibilidade isotérmica ( $\kappa_T$ )

Essa propriedade derivativa auxilia na compreensão do efeito da pressão na densidade. A compressibilidade isotérmica define a relação entre a mudança volumétrica decorrente da variação de pressão. Podendo ser determinada utilizando a Equação (6) (GMEHLING et al., 2019).

$$\kappa_T = \frac{1}{\rho} \cdot \left( \frac{\partial \rho}{\partial P} \right)_T = \frac{c}{(P + B(T)) \cdot \left( 1 - c \cdot \ln \left( \frac{P + B(T)}{B(T) + 0,2} \right) \right)} \quad (6)$$

### 3.3.2 Expansividade isobárica ( $\alpha_p$ )

A expansividade isobárica ( $\alpha_p$ ) determina a influência da temperatura, à pressão constante, nas mudanças no volume do líquido, podendo ser determinada pela Equação (7) (GMEHLING et al., 2019).

$$\alpha_p = -\frac{1}{\rho} \cdot \left( \frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_P = -\frac{2a_2T + a_1}{\rho(T, P_{Ref})} - \frac{c \cdot \left( \left( \frac{b_1 \cdot (B(T) + P)}{(B(T) + 0,2)^2 \cdot T^2} \right) - \frac{b_1}{(B(T) + 0,2) \cdot T^2} \right) \cdot (B(T) + 0,2)}{\left( 1 - c \cdot \ln \left( \frac{P + B(T)}{B(T) + 0,2} \right) \right) \cdot (B(T) + P)} \quad (7)$$

### 3.3.3 Coeficiente de pressão térmico ( $\gamma_v$ )

O coeficiente de pressão térmico ( $\gamma_v$ ) caracteriza como a densidade será afetada por variações de pressão e de temperatura. Essa propriedade é determinada pela razão entre a expansividade isobárica e a compressibilidade isotérmica, visto na Equação (8).

$$\gamma_v = \frac{\alpha_p}{\kappa_T} = -\frac{2a_2T + a_1}{\rho(T, P_{Ref})} \cdot \left( \frac{(P + B(T)) \cdot \left(1 - c \cdot \ln\left(\frac{P + B(T)}{B(T) + 0,2}\right)\right)}{c} \right) - \left( \left( \frac{b_1 \cdot (B(T) + P)}{(B(T) + 0,2)^2 \cdot T^2} \right) - \frac{b_1}{(B(T) + 0,2) \cdot T^2} \right) \cdot (B(T) + 0,2) \quad (8)$$

### 3.3.4 Pressão interna ( $P_i$ )

A pressão interna ( $P_i$ ) pode ser calculada utilizando a combinação de resultados de expansividade isobárica e de compressibilidade isotérmica. A pressão interna é capaz de descrever uma estimativa do comportamento das forças coesivas presentes no sistema (ABDULAGATOV et al., 2017). A Equação (9) pode ser utilizada para a determinação dessa propriedade.

$$P_i = \frac{T \cdot \alpha_p}{\kappa_T} - P \quad (9)$$

## 3.4 Comparativo entre modelos de contribuição de grupo

A determinação da densidade utilizando os modelos de contribuição de grupos propostos por Evangelista *et al.* (2014), Gardas e Coutinho (2008), Jacquemin *et al.* (2008b, 2008a), Qiao *et al.* (2010), Lazzús (2010), Padiuszyński e Domańska (2012) e Taherifard e Raeissi (2016) foram calculados utilizando o *software* de acesso livre OCTOPUS (EVANGELISTA, 2018), com link<sup>1</sup> de direcionamento para a página principal no Anexo A e estruturação dos líquidos iônicos em grupos no Anexo B.

Com a determinação da densidade dos líquidos iônicos aqui estudados, os modelos de contribuição de grupos avaliados foram comparados com base no desvio médio relativo

absoluto, mostrado na Equação (4), em função da densidade determinada experimentalmente. O desvio relativo da densidade calculada em função da densidade experimental foi calculado utilizando a Equação (10).

$$\%DR = \frac{\rho_{exp} - \rho_{calc}}{\rho_{exp}} \cdot 100\% \quad (10)$$

---

<sup>1</sup>Link de direcionamento para o *software* OCTOPUS: <https://github.com/thegibbsproject/octopus>

## 4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Esta seção apresenta os resultados experimentais de densidade, em condições de altas pressões e altas temperaturas,  $P = (0,2 \text{ até } 100,0) \text{ MPa}$  e  $T = (298,15 \text{ até } 398,15) \text{ K}$ , para os seguintes líquidos iônicos: Trietilsulfônio bis(trifluorometilsulfonil) imida  $[(C_2)_3S][NTf_2]$ , 2,3-dimetil-1-propilimidazólio bis(trifluorometilsulfonil) imida  $[C_3C_1C_1Im][NTf_2]$ , 1-metil-1-propilpirrolidínio bis(trifluorometilsulfonil) imida  $[C_3C_1Pyr][NTf_2]$ , 3-butil-1,2-dimetilimidazólio bis(trifluorometilsulfonil) imida  $[C_4C_1C_1Im][NTf_2]$ , 1-metil-3-octilimidazólio trifluorometanossulfonato  $[C_8C_1Im][OTF]$ , 1-butil-1-metilpirrolidínio dicianamida  $[C_4C_1Pyr][DCA]$ , 1-etil-3-metilimidazólio acetato  $[C_2C_1Im][C_1COO]$ , 1-butil-3-metilimidazólio iodeto  $[C_4C_1Im][I]$ , 3-hexil-1-metilimidazólio iodeto  $[C_6C_1Im][I]$  e 3-metil-1-propilimidazólio iodeto  $[C_3C_1Im][I]$ . Para tal, as discussões foram divididas em relação ao caráter geral da propriedade avaliada e pontos específicos foram divididos em três blocos definidos com base na similaridade entre os líquidos iônicos.

### 4.1 Densidade dos líquidos iônicos

As Figuras 21-23 reportam o comportamento da densidade em altas pressões e altas temperaturas para os líquidos iônicos que possuem semelhança estrutural referente ao ânion bis(trifluorometilsulfonil) imida, ao ânion iodeto e para os LI sem similaridade estrutural, respectivamente.

Até onde se estende este trabalho, não há dados experimentais de densidade em alta pressão para os líquidos iônicos  $[(C_2)_3S][NTf_2]$  e  $[C_3C_1C_1Im][NTf_2]$ . Dados de densidade para o líquido iônico  $[C_4C_1C_1Im][NTf_2]$  já foram reportados na literatura por Gaciño *et al.* (2015). Uma análise comparativa entre este conjunto de dados e aqueles determinados aqui, obteve-se um desvio relativo em relação aos dados aqui determinados de 0,35%. Já para o líquido iônico  $[C_3C_1Pyr][NTf_2]$ , há uma faixa bastante restrita de dados experimentais reportados por Gardas *et al.* (2008), cujo desvio relativo, com relação aos dados obtidos neste trabalho, foi de 0,45%. A Figura 24 apresenta a comparação dos resultados obtidos com os dados da literatura.

Até a última atualização do banco de dados reportado no ILThermo (julho/2021), não há dados para condições de alta pressão para os LIs com iodeto como ânion base avaliados neste trabalho, reportam-se apenas dados em pressão atmosférica para amplas faixas de temperaturas. A Figura 25 representa a comparação entre a densidade determinada na menor pressão desse estudo ( $P = 0,2 \text{ MPa}$ ) e os dados reportados na literatura para pressão atmosférica.

Para os líquidos iônicos [C<sub>8</sub>C<sub>1</sub>Im][OTF] e [C<sub>4</sub>C<sub>1</sub>Pyr][DCA] não foram reportados dados de densidade para pressões maiores que 0,1 MPa. A Figura 26 representa a comparação entre os dados de densidade reportados para os líquidos iônicos [C<sub>8</sub>C<sub>1</sub>Im][OTF], [C<sub>4</sub>C<sub>1</sub>Pyr][DCA] e [C<sub>2</sub>C<sub>1</sub>Im][C<sub>1</sub>COO] na literatura em pressão atmosférica e os dados obtidos experimentalmente na menor pressão deste estudo (0,2 MPa). Comparando todo o intervalo de temperaturas reportados, o desvio médio relativo absoluto máximo foi de 1,72 %. Para o líquido iônico [C<sub>2</sub>C<sub>1</sub>Im][C<sub>1</sub>COO] foram reportados dados de densidade por Stevanovic *et al.* (2012) para pressões de até 25,0 MPa. Em condições operacionais semelhantes, foi obtido um desvio médio relativo absoluto máximo de 0,21 %, quando comparados aos dados aqui determinados.

Com base na análise dos resultados mostrados nas Figuras 21-23 e Figuras 24-26, os líquidos iônicos aqui reportados apresentaram boa concordância com os dados reportados na literatura, e em toda a faixa de pressão e temperatura avaliados apresentaram comportamento de líquido regular, ou seja, a densidade aumenta com o aumento da pressão e diminui com o aumento da temperatura.

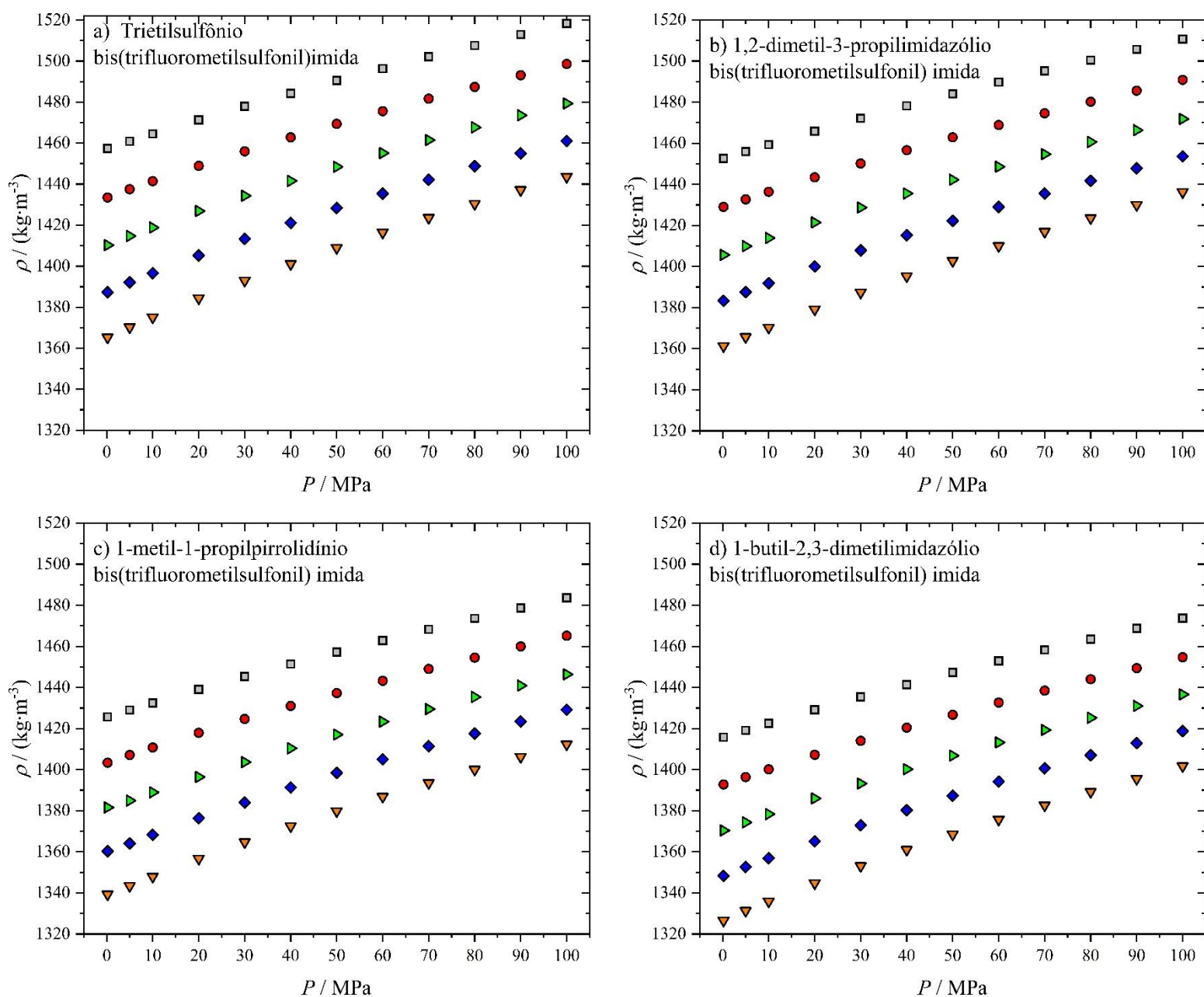
Para os líquidos iônicos com similaridade no ânion [NTf<sub>2</sub>], nota-se que a densidade aumenta na seguinte ordem: [C<sub>4</sub>C<sub>1</sub>C<sub>1</sub>Im][NTf<sub>2</sub>] < [C<sub>3</sub>C<sub>1</sub>Pyr][NTf<sub>2</sub>] < [C<sub>3</sub>C<sub>1</sub>C<sub>1</sub>Im][NTf<sub>2</sub>] < [(C<sub>2</sub>)<sub>3</sub>S][NTf<sub>2</sub>]. Este comportamento pode estar associado à dificuldade de empacotamento entre as estruturas dos cátions e do ânion, decorrente do volume das estruturas. Tariq *et al.* (2009, 2011) e Dzida *et al.* (2019) declaram que a falta de simetria entre o cátion e o ânion causa a perda na eficiência do empacotamento, resultando no decréscimo de densidade.

Em relação aos líquidos iônicos com similaridade no ânion [I], a ordem de crescimento para a densidade nas condições de pressão e temperatura avaliados foi: [C<sub>6</sub>C<sub>1</sub>Im][I] < [C<sub>4</sub>C<sub>1</sub>Im][I] < [C<sub>3</sub>C<sub>1</sub>Im][I]. A partir da Figura 22, observa-se que a densidade aumenta de acordo com a diminuição do comprimento da cadeia alquil do cátion, de forma semelhante ao reportado por Montalbán *et al.* (2015) e Salinas *et al.* (2015). Podendo ser justificado pela geometria estrutural que o cátion pode formar com o ânion, possibilitando interações, quanto menor a cadeia, com maiores eficiências de empacotamento, resultando em uma massa estrutural mais condensada por unidade de volume.

Por fim, os líquidos iônicos sem similaridade direta seguiram a seguinte ordem para a densidade: [C<sub>4</sub>C<sub>1</sub>Pyr][DCA] < [C<sub>2</sub>C<sub>1</sub>Im][C<sub>1</sub>COO] < [C<sub>8</sub>C<sub>1</sub>Im][OTF]. Apesar do LI [C<sub>8</sub>C<sub>1</sub>Im][OTF] apresentar a maior cadeia alquil, este líquido iônico apresentou a maior densidade. Esperava-se que o aumento da cadeia lateral do cátion dificultasse o empacotamento estrutural com o ânion, resultando em densidades menores, mas o comportamento inverso foi observado. Uma possível explicação pode estar relacionada à presença do flúor na estrutura do

ânion. Neste caso, o anel imidazólico mostra preferência para se relacionar com a estrutura do ânion por conta da forte interação entre o hidrogênio do anel e o flúor, como citado por Zhao *et al.* (2009). Logo, a ligação de hidrogênio seria responsável pela maior densidade. O comportamento regular foi observado para os líquidos iônicos  $[C_4C_1Pyr][DCA]$  e  $[C_2C_1Im][C_1COO]$ , como o volume molar de  $[C_4C_1Pyr][DCA]$  é maior que  $[C_2C_1Im][C_1COO]$ , a eficiência do empacotamento entre cátion e ânion é prejudicada, resultando em densidades menores.

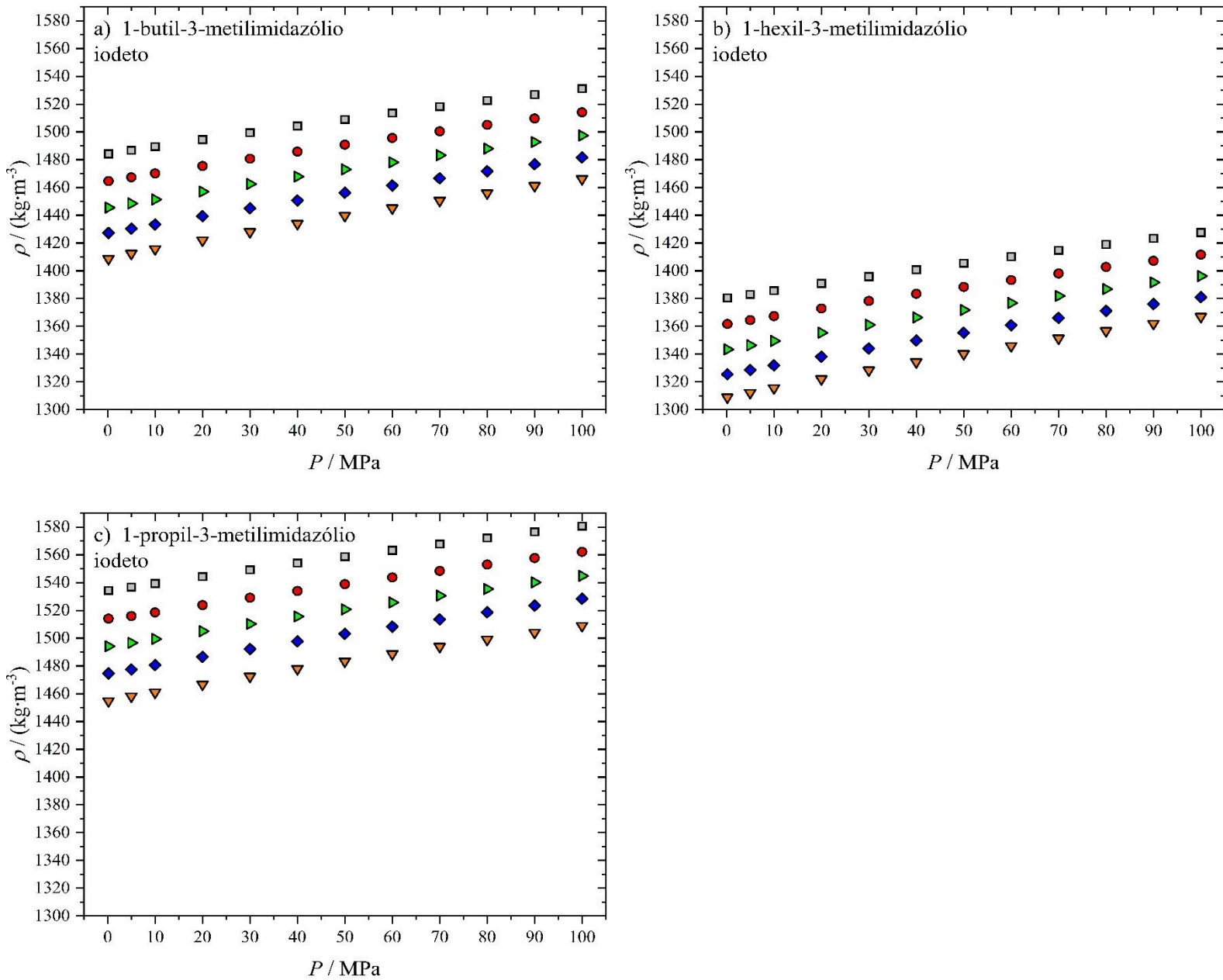
Figura 21 - Comportamento da densidade com a pressão



Fonte: Elaborado pelo autor (2022).

Legenda:  $\square$  298,15 K;  $\bullet$  323,15 K;  $\blacktriangleright$  348,15 K;  $\blacklozenge$  373,15 K;  $\blacktriangledown$  398,15 K.

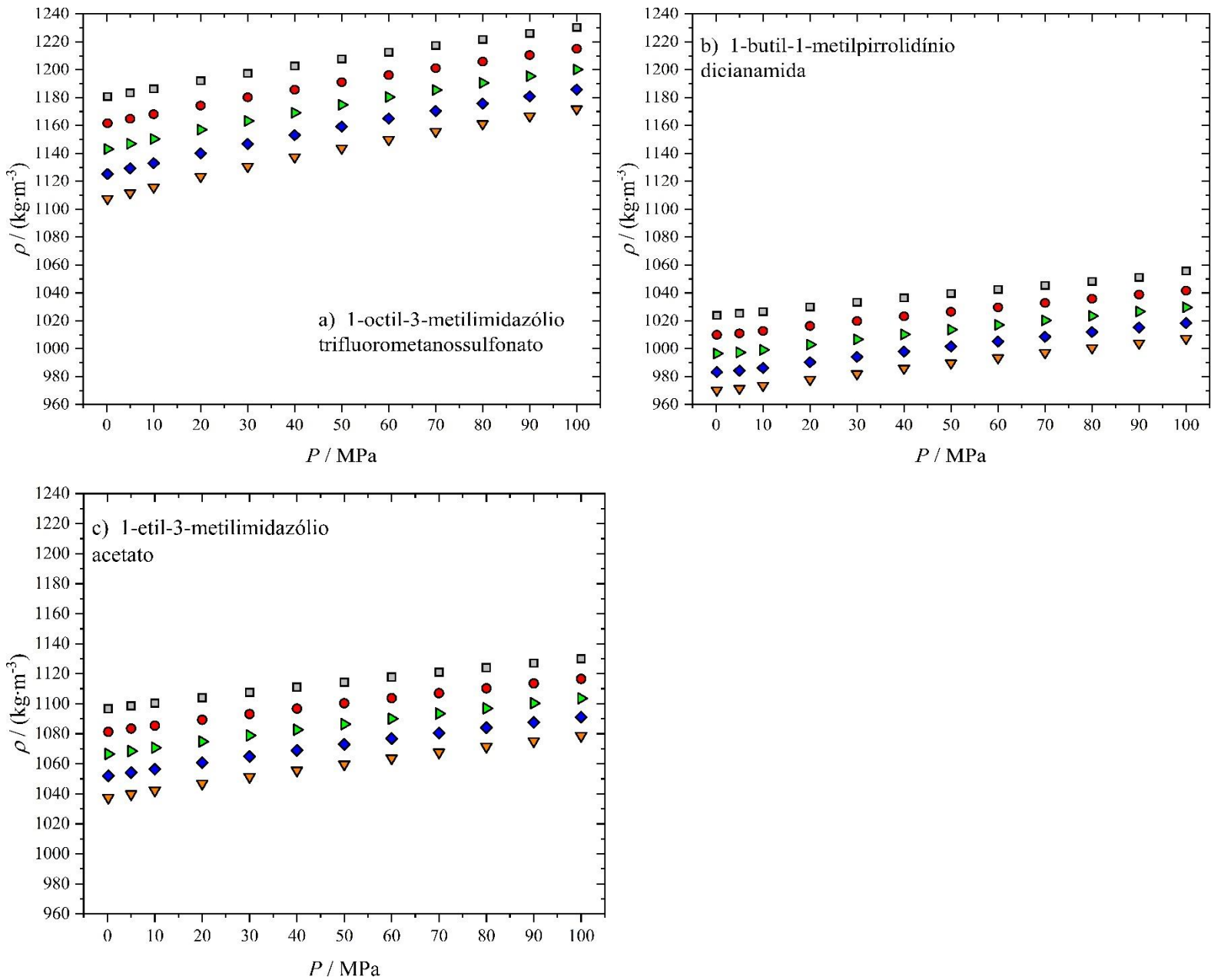
Figura 22 - Densidade experimental para os líquidos iônicos com semelhança entre cátion e ânion



Fonte: Elaborado pelo autor (2022).

Legenda:  $\square$  298,15 K;  $\bullet$  323,15 K;  $\blacktriangle$  348,15 K;  $\blacklozenge$  373,15 K;  $\blacktriangledown$  398,15 K.

Figura 23 - Densidade experimental para os LIs sem relação estrutural direta

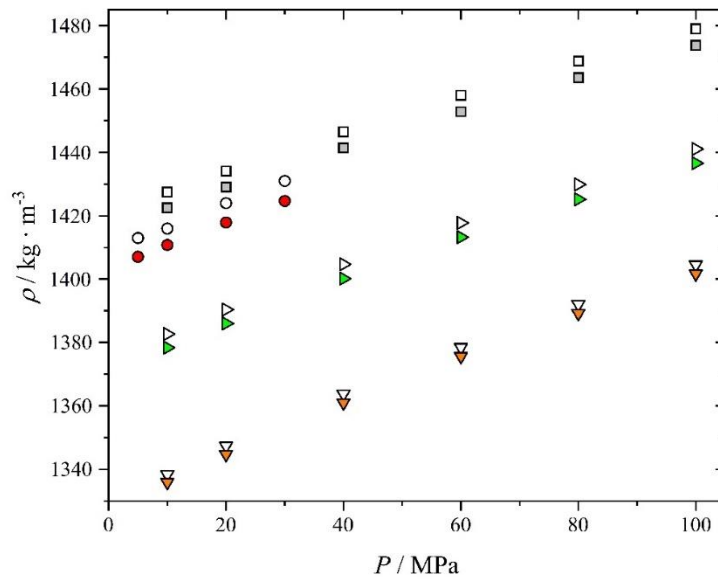


Fonte: Elaborado pelo autor (2022).

Legenda:  $\square$  298,15 K;  $\bullet$  323,15 K;  $\blacktriangle$  348,15 K;  $\blacklozenge$  373,15 K;  $\blacktriangledown$  398,15 K.



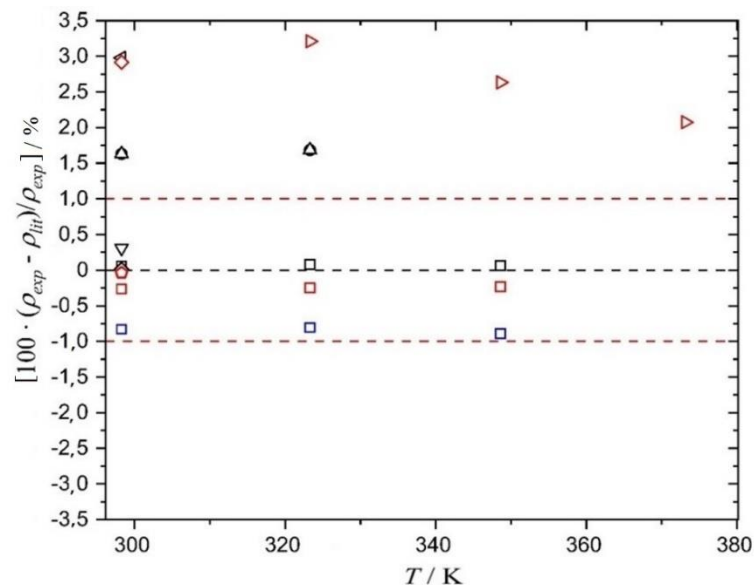
Figura 24 - Comparação da densidade com dados reportados na literatura



**Fonte:** Elaborado pelo autor (2022).

Legenda: Densidade experimental e reportada na literatura para:  $[\text{C}_3\text{C}_1\text{Pyr}][\text{NTf}_2]$  em  $T = 323,15 \text{ K}$ :  $\circ$  Gardas *et al.* (2008);  $\bullet$  Este trabalho;  $[\text{C}_4\text{C}_1\text{C}_1\text{Im}][\text{NTf}_2]$  em  $T = 298,15 \text{ K}$ :  $\square$  Gaciño *et al.* (2015);  $\square$  Este trabalho; em  $T = 348,15 \text{ K}$ :  $\triangleright$  Gaciño *et al.* (2015);  $\blacktriangleright$  Este trabalho; em  $T = 398,15 \text{ K}$ :  $\nabla$  Gaciño *et al.* (2015);  $\blacktriangledown$  Este trabalho.

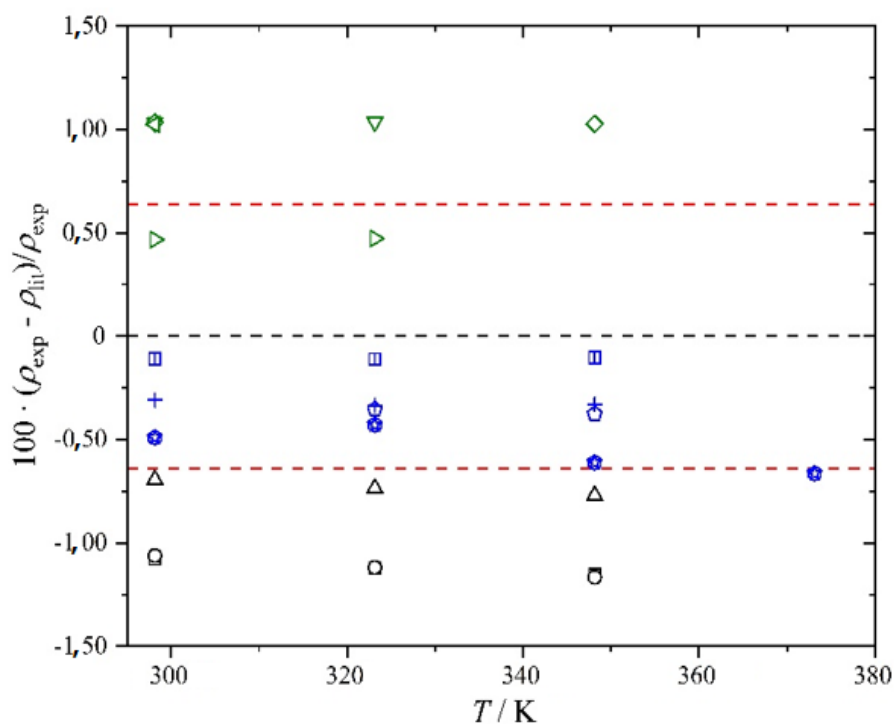
Figura 25 - Comparativo da densidade na menor pressão avaliada com os dados reportados na literatura



**Fonte:** Elaborado pelo autor (2022).

Legenda:  $[\text{C}_4\text{C}_1\text{Im}][\text{I}]$ :  $\square$ , Součková, Klomfar, e Pátek (2015);  $\circ$ , Kim (2009);  $\Delta$ , Kim, Shin, e Lee (2004);  $\nabla$ , Teodorescu (2014);  $\diamond$ , Sastry, Vaghela, e Macwan (2013);  $\blacktriangleleft$ , Huddleston *et al.* (2001).  $[\text{C}_6\text{C}_1\text{Im}][\text{I}]$ :  $\square$ , Součková, Klomfar, e Pátek (2015);  $\blacktriangleright$ , Ghatee *et al.* (2010);  $\diamond$ , Sastry, Vaghela, e Macwan (2013);  $\blacklozenge$ , Deetlefs, Seddon, e Shara (2006).  $[\text{C}_3\text{C}_1\text{Im}][\text{I}]$ :  $\square$ , Součková, Klomfar, e Pátek (2015).  $\bullet$ , Desvio padrão médio

Figura 26 - Comparação dos dados experimentais com a literatura



**Fonte:** Elaborado pelo autor (2022).

Legenda: Símbolos com bordas verdes: [C<sub>8</sub>C<sub>1</sub>Im][OTf]. Símbolos com bordas pretas: [C<sub>4</sub>C<sub>1</sub>Pyr][DCA]. Símbolos com borda azul: [C<sub>2</sub>C<sub>1</sub>Im][C<sub>1</sub>COO]. □, SANTOS *et al.* (2016); ○, Nebig e Gmehling (2010); △, Musial *et al.* (2019); ▽, Zec *et al.* (2015); ◇ e ◁, Gonzalez, Gonzalez e Macedo (2013); ▷, Królikowska, Zawadzki e Królikowski (2014); ○, Shiflett e Yokozeki (2009); ☆, Yokozeki *et al.* (2008); ◊, Yang *et al.* (2019); ▣, Rosenboome, Afzal e Prausnitz (2012); +, Zhang *et al.* (2017). --- Representa o ponto zero; --- Desvio padrão.

## 4.2 Propriedades derivativas

O conjunto de dados sumarizados no Apêndice A foram correlacionados com o auxílio da equação de Tammann-Tait. As Tabelas 4-6 mostram os coeficientes ajustáveis obtidos para as Equações (1) e (2) para cada conjunto de líquidos iônicos. As Tabelas 7-9 mostram os parâmetros utilizados na Equação (3), o desvio padrão, e o desvio médio relativo absoluto (%DMRA) para cada líquido iônico avaliado. Esses coeficientes foram utilizados para a determinação da densidade calculada (Apêndice B) e suas propriedades derivadas.

Tabela 4 - Coeficientes utilizados para determinação da densidade de referência ([NTf<sub>2</sub>])

IL	$a_0$ (kg·m <sup>-3</sup> )	$a_1$ (kg·m <sup>-3</sup> ·K <sup>-1</sup> )	$a_2 \cdot 10^4$ (kg·m <sup>-3</sup> ·K <sup>-2</sup> )
[(C <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> S][NTf <sub>2</sub> ]	1786,91	-1,24	4,63
[C <sub>3</sub> C <sub>1</sub> C <sub>1</sub> Im][NTf <sub>2</sub> ]	1781,28	-1,24	4,72
[C <sub>3</sub> C <sub>1</sub> Pyr][NTf <sub>2</sub> ]	1726,71	-1,12	3,58
[C <sub>4</sub> C <sub>1</sub> C <sub>1</sub> Im][NTf <sub>2</sub> ]	1728,68	-1,17	3,94

**Fonte:** Elaborado pelo autor (2022).

Tabela 5 - Coeficientes utilizados para determinação da densidade de referência ([I])

IL	$a_0$ (kg·m <sup>-3</sup> )	$a_1$ (kg·m <sup>-3</sup> ·K <sup>-1</sup> )	$a_2 \cdot 10^4$ (kg·m <sup>-3</sup> ·K <sup>-2</sup> )
[C <sub>4</sub> C <sub>1</sub> Im][I]	1768,31	-1,10	5,02
[C <sub>6</sub> C <sub>1</sub> Im][I]	1658,07	1,09	5,39
[C <sub>3</sub> C <sub>1</sub> Im][I]	1787,90	0,89	1,38

**Fonte:** Elaborado pelo autor (2022).

Tabela 6 - Coeficientes utilizados para a densidade de referência (sem similaridade)

IL	$a_0$ (kg·m <sup>-3</sup> )	$a_1$ (kg·m <sup>-3</sup> ·K <sup>-1</sup> )	$a_2 \cdot 10^4$ (kg·m <sup>-3</sup> ·K <sup>-2</sup> )
[C <sub>8</sub> C <sub>1</sub> Im][OTF]	1442,14	-0,99	3,70
[C <sub>4</sub> C <sub>1</sub> Pyr][DCA]	1214,25	-0,72	2,56
[C <sub>2</sub> C <sub>1</sub> Im][C <sub>1</sub> COO]	1296,16	-0,73	1,93

**Fonte:** Elaborado pelo autor (2022).

Tabela 7 - Coeficientes ajustáveis utilizados na Equação (3), parâmetro independente da temperatura utilizado na Equação (1), e desvio padrão e desvio médio relativo absoluto ([NTf<sub>2</sub>])

IL	$b_0$ (MPa)	$b_1 \cdot 10^{-4}$ (MPa·K)	$c$	$\sigma$ (kg/m <sup>3</sup> )	%DMRA (%)
[(C <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> S][NTf <sub>2</sub> ]	-47,69	6,35	0,084	0,163	0,0085
[C <sub>3</sub> C <sub>1</sub> C <sub>1</sub> Im][NTf <sub>2</sub> ]	-52,60	6,98	0,087	0,133	0,0065
[C <sub>3</sub> C <sub>1</sub> PyR][NTf <sub>2</sub> ]	-35,41	6,43	0,089	0,277	0,0131
[C <sub>4</sub> C <sub>1</sub> C <sub>1</sub> Im][NTf <sub>2</sub> ]	-57,42	7,19	0,090	0,099	0,0053

Fonte: Elaborado pelo autor (2022).

Tabela 8 - Coeficientes ajustáveis utilizados na Equação (3), parâmetro independente da temperatura utilizado na Equação (1), e desvio padrão e desvio médio relativo absoluto ([I])

IL	$b_0$ (MPa)	$b_1 \cdot 10^{-4}$ (MPa·K)	$c$	$\sigma$ (kg/m <sup>3</sup> )	%DMRA (%)
[C <sub>4</sub> C <sub>1</sub> Im][I]	0,63	8,85	0,11	0,13	0,0065 %
[C <sub>6</sub> C <sub>1</sub> Im][I]	-9,31	8,15	0,10	0,14	0,0080 %
[C <sub>3</sub> C <sub>1</sub> Im][I]	60,49	8,10	0,11	0,58	0,0248 %

Fonte: Elaborado pelo autor (2022).

Tabela 9 - Coeficientes ajustáveis utilizados na Equação (3), parâmetro independente da temperatura utilizado na Equação (1), e desvio padrão e desvio médio relativo absoluto (sem similaridade)

IL	$b_0$ (MPa)	$b_1 \cdot 10^{-4}$ (MPa·K)	$c$	$\sigma$ (kg/m <sup>3</sup> )	%DMRA (%)
[C <sub>8</sub> C <sub>1</sub> Im][OTF]	-51,16	6,43	0,08	0,13	0,0076
[C <sub>4</sub> C <sub>1</sub> PyR][DCA]	-0,88	12,51	0,14	0,35	0,0219
[C <sub>2</sub> C <sub>1</sub> Im][C <sub>1</sub> COO]	-19,17	8,31	0,09	0,01	0,0081

Fonte: Elaborado pelo autor (2022).

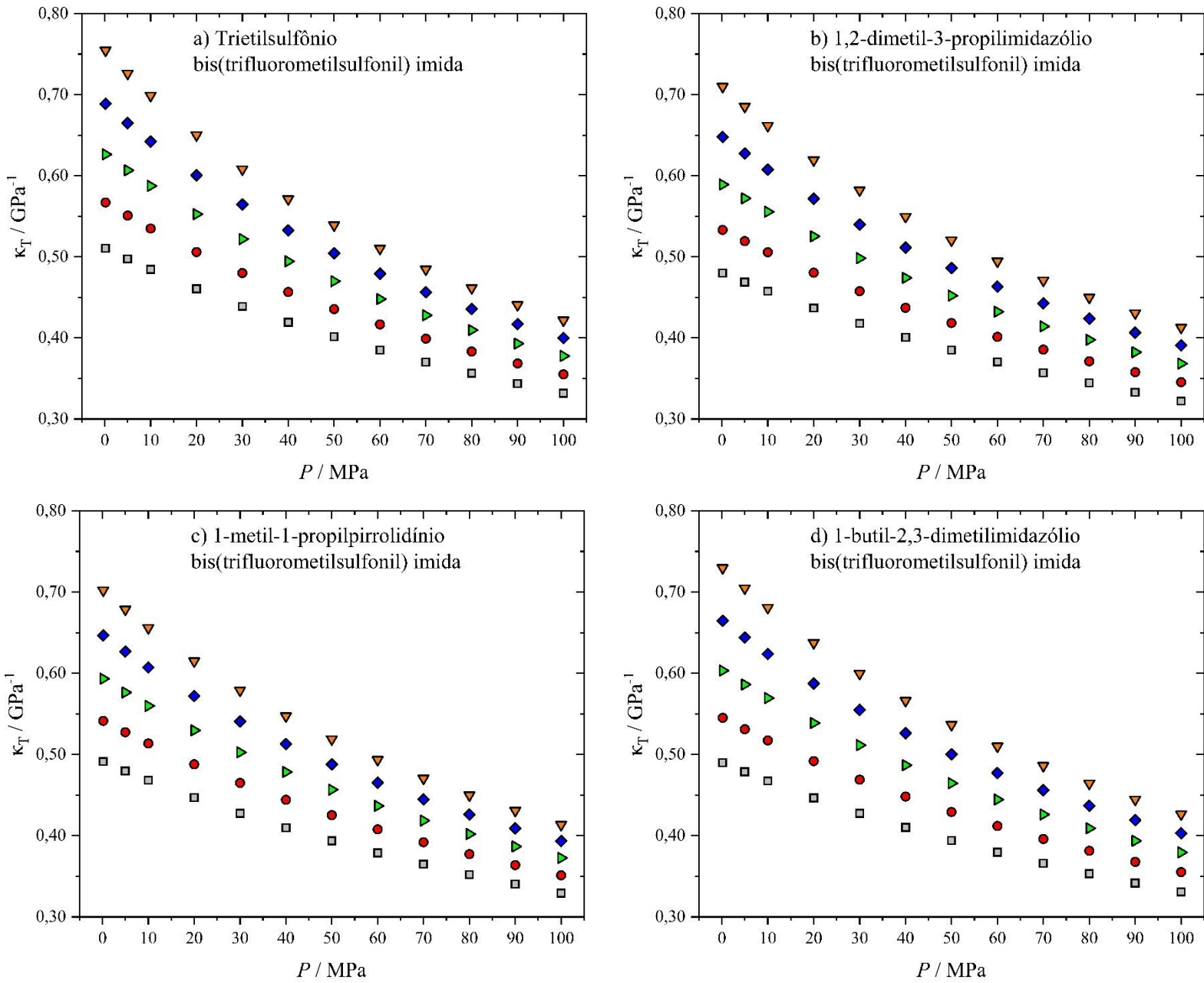
A partir da utilização da Equação (6), tornou-se possível a compreensão do comportamento da compressibilidade isotérmica ( $\kappa_T$ ) frente a variações de pressão em diferentes temperaturas. O Apêndice C reúne os valores obtidos para esta propriedade. As Figuras 27-29 exibem a influência da pressão sobre a compressibilidade isotérmica. A partir da análise dessas figuras, observa-se líquidos iônicos avaliados neste trabalho apresentaram o mesmo padrão em função da variação de pressão e temperatura. A compressibilidade isotérmica decresce com o aumento da pressão e aumenta com o aumento da temperatura, como esperado. Vale salientar que graças à composição dos LIs, estes apresentam menores valores de compressibilidade quando comparados com solventes convencionais. Este resultado pode estar associado a menor flexibilidade estrutural causada pelas interações de Coulomb entre os íons (GU; BRENNECKE, 2002; NIETO DE CASTRO *et al.*, 2021).

Resultados similares aos aqui apresentados para os LIs com similaridade do ânion [NTf<sub>2</sub>] foram reportados por Gardas *et al.* (2008) para [C<sub>3</sub>C<sub>1</sub>Pyr][NTf<sub>2</sub>] e Gaciño *et al.* (2015) para [C<sub>4</sub>C<sub>1</sub>C<sub>1</sub>Im][NTf<sub>2</sub>] com desvio médio relativo absoluto em relação aos dados aqui determinados de 0,05 e 0,81 %, respectivamente. Sumarizando, nota-se que a compressibilidade isotérmica decresce em concordância com o efeito de empacotamento estrutural na seguinte sequência: [C<sub>3</sub>C<sub>1</sub>C<sub>1</sub>Im][NTf<sub>2</sub>] < [C<sub>3</sub>C<sub>1</sub>Pyr][NTf<sub>2</sub>] < [C<sub>4</sub>C<sub>1</sub>C<sub>1</sub>Im][NTf<sub>2</sub>] < [(C<sub>2</sub>)<sub>3</sub>S][NTf<sub>2</sub>].

A Figura 28 apresenta o comportamento da compressibilidade isotérmica ( $\kappa_T$ ) para os LI com similaridade do ânion [I]. A compressibilidade isotérmica apresentou comportamento inverso ao da densidade. Em linhas gerais, a compressibilidade cresceu na seguinte ordem: [C<sub>3</sub>C<sub>1</sub>Im][I] < [C<sub>4</sub>C<sub>1</sub>Im][I] < [C<sub>6</sub>C<sub>1</sub>Im][I]. Assume-se esse comportamento pode ser relacionado à menor flexibilidade estrutural desses componentes decorrentes das interações intermoleculares que ocorrem na estrutura.

A Figura 29 apresenta a compressibilidade isotérmica para os líquidos iônicos sem similaridade estrutural direta. A compressibilidade isotérmica apresentou dois comportamentos distintos dependentes da pressão analisada: 1) até 50,0 MPa, [C<sub>4</sub>C<sub>1</sub>Pyr][DCA] < [C<sub>2</sub>C<sub>1</sub>Im][C<sub>1</sub>COO] < [C<sub>8</sub>C<sub>1</sub>Im][OTF]; e, 2) de 60,0 até 100,0 MPa, [C<sub>2</sub>C<sub>1</sub>Im][C<sub>1</sub>COO] < [C<sub>4</sub>C<sub>1</sub>Pyr][DCA] < [C<sub>8</sub>C<sub>1</sub>Im][OTF]. Essa diferença pode ser atribuída ao tamanho da cadeia alquil do cátion, causado devido os espaços livres nas estruturas dos líquidos iônicos, como reportado por Sas *et al.* (2018). A compressibilidade isotérmica foi aproximadamente igual para os LIs [C<sub>2</sub>C<sub>1</sub>Im][C<sub>1</sub>COO] e [C<sub>4</sub>C<sub>1</sub>Pyr][DCA], fazendo com que a inversão seja negligenciável.

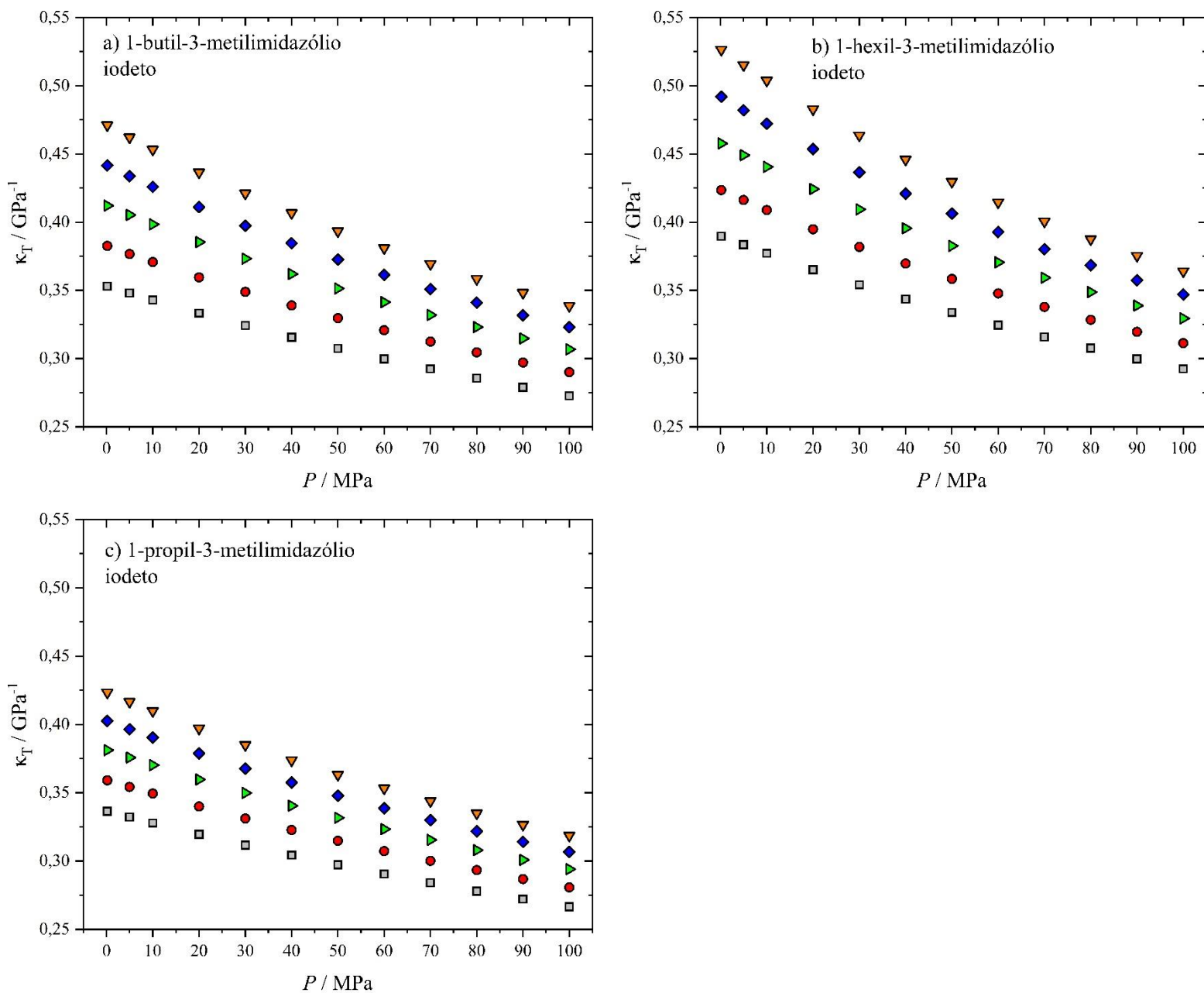
Figura 27 - Comportamento da compressibilidade isotérmica com a pressão



Fonte: Elaborado pelo autor (2022).

Legenda:  $\square$  298,15 K;  $\bullet$  323,15 K;  $\blacktriangle$  348,15 K;  $\blacklozenge$  373,15 K;  $\blacktriangledown$  398,15 K.

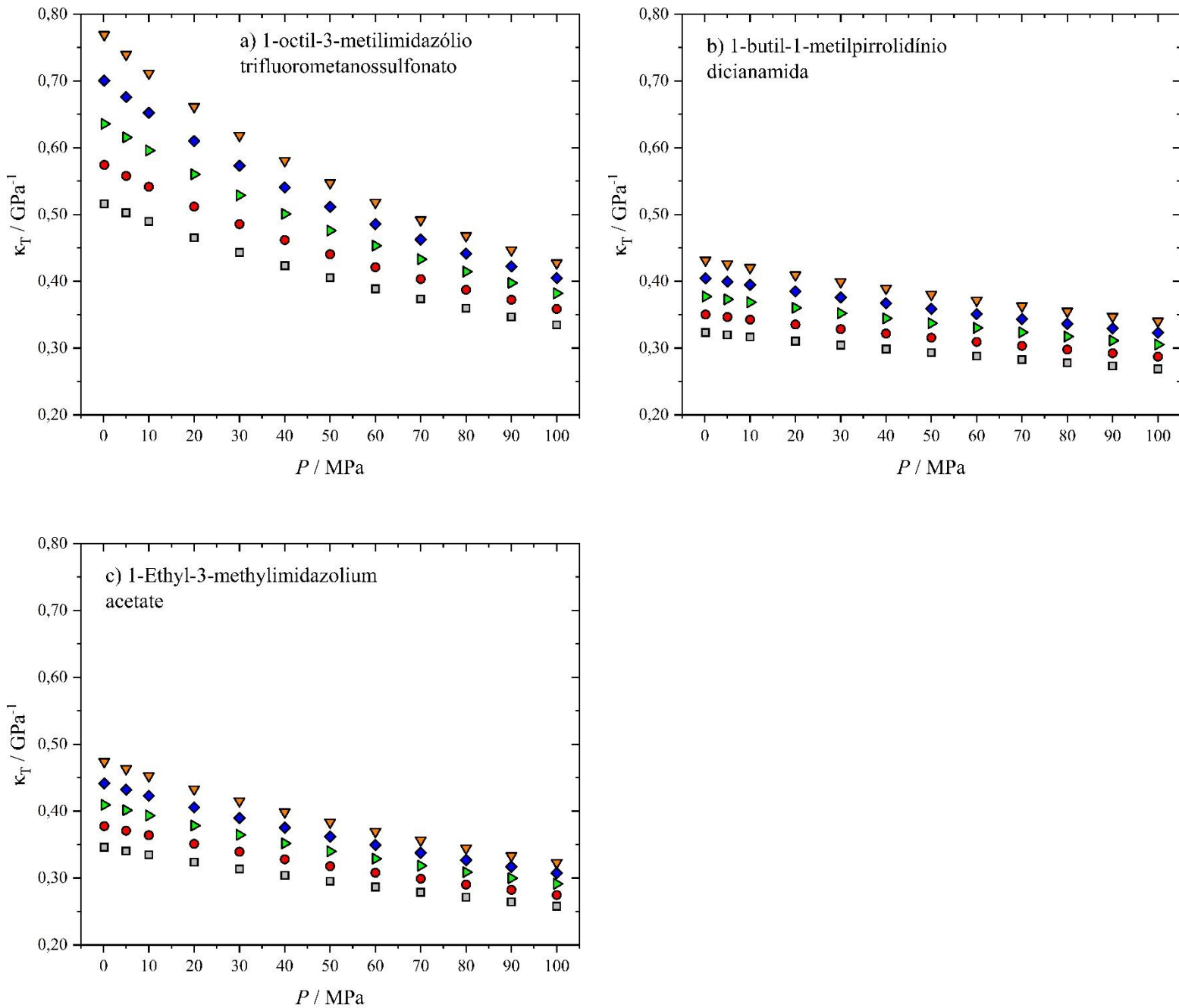
Figura 28 - Compressibilidade isotérmica para os LIs com ânion [I]



Fonte: Elaborado pelo autor (2022).

Legenda:  $\square$  298,15 K;  $\bullet$  323,15 K;  $\blacktriangleright$  348,15 K;  $\blacklozenge$  373,15 K;  $\blacktriangledown$  398,15 K.

Figura 29 - Densidade experimental para os LIs sem relação estrutural direta



**Fonte:** Elaborado pelo autor (2022).

Legenda:  $\square$  298,15 K;  $\bullet$  323,15 K;  $\blacktriangle$  348,15 K;  $\blacklozenge$  373,15 K;  $\blacktriangledown$  398,15 K.

A expansividade isobárica ( $\alpha_p$ ) foi determinada utilizando a Equação (7), cujo valores calculados são apresentados no Apêndice D. As Figuras 30-32 exibem o efeito da pressão sobre a expansividade. Constatou-se a diminuição da expansividade isobárica à medida que a pressão e a temperatura do sistema aumenta para todos os líquidos iônicos avaliados com exceção do  $[\text{C}_3\text{C}_1\text{Im}][\text{I}]$ , que aumentou com o aumento da temperatura.

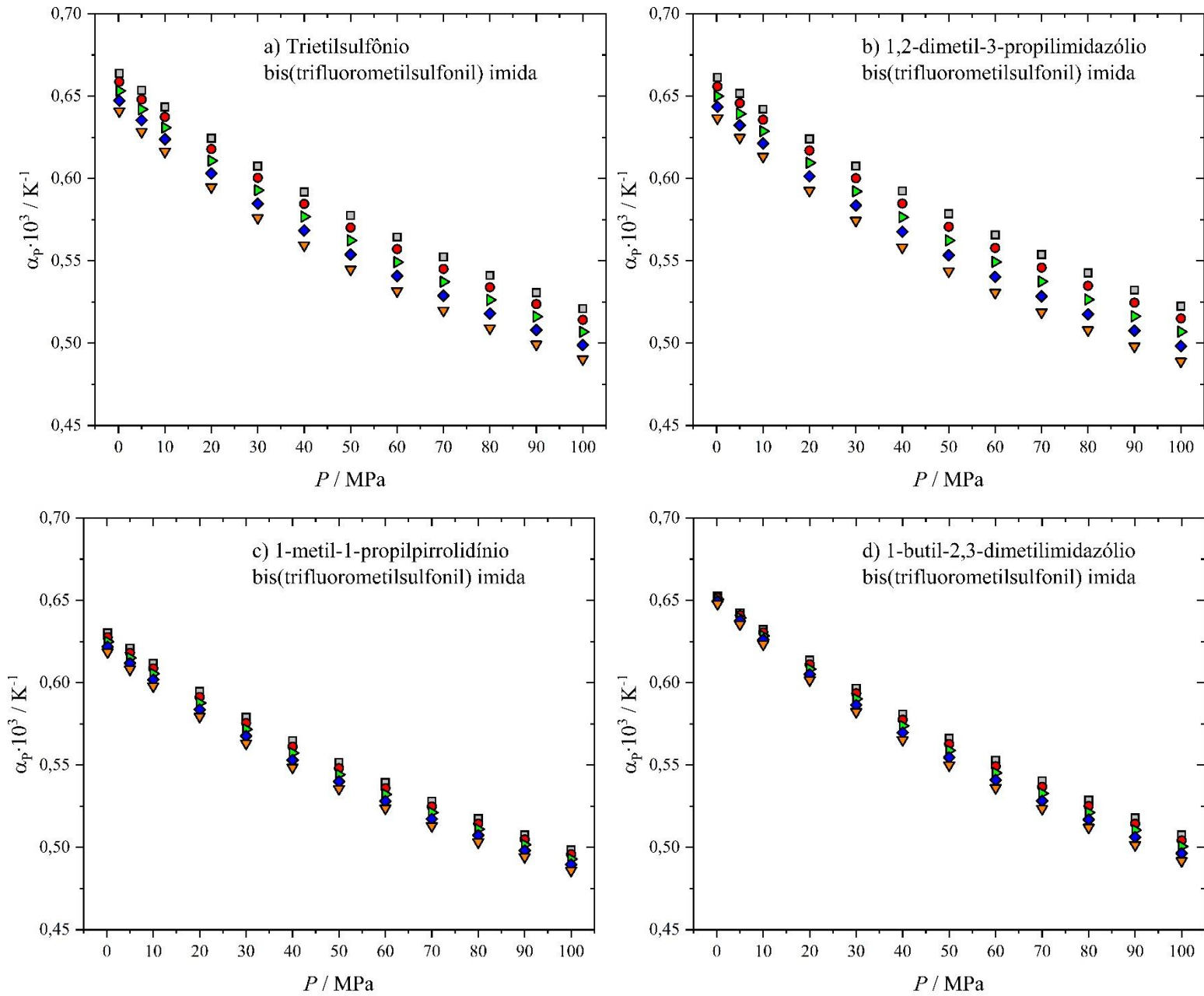


A partir da Figura 30 exibe o comportamento da expansividade isobárica para os líquidos iônicos com similaridade do ânion [NTf<sub>2</sub>]. Nota-se que os LIs [(C<sub>2</sub>)<sub>3</sub>S][NTf<sub>2</sub>] e [C<sub>3</sub>C<sub>1</sub>C<sub>1</sub>Im][NTf<sub>2</sub>] são mais sensíveis a mudanças de temperatura que os LIs [C<sub>4</sub>C<sub>1</sub>C<sub>1</sub>Im][NTf<sub>2</sub>] e [C<sub>3</sub>C<sub>1</sub>Pyr][NTf<sub>2</sub>]. A baixa variação da expansividade em diferentes condições experimentais pode indicar que para os líquidos iônicos [C<sub>4</sub>C<sub>1</sub>C<sub>1</sub>Im][NTf<sub>2</sub>] e [C<sub>3</sub>C<sub>1</sub>Pyr][NTf<sub>2</sub>] a variação do cátion tem pouca influência na expansividade isobárica. Da mesma forma que foi observado para a densidade, a expansividade isobárica cresce na seguinte sequência: [C<sub>4</sub>C<sub>1</sub>C<sub>1</sub>Im][NTf<sub>2</sub>] < [C<sub>3</sub>C<sub>1</sub>Pyr][NTf<sub>2</sub>] < [C<sub>3</sub>C<sub>1</sub>C<sub>1</sub>Im][NTf<sub>2</sub>] < [(C<sub>2</sub>)<sub>3</sub>S][NTf<sub>2</sub>]. Um ponto a acrescentar sobre o LI [C<sub>4</sub>C<sub>1</sub>C<sub>1</sub>Im][NTf<sub>2</sub>] é referente aos dados de expansividade isobárica reportados por Gaciño *et al.* (2015), os autores mencionam inversões no comportamento da propriedade para pressões superiores a 45,0 MPa. Neste trabalho não se verificou esse comportamento, isso pode ser justificado pela sensibilidade do ajuste utilizado na obtenção dos coeficientes utilizados na derivada da equação de Tammann-Tait.

O comportamento da expansividade isobárica ( $\alpha_p$ ) para os líquidos iônicos com similaridade do ânion [I] é mostrado na Figura 31. Destacam-se dois padrões: o aumento expansividade com a temperatura para os LIs retratados na Figura 31.a e 31.b, e a diminuição com a temperatura para o LI mostrado na Figura 31.c. Para o primeiro ponto, nota-se que o comportamento foi semelhante aos LIs com similaridade no ânion [NTf<sub>2</sub>]. O comportamento inverso apresentado pelo LI [C<sub>3</sub>C<sub>1</sub>Im][I] pode ter relação com o mesmo fator observado por Gaciño *et al.* (2015), que reportaram pontos de inversão no comportamento da expansividade isobárica devido à falta de harmonia vibracional intermolecular das estruturas. Outra explicação estaria relacionada a estruturação entre cátion e ânion com eficiência de empacotamento elevada, predominando forças repulsivas, evidenciando o aumento da sensibilidade da expansividade isobárica em pressões mais elevadas.

O comportamento frente à pressão é exibido na Figura 32 para os líquidos iônicos sem similaridade estrutural direta. A partir desta figura, nota-se que o LI [C<sub>8</sub>C<sub>1</sub>Im][OTF] é mais sensível a mudanças de temperatura que [C<sub>4</sub>C<sub>1</sub>Pyr][DCA] e [C<sub>2</sub>C<sub>1</sub>Im][C<sub>1</sub>COO]. A expansividade isobárica cresceu na seguinte ordem: [C<sub>4</sub>C<sub>1</sub>Pyr][DCA] < [C<sub>2</sub>C<sub>1</sub>Im][C<sub>1</sub>COO] < [C<sub>8</sub>C<sub>1</sub>Im][OTF], exibindo a mesma sequência que a densidade. Apesar da não similaridade entre os LI, poderia ser atribuído a maior expansividade isobárica para o [C<sub>8</sub>C<sub>1</sub>Im][OTF] por conta da maior cadeia alquil ligada ao cátion, o que reduz o efeito das interações eletrostáticas (NEVES *et al.*, 2013). A diferença de  $\alpha_p$  para [C<sub>4</sub>C<sub>1</sub>Pyr][DCA] quando comparado com [C<sub>2</sub>C<sub>1</sub>Im][C<sub>1</sub>COO] pode ser associado à presença de grupos ciano (CN)- no ânion, provocando maior sensibilidade com a temperatura, como descrito por Neves *et al.* (2013).

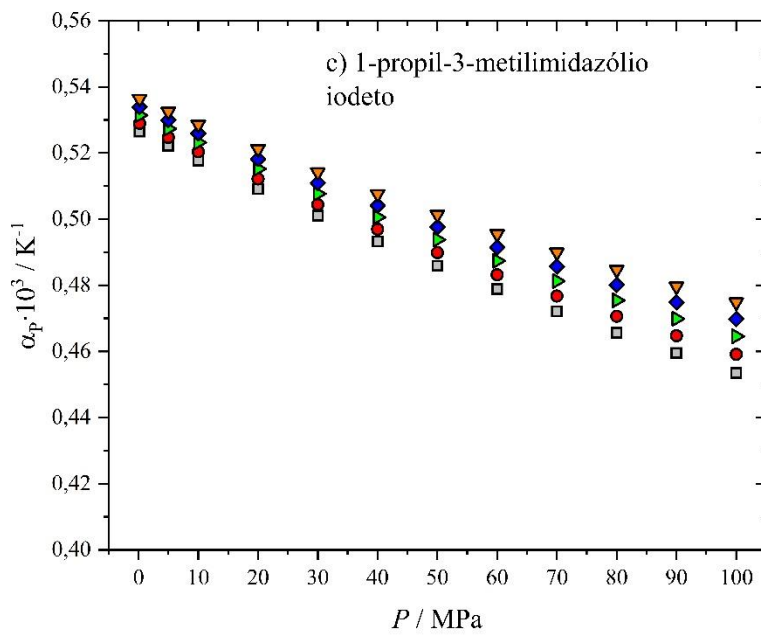
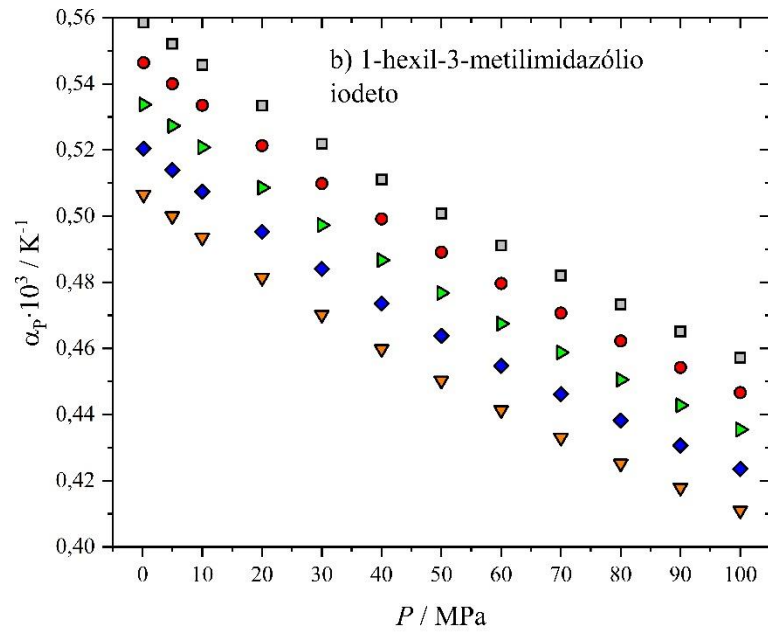
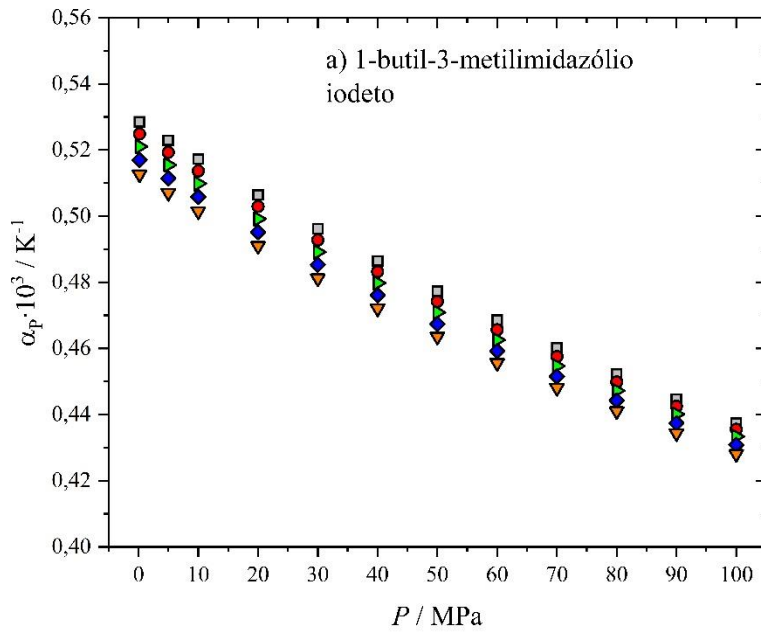
Figura 30 - Comportamento da expansividade isobárica com a pressão



**Fonte:** Elaborado pelo autor (2022).

Legenda:  $\square$  298,15 K;  $\bullet$  323,15 K;  $\blacktriangle$  348,15 K;  $\blacklozenge$  373,15 K;  $\blacktriangledown$  398,15 K.

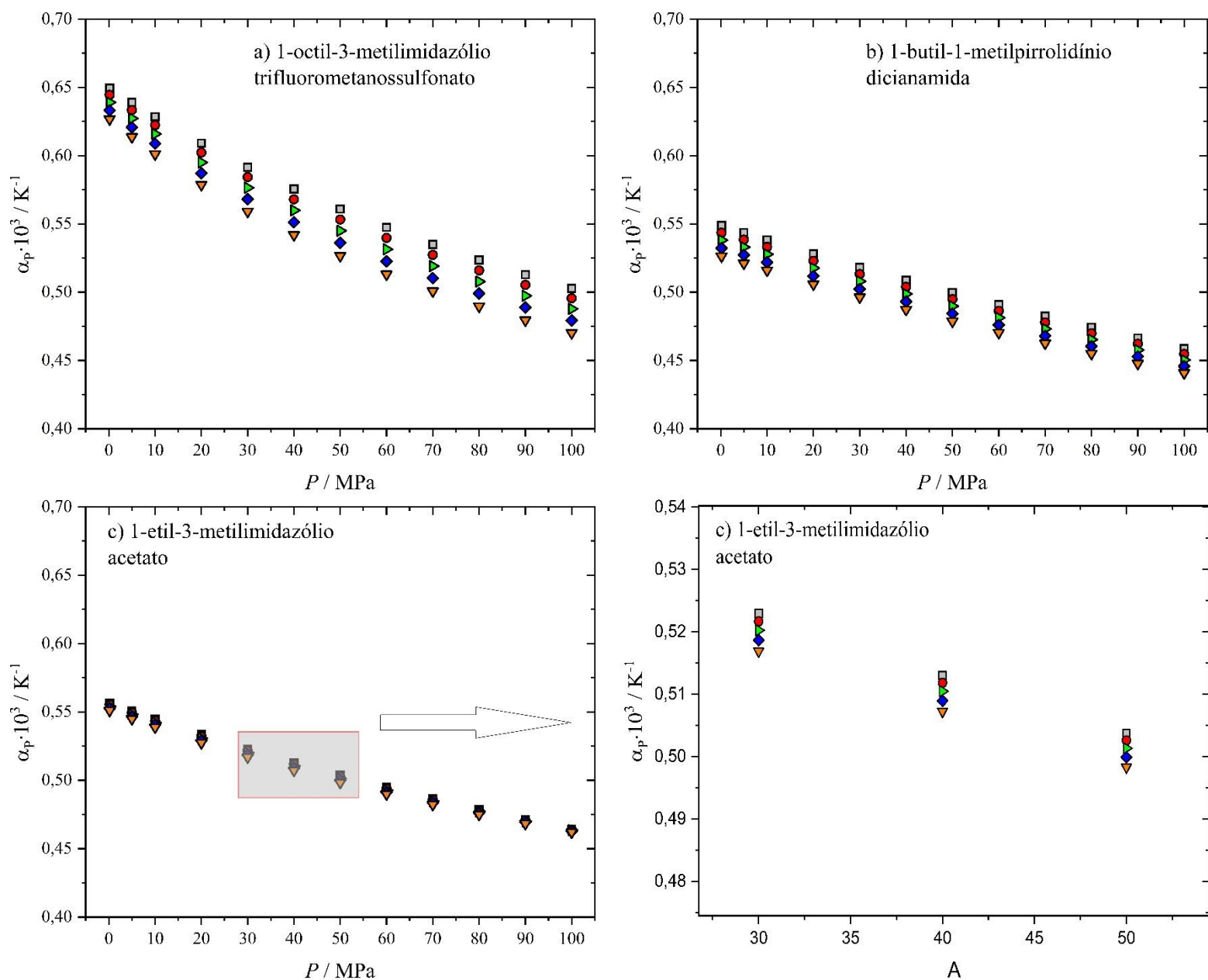
Figura 31 - Expansividade isobárica para os LIs com ânion [I]



Fonte: Elaborado pelo autor (2022).

Legenda:  $\square$  298,15 K;  $\bullet$  323,15 K;  $\blacktriangle$  348,15 K;  $\blacklozenge$  373,15 K;  $\blacktriangledown$  398,15 K.

Figura 32 - Densidade experimental para os LIs sem relação estrutural direta



**Fonte:** Elaborado pelo autor (2022).

Legenda:  $\square$  298,15 K;  $\bullet$  323,15 K;  $\blacktriangle$  348,15 K;  $\blacklozenge$  373,15 K;  $\blacktriangledown$  398,15 K.

O coeficiente de pressão térmica ( $\gamma_v$ ), que é calculado pela razão entre a compressibilidade isotérmica e a expansividade isobárica, decresceu com o aumento da temperatura, e aumentou com o aumento da pressão. Estes dados estão apresentados no Apêndice E.

Por fim, a pressão interna foi calculada utilizando a Equação (9), cujo valores estão reportados no Apêndice F. O comportamento em função da pressão está exibido nas Figuras 33-35.

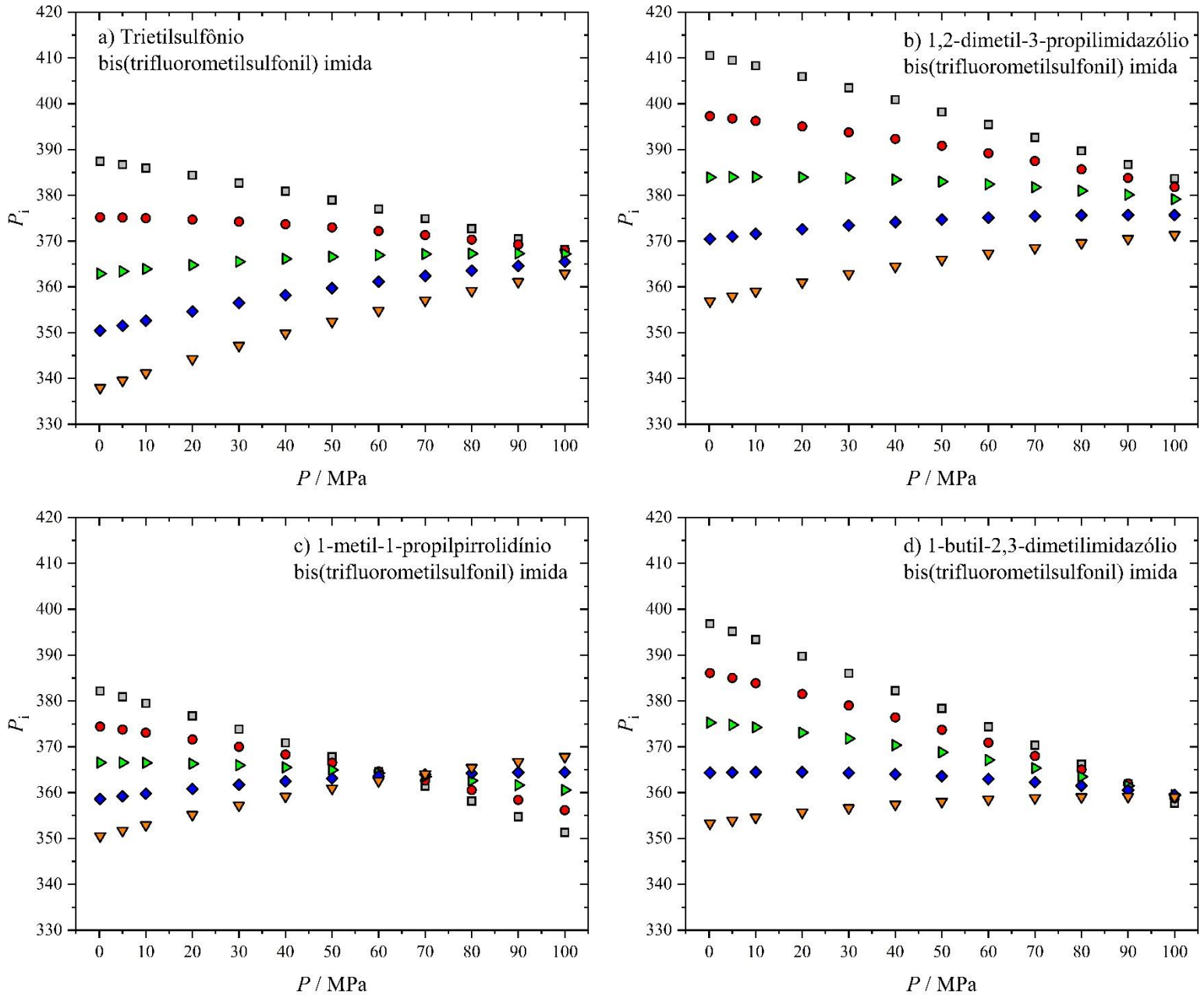
Para os LIs com similaridade do ânion [NTf<sub>2</sub>] observa-se dois comportamentos distintos na Figura 33. Para os LIs [(C<sub>2</sub>)<sub>3</sub>S][NTf<sub>2</sub>] e [C<sub>3</sub>C<sub>1</sub>C<sub>1</sub>Im][NTf<sub>2</sub>], ocorreu uma redução na pressão interna decorrente do aumento da temperatura do sistema para todo intervalo analisado. Já para os LIs [C<sub>3</sub>C<sub>1</sub>Pyr][NTf<sub>2</sub>] e [C<sub>4</sub>C<sub>1</sub>C<sub>1</sub>Im][NTf<sub>2</sub>], o comportamento inicial da pressão interna em conjunto com a pressão foi semelhante aos outros dois líquidos iônicos, porém observa-se uma ponto de inversão de comportamento em  $P = 60,0$  MPa para [C<sub>3</sub>C<sub>1</sub>Pyr][NTf<sub>2</sub>] IL e, aproximadamente,  $P = 90,0$  MPa para [C<sub>4</sub>C<sub>1</sub>C<sub>1</sub>Im][NTf<sub>2</sub>]. Este resultado pode ser relacionado às forças atrativas que estão presentes em baixa pressão. Por outro lado, quando a pressão aumenta, a distância molecular média diminui, como consequência as forças repulsivas predominam no sistema, como reportado por Zorębski, Musiał, Dzida (2019) que avaliaram diversos líquidos iônicos.

A Figura 34 exhibe o comportamento para os LIs com similaridade do ânion [I]. Para o LI representado na Figura 34.a, o ponto de cruzamento observado pode ser atribuído a mudanças na predominância de forças com o aumento da pressão, passando de forças atrativas em baixas pressões, para forças repulsivas em alta. O LI da Figura 34.b mostra tendência de seguir o mesmo padrão, de forma hipotética, pode-se assumir que em pressões operacionais superiores ao avaliado no trabalho, o ponto de inversão do comportamento também seria verificado. Já para o LI mostrado na Figura 34.c, verifica-se que a pressão interna aumenta com a temperatura e diminui com a pressão, comportamento inverso aos outros líquidos iônicos avaliados. Por conta do comportamento semelhante à expansividade isobárica, assume-se que a proximidade estrutural entre cátion e ânion causa predominância de forças repulsivas, sendo refletido no aumento da pressão interna com a temperatura.

A Figura 35 exhibe o comportamento para os LIs sem similaridade estrutural. Observa-se uma inversão no comportamento de  $P_i$  com o aumento da pressão para os LIs [C<sub>4</sub>C<sub>1</sub>Pyr][DCA] e [C<sub>2</sub>C<sub>1</sub>Im][C<sub>1</sub>COO], em 70,0 e 30,0 MPa, respectivamente. Este comportamento pode ser atribuído à predominância de forças atrativas em baixa pressão nestes sistemas. Quando a pressão aumenta, as ligações de hidrogênio e as forças repulsivas causadas pela diminuição da distância molecular média são responsáveis pela mudança no comportamento da pressão interna. A respeito do líquido iônico [C<sub>8</sub>C<sub>1</sub>Im][OTF], o ponto de cruzamento não pode ser observado para a faixa de pressão estudada. No entanto, pode-se assumir a partir da

tendência observada na Figura 34.a que o ponto de cruzamento poderia ocorrer em condições operacionais de pressão maiores que 100,0 MPa.

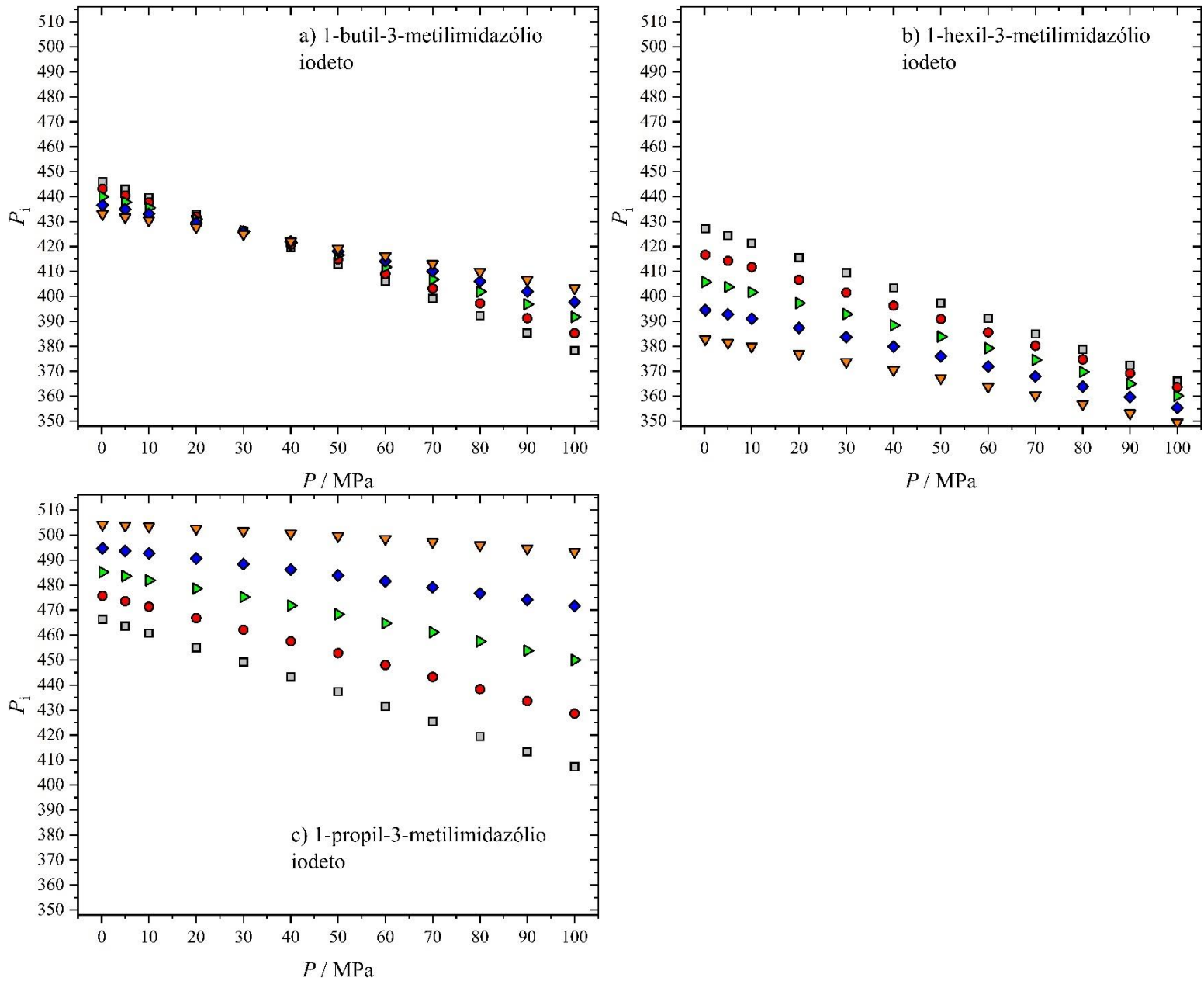
Figura 33 - Comportamento da pressão interna para os LIs com ânion [NTf<sub>2</sub>]



Fonte: Elaborado pelo autor (2022).

Legenda:  $\square$  298,15 K;  $\bullet$  323,15 K;  $\blacktriangle$  348,15 K;  $\blacklozenge$  373,15 K;  $\blacktriangledown$  398,15 K.

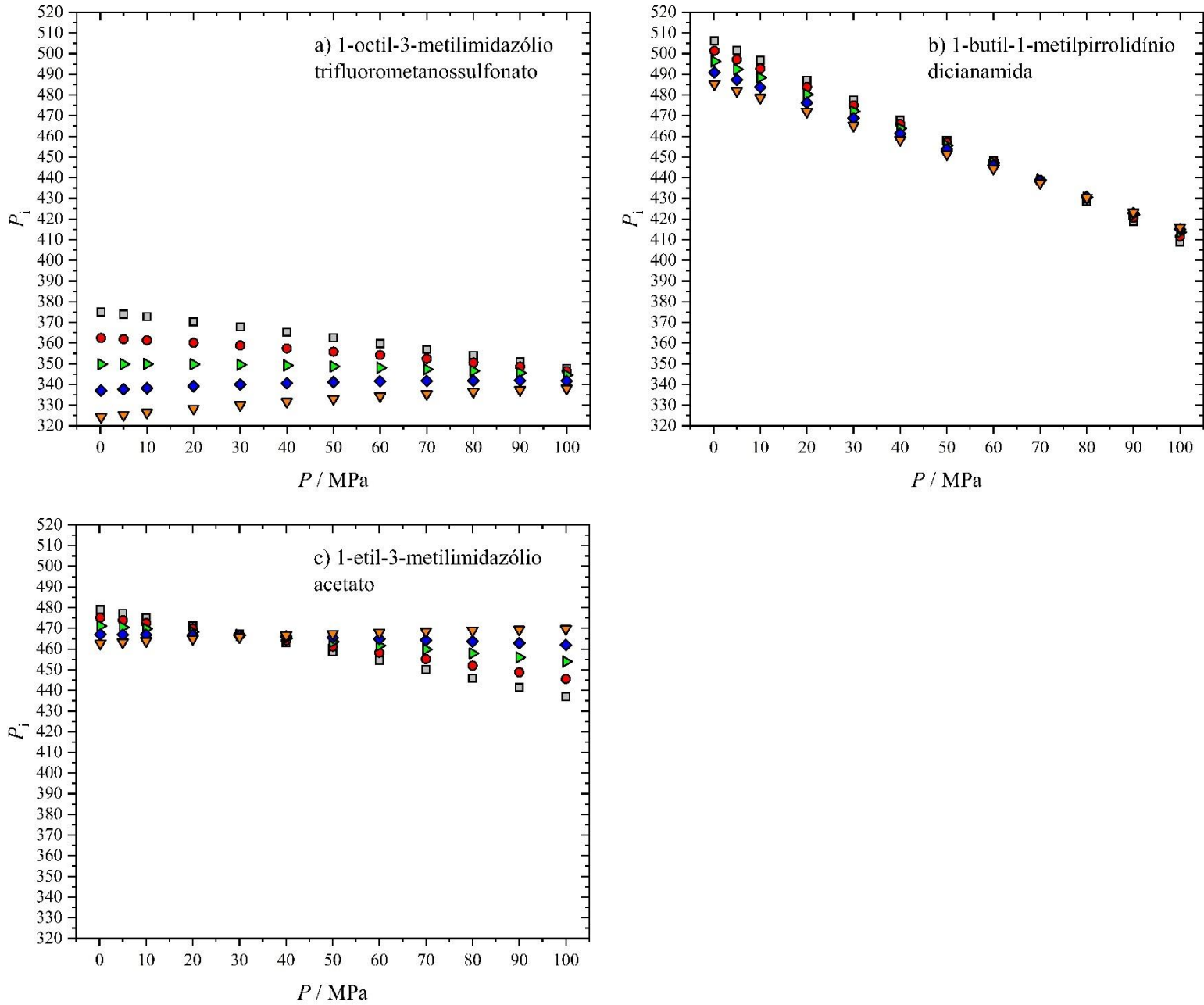
Figura 34 - Comportamento da pressão interna para os LIs com ânion [I]



Fonte: Elaborado pelo autor (2022).

Legenda: □ 298,15 K; ● 323,15 K; ▲ 348,15 K; ◆ 373,15 K; ▼ 398,15 K.

Figura 35 - Comportamento da pressão interna para LIs sem similaridade estrutural



Fonte: Elaborado pelo autor (2022).

Legenda:  $\square$  298,15 K;  $\bullet$  323,15 K;  $\blacktriangle$  348,15 K;  $\blacklozenge$  373,15 K;  $\blacktriangledown$  398,15 K.



### 4.3 Densidade estimada utilizando modelos de contribuição de grupos

Sete modelos de contribuição de grupos foram utilizados para estimar a densidade dos líquidos iônicos avaliados. O processo de estimar a densidade foi realizado de acordo com os modelos propostos por Evangelista *et al.* (2014), Gardas e Coutinho (2008), Jacquemin *et al.* (2008b, 2008a), Qiao *et al.* (2010), Lazzús (2010), Paduszyński e Domańska (2012), e Taherifard e Raeissi (2016). As Tabelas 10-12 apresentam o desvio médio relativo absoluto obtido para cada modelo aplicado quando comparado com a densidade determinada experimentalmente. O Apêndice G apresenta os valores das densidades estimadas para cada modelo.

Tabela 10 - Desvio médio relativo absoluto para cada modelo avaliando o ânion [NTf<sub>2</sub>]

Modelo	Líquidos iônicos			
	[(C <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> S][NTf <sub>2</sub> ]	[C <sub>3</sub> C <sub>1</sub> C <sub>1</sub> Im][NTf <sub>2</sub> ]	[C <sub>3</sub> C <sub>1</sub> Pyr][NTf <sub>2</sub> ]	[C <sub>4</sub> C <sub>1</sub> C <sub>1</sub> Im][NTf <sub>2</sub> ]
	%DMRA			
Evangelista <i>et al.</i> (2014)	x	0,79 %	0,30 %	0,71 %
Gardas e Coutinho (2008)	x	2,21 %	0,99 %	1,96 %
Jacquemin <i>et al.</i> (2008b, 2008a)	x	o	0,37 %	2,15 %
Qiao <i>et al.</i> (2010)	x	4,63 %	3,76 %	4,86 %
Lazzús (2010)	4,79 %	0,85 %	1,16 %	0,84 %
Paduszyński e Domańska (2012)	3,39 %	0,29 %	0,17 %	0,21 %
Taherifard e Raeissi (2016)	0,68 %	1,04 %	0,57 %	0,92 %

x: Método não aplicado devido a estrutura do cátion não ter sido avaliada no modelo. o: Falta de parâmetros para as condições avaliadas.

**Fonte:** Elaborado pelo autor (2022).

Tabela 11 - Desvio médio relativo absoluto para cada modelo avaliando o ânion [I]

Modelo	Líquidos iônicos		
	[C <sub>4</sub> C <sub>1</sub> Im][I]	[C <sub>6</sub> C <sub>1</sub> Im][I]	[C <sub>3</sub> C <sub>1</sub> Im][I]
%DMRA			
Evangelista <i>et al.</i> (2014)	3,42%	2,58%	2,75%
Gardas e Coutinho (2008)	x	x	x
Jacquemin <i>et al.</i> (2008b, 2008a)	x	x	x
Qiao <i>et al.</i> (2010)	x	x	x
Lazzús (2010)	12,84%	10,26%	16,04%
Paduszyński e Domańska (2012)	1,09%	0,89%	0,28%
Taherifard e Raeissi (2016)	3,25%	2,88%	2,28%

x: Método não aplicado devido a estrutura do cátion não ter sido avaliada no modelo. o: Falta de parâmetros para as condições avaliadas.

**Fonte:** Elaborado pelo autor (2022).

Tabela 12 - Desvio médio relativo absoluto para cada modelo avaliando LIs sem similaridade

Modelo	Líquidos iônicos		
	[C <sub>8</sub> C <sub>1</sub> Im][OTF]	[C <sub>4</sub> C <sub>1</sub> Pyr][DCA]	[C <sub>2</sub> C <sub>1</sub> Im][C <sub>1</sub> COO]
%DMRA			
Evangelista <i>et al.</i> (2014)	1,03 %	0,42 %	1,41 %
Gardas e Coutinho (2008)	1,49 %	8,72 %	3,16 %
Jacquemin <i>et al.</i> (2008b, 2008a)	x	x	x
Qiao <i>et al.</i> (2010)	0,51 %	5,49 %	21,60 %
Lazzús (2010)	2,01 %	5,73 %	2,72 %
Paduszyński e Domańska (2012)	0,56 %	0,25 %	1,58 %
Taherifard e Raeissi (2016)	2,07 %	1,76 %	4,06 %

x: Método não aplicado devido a estrutura do cátion não ter sido avaliada no modelo. o: Falta de parâmetros para as condições avaliadas.

**Fonte:** Elaborado pelo autor (2022).

Dos modelos avaliados, Evangelista *et al.* (2014), Gardas e Coutinho (2008), Jacquemin *et al.* (2008b, 2008a) e Qiao *et al.* (2010) não conseguiram estimar a densidade para o líquido iônico trietilsulfônio bis(trifluorometilsulfonil) imida  $[(C_2)_3S][NTf_2]$ , devido ao banco de dados não apresentar o cátion trietilsulfônio. Assim como os modelos propostos por Gardas e Coutinho (2008) e Qiao *et al.* (2010) não apresentaram no banco de dados o ânion [I] para que fosse possível estimar a densidade dos LIs com essa estrutura.

Entre os modelos propostos, o trabalho realizado por Paduszyński e Domańska (2012) apresentou a maior exatidão na densidade estimada quando comparado com os dados experimentais. Isto pode ser reflexo de um conjunto de fatores, como: banco de dados mais compreensivo e mais bem refinado, complexidade da equação utilizada para estimar a densidade e maior possibilidades de montagem de LIs, devido a separação dos grupos adotada pelos autores considerar as menores unidades representativas da estrutura, diferenciando cátions, ânions e grupos moleculares.

As Figuras 36-38 ilustram o desvio relativo entre a densidade experimental e a estimada por meio dos modelos de contribuição de grupos. Para os desvios relativos, calculados pela diferença entre a densidade calculada e experimental dividido pela densidade experimental, acima da linha vermelha, os modelos subestimam os valores de densidade. Já os valores que estão abaixo da linha vermelha representam uma superestimação da densidade. O entendimento desse comportamento é necessário do ponto de vista operacional, já que indica a proximidade do valor estimado com o real.

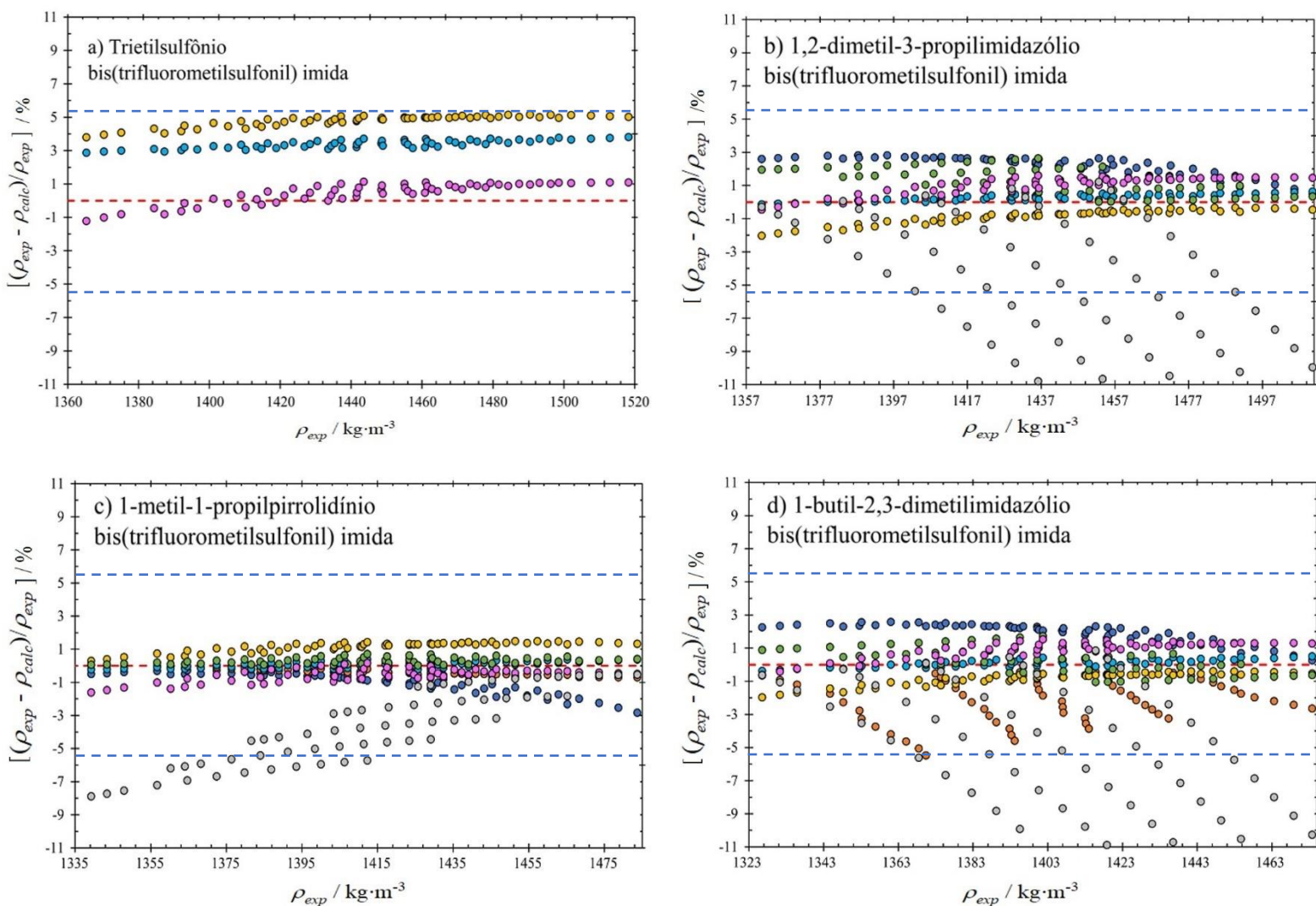
Para os LIs com similaridade do ânion  $[NTf_2]$ , nota-se pela Figura 36 que, com exceção de Qiao *et al.* (2010), todos os modelos apresentaram distribuição de desvios aleatórios com valor máximo, em módulo, de aproximadamente 5,5%.

Já na Figura 37, referente aos líquidos iônicos com similaridade no ânion [I], a linha de referência para subestimar ou superestimar não foi utilizada por conta de todos os modelos, exceto Lazzús (2010), subestimarem a densidade, com desvio máximo de aproximadamente 5,0%. Os desvios médios absolutos foram maiores que os avaliados para o ânion  $[NTf_2]$ , isso pode ser reflexo da escassez de dados experimentais para compostos com ânion [I], prejudicando o ajuste adequado dos parâmetros utilizados nos métodos de contribuição de grupos.

A Figura 38 apresenta o comportamento da densidade em função do desvio relativo para os LI sem similaridade estrutural direta. Nota-se que o modelo proposto por Qiao *et al.* (2010) não é mostrado na Figura 38.c por conta dos valores estarem desproporcionais em relação aos outros modelos avaliados, decorrente da alta imprecisão da estimativa da densidade. Para este LI a maior parte dos desvios foi menor, em módulo, que 6,0%.

De forma geral, para os líquidos iônicos aqui reportados, o modelo proposto por Padaszyński e Domańska (2012) destacou-se na predição da densidade dos líquidos iônicos. Porém, todos os modelos avaliados se apresentam como boas alternativas para estimação da densidade dos LIs avaliados.

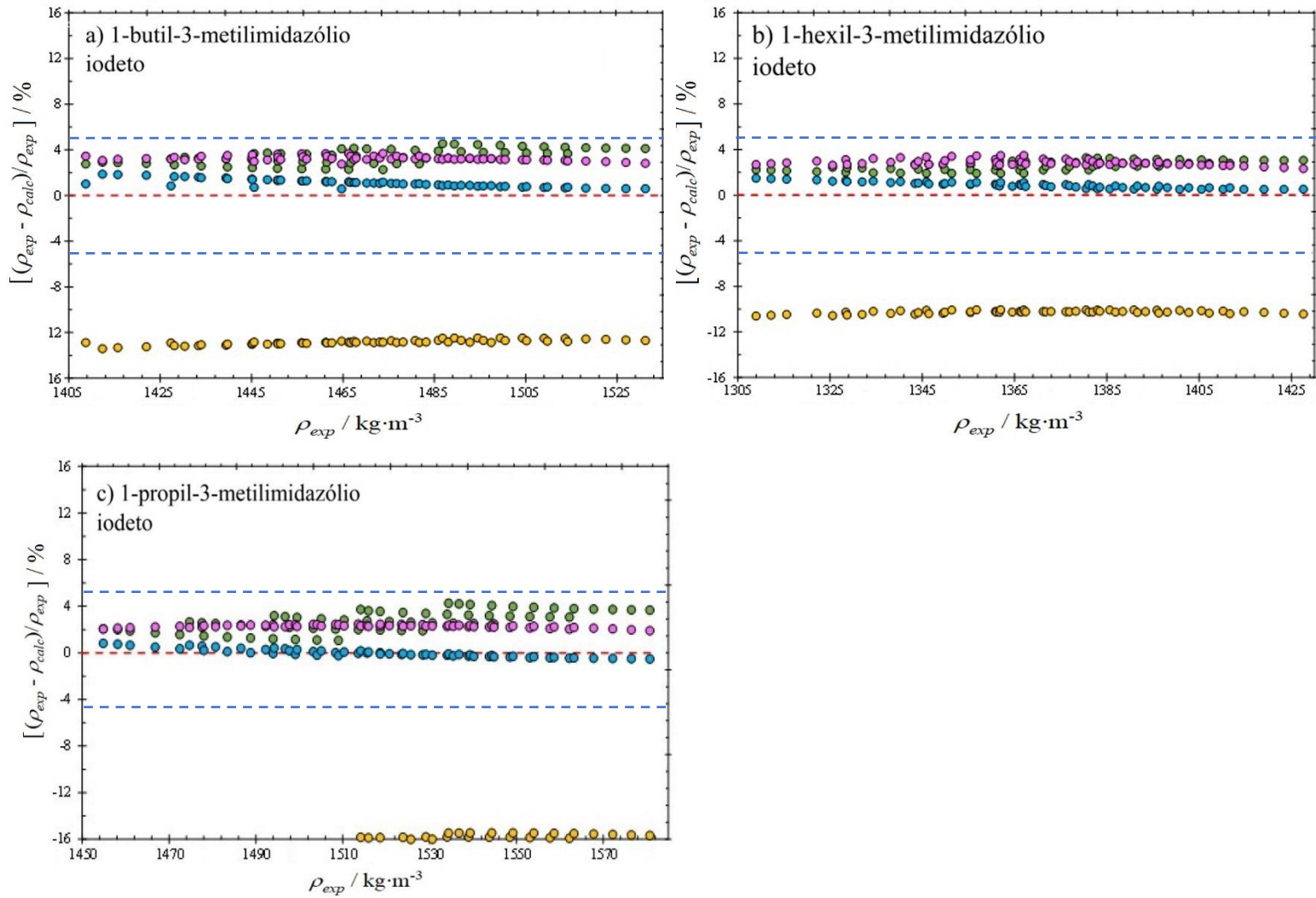
Figura 36 - Comportamento da densidade com o desvio relativo



**Fonte:** Elaborado pelo autor (2022).

Legenda: ●, Evangelista *et al.* (2014); ●, Gardas e Coutinho (2008); ●, Jacquemin *et al.* (2008b, 2008a); ●, Lazzús (2010); ○, Qiao *et al.* (2010); ●, Padaszynski e Domanska (2012); ●, Taherifard e Raeissi (2016); --- representa o ponto zero, --- representa o desvio máximo.

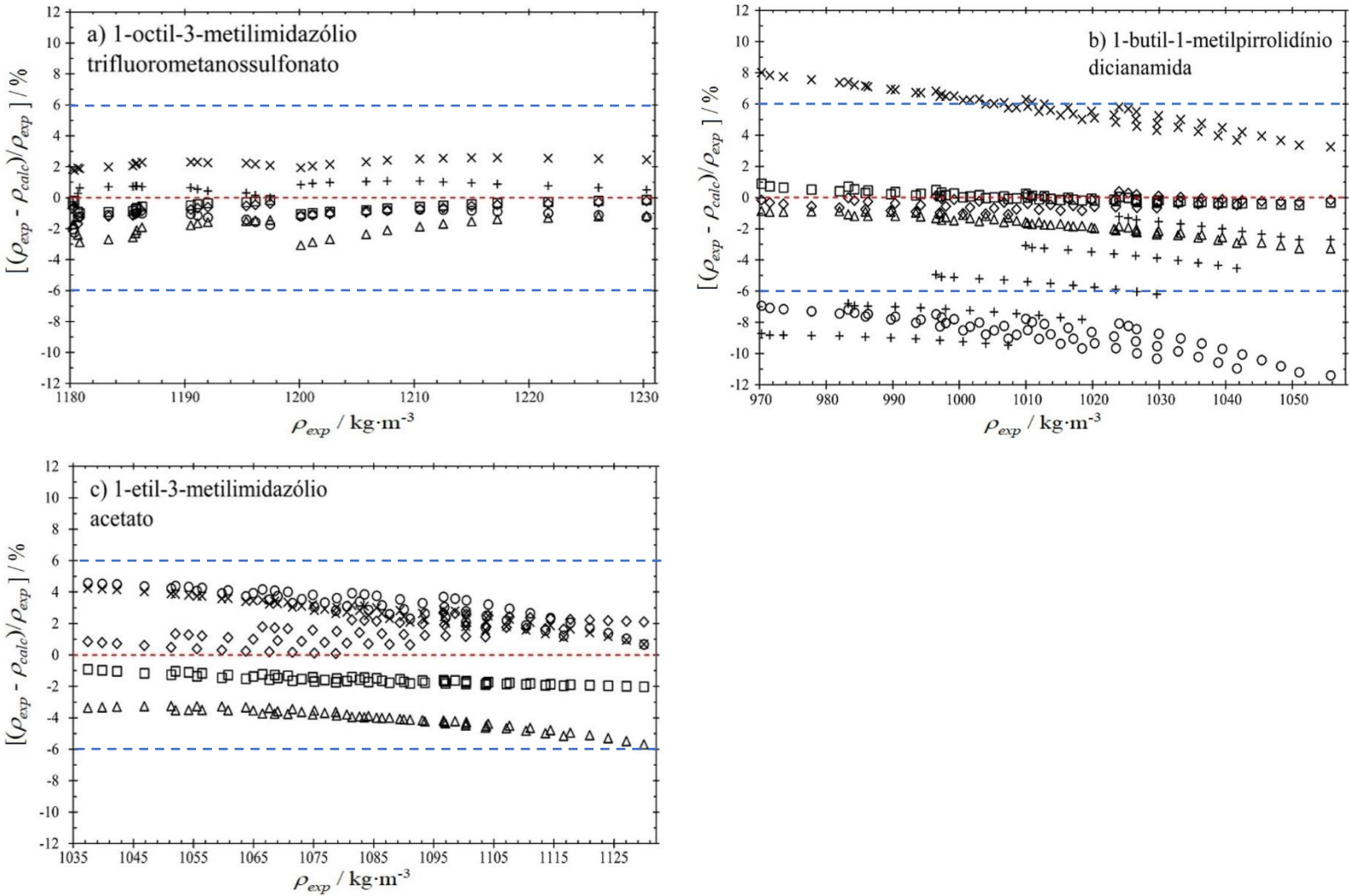
Figura 37 - Densidade experimental e desvio relativo para os LI com ânion [I]



**Fonte:** Elaborado pelo autor (2022).

Legenda: ●, Evangelista *et al.* (2014); ●, Lazzús (2010); ●, Padaszynski e Domanska (2012); ●, Taherifard e Raeissi (2016); --- representa o ponto zero, --- representa o desvio máximo.

Figura 38 - Densidade experimental em função do desvio relativo



Fonte: Elaborado pelo autor (2022).

Legenda:  $\blacklozenge$ , Evangelista *et al.* (2014);  $\circ$ , Gardas e Coutinho (2008);  $+$ , Qiao *et al.* (2010);  $\times$ , Lazzus (2010);  $\square$ , Padaszynski e Domanska (2012);  $\blacktriangle$ , Taherifard e Raieisi (2016),  $---$  representa o ponto zero,  $---$  representa o desvio máximo.

## 5 CONCLUSÃO

Expandiu-se o banco de dados experimentais de densidade à alta pressão e alta temperatura (HPHT) para os líquidos iônicos: trietilsulfônio bis(trifluorometilsulfonil) imida  $[(C_2)_3S][NTf_2]$ , 2,3-dimetil-1-propilimidazólio bis(trifluorometilsulfonil) imida  $[C_3C_1C_1Im][NTf_2]$ , 1-metil-1-propilpirrolidínio bis(trifluorometilsulfonil) imida  $[C_3C_1Pyr][NTf_2]$ , 3-butil-1,2-dimetilimidazólio bis(trifluorometilsulfonil) imida  $[C_4C_1C_1Im][NTf_2]$ , 1-butil-3-metilimidazólio iodeto  $[C_4C_1Im][I]$ , 3-hexil-1-metilimidazólio iodeto  $[C_6C_1Im][I]$ , 3-metil-1-propilimidazólio iodeto  $[C_3C_1Im][I]$ , 1-metil-3-octilimidazólio trifluorometanossulfonato  $[C_8C_1Im][OTF]$ , 1-butil-1-metilpirrolidínio dicianamida  $[C_4C_1Pyr][DCA]$  e 1-etil-3-metilimidazólio acetato  $[C_2C_1Im][C_1COO]$ . Estes dados foram subdivididos em três seções, a saber: líquidos iônicos com ânion base  $[NTf_2]$ , líquidos iônicos com ânion base  $[I]$  e líquidos iônicos sem similaridade entre ânions. Para o primeiro conjunto de líquidos iônicos avaliados, a densidade cresceu na seguinte ordem:  $[C_4C_1C_1Im][NTf_2] < [C_3C_1Pyr][NTf_2] < [C_3C_1C_1Im][NTf_2] < [(C_2)_3S][NTf_2]$ . Para o segundo conjunto a ordem foi:  $[C_6C_1Im][I] < [C_4C_1Im][I] < [C_3C_1Im][I]$ . Já para o terceiro conjunto:  $[C_4C_1Pyr][DCA] < [C_2C_1Im][C_1COO] < [C_8C_1Im][OTF]$ . Este conjunto de dados experimentais foi correlacionado por intermédio do uso de uma equação do tipo Tammann-Tait, obtendo-se um desvio médio relativo absoluto menor que 0,025 %, e desvio padrão menor que  $0,58 \text{ kg/m}^3$ . Além disso, compressibilidade isotérmica ( $\kappa_T$ ), expansividade isobárica ( $\alpha_p$ ), coeficiente de pressão térmica ( $\gamma_p$ ), e pressão interna ( $P_i$ ) foram determinados e observou-se que as variações entre cátion e ânion apresentam diferentes efeitos de empacotamento e nas propriedades físico-químicas dos LIs avaliados. Para os três conjuntos de líquidos iônicos observou-se a ocorrência da inversão no comportamento da pressão interna em função da pressão do sistema, atribuindo-se como consequência a ação de forças atrativas e repulsivas presentes na estrutura, onde a predominância de uma ou outra pode ser reflexo da pressão. Por fim, para todos os casos avaliados, o método de contribuição de grupos proposto por Paduszynski e Domanska foi o que melhor descreveu a densidade dos líquidos iônicos para quase todas as condições experimentais reportadas.

## REFERÊNCIAS

ABDULAGATOV, Ilmutdin M.; MAGEE, Joseph W.; POLIKHRONIDI, Nikolai G.; BATYROVA, Rabiya G. Chapter 16. Internal Pressure and Internal Energy of Saturated and Compressed Phases. *In: Enthalpy and Internal Energy*. Cambridge: Royal Society of Chemistry, 2017. p. 411–446. DOI: 10.1039/9781788010214-00411. Disponível em: <http://ebook.rsc.org/?DOI=10.1039/9781788010214-00411>.

ÁLVAREZ, Víctor H.; DOSIL, Noelia; GONZALEZ-CABALEIRO, Rebeca; MATTEDI, Silvana; MARTIN-PASTOR, Manuel; IGLESIAS, Miguel; NAVAZA, José M. Brønsted Ionic Liquids for Sustainable Processes: Synthesis and Physical Properties. **Journal of Chemical & Engineering Data**, [S. l.], v. 55, n. 2, p. 625–632, 2010. DOI: 10.1021/je900550v. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/je900550v>.

ALVES, Alanderson Arthu Araújo; DE MEDEIROS, Lucas Henrique Gomes; FEITOSA, Filipe Xavier; DE SANT'ANA, Hosiberto Batista. Thermodynamic Properties of Biodiesel and Petrodiesel Blends at High Pressure and High Temperature and a New Model for Density Prediction. **Journal of Chemical & Engineering Data**, [S. l.], v. 67, n. 3, p. 607–621, 2022. DOI: 10.1021/acs.jced.1c00918. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jced.1c00918>.

BISWAS, Yajnaseni; BANERJEE, Palash; MANDAL, Tarun K. From Polymerizable Ionic Liquids to Poly(ionic liquid)s: Structure-Dependent Thermal, Crystalline, Conductivity, and Solution Thermoresponsive Behaviors. **Macromolecules**, [S. l.], v. 52, n. 3, p. 945–958, 2019. DOI: 10.1021/acs.macromol.8b02351. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.macromol.8b02351>.

CHACON, Angelica Maria Valero; FEITOSA, Filipe Xavier; DE SANT'ANA, Hosiberto Batista. Density and Volumetric Behavior of Binary CO<sub>2</sub> + n-Decane and Ternary CO<sub>2</sub> + n-Decane + Naphthalene Systems at High Pressure and High Temperature. **Journal of Chemical & Engineering Data**, [S. l.], v. 65, n. 7, p. 3499–3509, 2020. DOI: 10.1021/acs.jced.0c00090. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jced.0c00090>.

COMUÑAS, María J. P.; BAZILE, Jean-patrick; BAYLAUCQ, Antoine; BONED, Christian. Density of Diethyl Adipate using a New Vibrating Tube Densimeter from (293.15 to 403.15) K and up to 140 MPa. Calibration and Measurements. **Journal of Chemical & Engineering Data**, [S. l.], v. 53, n. 4, p. 986–994, 2008. DOI: 10.1021/je700737c. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/je700737c>.

CURRÁS, Moisés R.; VIJANDE, Javier; PIÑEIRO, Manuel M.; LUGO, Luis; SALGADO, Josefa; GARCÍA, Josefa. Behavior of the Environmentally Compatible Absorbent 1-Butyl-3-methylimidazolium Tetrafluoroborate with 2,2,2-Trifluoroethanol: Experimental Densities at High Pressures and Modeling of PVT and Phase Equilibria Behavior with PC-SAFT EoS. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, [S. l.], v. 50, n. 7, p. 4065–4076, 2011. DOI: 10.1021/ie101880t. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ie101880t>.

DAKKACH, Mohamed; GACIÑO, Félix M.; MYLONA, Sofia K.; COMUÑAS, María J. P.; ASSAEL, Marc J.; FERNÁNDEZ, Josefa. High pressure densities of two nanostructured liquids based on the bis(trifluoromethylsulfonyl)imide anion from (278 to 398) K and up to



120 MPa. **The Journal of Chemical Thermodynamics**, [S. l.], v. 118, p. 67–76, 2018. DOI: 10.1016/j.jct.2017.10.012. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jct.2017.10.012>.

DE PABLO, Laura; SEGOVIA PURAS, José Juan; MARTÍN, Carmen; BERMEJO, María Dolores. Determination of Density and Viscosity of Binary Mixtures of Water and Dimethyl Sulfoxide with 1-Ethyl-3-methylimidazolium Diethylphosphate [EtMeIm] + [Et<sub>2</sub>PO<sub>4</sub>] – at Atmospheric Pressure. **Journal of Chemical & Engineering Data**, [S. l.], v. 63, n. 4, p. 1053–1064, 2018. DOI: 10.1021/acs.jced.7b00788. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jced.7b00788>.

DEETLEFS, Maggel; SEDDON, Kenneth R.; SHARA, Michael. Predicting physical properties of ionic liquids. **Phys. Chem. Chem. Phys.**, [S. l.], v. 8, n. 5, p. 642–649, 2006. DOI: 10.1039/B513453F. Disponível em: <http://xlink.rsc.org/?DOI=B513453F>.

DOMAŃSKA, Urszula; ŻOLEK-TRYZNOWSKA, Zuzanna; POBUDKOWSKA, Aneta. Separation of Hexane/Ethanol Mixtures. LLE of Ternary Systems (Ionic Liquid or Hyperbranched Polymer + Ethanol + Hexane) at T = 298.15 K. **Journal of Chemical & Engineering Data**, [S. l.], v. 54, n. 3, p. 972–976, 2009. DOI: 10.1021/jc8007588. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jc8007588>.

DZIDA, Marzena; MUSIAŁ, Małgorzata; ZOREBSKI, Edward; ZOREBSKI, Michał; JACQUEMIN, Johan; GOODRICH, Peter; WOJNAROWSKA, Zaneta; PALUCH, Marian. Comparative study of effect of alkyl chain length on thermophysical characteristics of five N-alkylpyridinium bis(trifluoromethylsulfonyl)imides with selected imidazolium-based ionic liquids. **Journal of Molecular Liquids**, [S. l.], v. 278, p. 401–412, 2019. DOI: 10.1016/j.molliq.2019.01.022. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0167732218359294>.

EVANGELISTA, Nathan S.; DO CARMO, Frederico R.; DE SANTIAGO-AGUIAR, Rílvia S.; DE SANT'ANA, Hosiberto B. Development of a New Group Contribution Method Based on GCVOL Model for the Estimation of Pure Ionic Liquid Density over a Wide Range of Temperature and Pressure. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, [S. l.], v. 53, n. 22, p. 9506–9512, 2014. DOI: 10.1021/ie501031r. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ie501031r>.

FOX, Robert W.; MCDONALD, Alan T.; PRITCHARD, Philip J. **Introduction to Fluid Mechanics**. Danvers: John Wiley & Sons, 2004.

FUKAYA, Yukinobu; IIZUKA, Yoshiki; SEKIKAWA, Kenta; OHNO, Hiroyuki. Bio ionic liquids: room temperature ionic liquids composed wholly of biomaterials. **Green Chemistry**, [S. l.], v. 9, n. 11, p. 1155, 2007. DOI: 10.1039/b706571j. Disponível em: <http://xlink.rsc.org/?DOI=b706571j>.

GACIÑO, Félix M.; REGUEIRA, Teresa; COMUÑAS, María J. P.; LUGO, Luis; FERNÁNDEZ, Josefa. Density and isothermal compressibility for two trialkylimidazolium-based ionic liquids at temperatures from (278 to 398) K and up to 120 MPa. **The Journal of Chemical Thermodynamics**, [S. l.], v. 81, p. 124–130, 2015. DOI: 10.1016/j.jct.2014.09.014. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021961414002997>.

GARCÍA-GARABAL, Sandra; DOMÍNGUEZ-PÉREZ, Montserrat; CABEZA, Oscar; AROSA, Yago; VARELA, Luis Miguel; FERNÁNDEZ-LÓPEZ, Cristina; PÉREZ-JUSTE, Jorge; PASTORIZA-SANTOS, Isabel. Effect of Gold Nanoparticles on Transport Properties of the Protic Ionic Liquid Propylammonium Nitrate. **Journal of Chemical & Engineering Data**, [S. l.], v. 66, n. 8, p. 3028–3037, 2021. DOI: 10.1021/acs.jced.1c00135. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jced.1c00135>.

GARDAS, Ramesh L.; COSTA, Henrique F.; FREIRE, Mara G.; CARVALHO, Pedro J.; MARRUCHO, Isabel M.; FONSECA, Isabel M. A.; FERREIRA, Abel G. M.; COUTINHO, João A. P. Densities and Derived Thermodynamic Properties of Imidazolium-, Pyridinium-, Pyrrolidinium-, and Piperidinium-Based Ionic Liquids. **Journal of Chemical & Engineering Data**, [S. l.], v. 53, n. 3, p. 805–811, 2008. DOI: 10.1021/je700670k. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/je700670k>.

GARDAS, Ramesh L.; COUTINHO, João A. P. Extension of the Ye and Shreeve group contribution method for density estimation of ionic liquids in a wide range of temperatures and pressures. **Fluid Phase Equilibria**, [S. l.], v. 263, n. 1, p. 26–32, 2008. DOI: 10.1016/j.fluid.2007.09.016. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0378381207006048>.

GHATEE, Mohammad Hadi; ZARE, Morteza; MOOSAVI, Fatemeh; ZOLGHADR, Amin Reza. Temperature-Dependent Density and Viscosity of the Ionic Liquids 1-Alkyl-3-methylimidazolium Iodides: Experiment and Molecular Dynamics Simulation. **Journal of Chemical & Engineering Data**, [S. l.], v. 55, n. 9, p. 3084–3088, 2010. DOI: 10.1021/je901092b. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/je901092b>.

GMEHLING, Jürgen; KLEIBER, Michael; KOLBE, Bärbel; RAREY, Jürgen. **Chemical Thermodynamics for Process Simulation**. [s.l.] : Wiley, 2019. DOI: 10.1002/9783527809479. Disponível em: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/book/10.1002/9783527809479>.

GONÇALVES, F. A. M. M.; COSTA, C. S. M. F.; FERREIRA, C. E.; BERNARDO, J. C. S.; JOHNSON, I.; FONSECA, I. M. A.; FERREIRA, A. G. M. Pressure–volume–temperature measurements of phosphonium-based ionic liquids and analysis with simple equations of state. **The Journal of Chemical Thermodynamics**, [S. l.], v. 43, n. 6, p. 914–929, 2011. DOI: 10.1016/j.jct.2011.01.009. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021961411000280>.

GONZÁLEZ, Emilio J.; GONZÁLEZ, Begoña; MACEDO, Eugénia A. Thermophysical Properties of the Pure Ionic Liquid 1-Butyl-1-methylpyrrolidinium Dicyanamide and Its Binary Mixtures with Alcohols. **Journal of Chemical & Engineering Data**, [S. l.], v. 58, n. 6, p. 1440–1448, 2013. DOI: 10.1021/je300384g. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/je400318z>.

GU, Zhiyong; BRENNECKE, Joan F. Volume Expansivities and Isothermal Compressibilities of Imidazolium and Pyridinium-Based Ionic Liquids. **Journal of Chemical & Engineering Data**, [S. l.], v. 47, n. 2, p. 339–345, 2002. DOI: 10.1021/je010242u. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/je010242u>.

HAIPOUR, Abdol R.; RAFIEE, Fatemeh. Recent Progress in Ionic Liquids and their

Applications in Organic Synthesis. **Organic Preparations and Procedures International**, [S. l.], v. 47, n. 4, p. 249–308, 2015. DOI: 10.1080/00304948.2015.1052317. Disponível em: <http://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/00304948.2015.1052317>.

HUDDLESTON, Jonathan G.; VISSER, Ann E.; REICHERT, W. Matthew; WILLAUER, Heather D.; BROKER, Grant A.; ROGERS, Robin D. Characterization and comparison of hydrophilic and hydrophobic room temperature ionic liquids incorporating the imidazolium cation. **Green Chemistry**, [S. l.], v. 3, n. 4, p. 156–164, 2001. DOI: 10.1039/b103275p. Disponível em: <http://xlink.rsc.org/?DOI=b103275p>.

ICHIKAWA, Takahiro; KATO, Takashi; OHNO, Hiroyuki. Dimension control of ionic liquids. **Chemical Communications**, [S. l.], v. 55, n. 57, p. 8205–8214, 2019. DOI: 10.1039/C9CC04280F. Disponível em: <http://xlink.rsc.org/?DOI=C9CC04280F>.

JACQUEMIN, Johan; GE, Rile; NANCARROW, Paul; ROONEY, David W.; COSTA GOMES, Margarida F.; PÁDUA, Agilio A. H.; HARDACRE, Christopher. Prediction of Ionic Liquid Properties. I. Volumetric Properties as a Function of Temperature at 0.1 MPa. **Journal of Chemical & Engineering Data**, [S. l.], v. 53, n. 10, p. 2473–2473, 2008. a. DOI: 10.1021/je800620s. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/je800620s>.

JACQUEMIN, Johan; NANCARROW, Paul; ROONEY, David W.; COSTA GOMES, Margarida F.; HUSSON, Pascale; MAJER, Vladimir; PÁDUA, Agilio A. H.; HARDACRE, Christopher. Prediction of Ionic Liquid Properties. II. Volumetric Properties as a Function of Temperature and Pressure. **Journal of Chemical & Engineering Data**, [S. l.], v. 53, n. 9, p. 2133–2143, 2008. b. DOI: 10.1021/je8002817. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/je800620s>.

JIN, Jian-Ce; SHEN, Nan-Nan; WANG, Ze-Ping; PENG, Ying-Chen; HUANG, Xiao-Ying. Photoluminescent ionic metal halides based on s<sup>2</sup> typed ions and aprotic ionic liquid cations. **Coordination Chemistry Reviews**, [S. l.], v. 448, p. 214185, 2021. DOI: 10.1016/j.ccr.2021.214185. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2021.214185>.

KAMMAKAKAM, Irshad; BARA, Jason E.; JACKSON, Enrique M.; LERTXUNDI, Josu; MECERREYES, David; TOMÉ, Liliana C. Tailored CO<sub>2</sub>-philic Anionic Poly(ionic liquid) Composite Membranes: Synthesis, Characterization, and Gas Transport Properties. **ACS Sustainable Chemistry & Engineering**, [S. l.], v. 8, n. 15, p. 5954–5965, 2020. DOI: 10.1021/acssuschemeng.0c00327. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acssuschemeng.0c00327>.

KAUR, Gagandeep; KUMAR, Harsh; SINGLA, Meenu. Diverse applications of ionic liquids: A comprehensive review. **Journal of Molecular Liquids**, [S. l.], v. 351, p. 118556, 2022. DOI: 10.1016/j.molliq.2022.118556. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2022.118556>.

KHAN, Amir Sada et al. Effect of Structural Variations on the Thermophysical Properties of Protic Ionic Liquids: Insights from Experimental and Computational Studies. **Journal of Chemical & Engineering Data**, [S. l.], v. 62, n. 10, p. 2993–3003, 2017. DOI: 10.1021/acs.jced.6b00450. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jced.6b00450>.

KIM, Ki-Sub. Physical and electrochemical properties of lithium-doped 1-butyl-3-methylimidazolium salts. **Korean Journal of Chemical Engineering**, [S. l.], v. 26, n. 3, p. 770–774, 2009. DOI: 10.1007/s11814-009-0129-3. Disponível em: <http://link.springer.com/10.1007/s11814-009-0129-3>.

KIM, Ki-sub; SHIN, Bae-kun; LEE, Huen. Physical and Electrochemical Properties of 1-Butyl-3-methylimidazolium Bromide ., **Korean J. Chem. Eng.**, [S. l.], v. 21, n. 5, p. 1010–1014, 2004.

KLOMFAR, Jaroslav; SOUČKOVÁ, Monika; PÁTEK, Jaroslav. Low-Temperature and High-Pressure  $p$ – $p$ – $T$  Relation for 1-(2-Methoxyethyl)-1-methylpyrrolidinium Bis(trifluoromethylsulfonyl)imide and 1-C<sub>n</sub>-3-methylimidazolium Thiocyanate with  $n = 2$  and 4. **Journal of Chemical & Engineering Data**, [S. l.], v. 60, n. 6, p. 1855–1867, 2015. DOI: 10.1021/acs.jced.5b00074. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jced.5b00074>.

KODAMA, Daisuke; SATO, Kayoko; WATANABE, Masaki; SUGAWARA, Toshiya; MAKINO, Takashi; KANAKUBO, Mitsuhiro. Density, Viscosity, and CO<sub>2</sub> Solubility in the Ionic Liquid Mixtures of [bmim][PF<sub>6</sub>] and [bmim][TfSA] at 313.15 K. **Journal of Chemical & Engineering Data**, [S. l.], v. 63, n. 4, p. 1036–1043, 2018. DOI: 10.1021/acs.jced.7b00786. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jced.7b00786>.

KRÓLIKOWSKA, Marta; ZAWADZKI, Maciej; KRÓLIKOWSKI, Marek. Physicochemical and thermodynamic study on aqueous solutions of dicyanamide – based ionic liquids. **The Journal of Chemical Thermodynamics**, [S. l.], v. 70, p. 127–137, 2014. DOI: 10.1016/j.jct.2013.10.034. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021961413004084>.

LAZZÚS, Juan A. A GROUP CONTRIBUTION METHOD TO PREDICT  $\rho$ - $T$ - $P$  OF IONIC LIQUIDS. **Chemical Engineering Communications**, [S. l.], v. 197, n. 7, p. 974–1015, 2010. DOI: 10.1080/00986440903359376. Disponível em: <http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/00986440903359376>.

LETHESH, Kallidanthiyil Chellappan; SHAH, Syed Nasir; MUTALIB, M. I. Abdul. Synthesis, Characterization, and Thermophysical Properties of 1,8-Diazobicyclo[5.4.0]undec-7-ene Based Thiocyanate Ionic Liquids. **Journal of Chemical & Engineering Data**, [S. l.], v. 59, n. 6, p. 1788–1795, 2014. DOI: 10.1021/je400991s. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/je400991s>.

MARCINKOWSKI, Łukasz; SZEPIŃSKI, Emil; MILEWSKA, Maria J.; KLOSKOWSKI, Adam. Density, sound velocity, viscosity, and refractive index of new morpholinium ionic liquids with amino acid-based anions: Effect of temperature, alkyl chain length, and anion. **Journal of Molecular Liquids**, [S. l.], v. 284, p. 557–568, 2019. DOI: 10.1016/j.molliq.2019.04.026. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0167732218331489>.

MARZOUKI, Moomen; ZARROUGUI, Ramzi; GHODBANE, Ouassim. Application of aprotic ionic liquids based on bis(trifluoromethylsulfonyl)imide anion as polymer gel electrolytes for cobalt oxide symmetric supercapacitors. **Journal of Energy Storage**, [S. l.], v. 40, n. May, p. 102761, 2021. DOI: 10.1016/j.est.2021.102761. Disponível em:

<https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S2352152X21004898>.

MASTER, Zubin; MALEK, Naved I. Density, Speeds of Sound, and Refractive Index of Pure and Binary Mixtures of Ionic Liquids Based on Imidazolium Cations and Tetrafluoroborate Anions with Cyclohexylamine. **Journal of Chemical & Engineering Data**, [S. l.], p. acs.jced.1c00419, 2021. DOI: 10.1021/acs.jced.1c00419. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jced.1c00419>.

MONTALBÁN, M. G.; BOLÍVAR, C. L.; DÍAZ BAÑOS, F. Guillermo; VÍLLORA, G. Effect of Temperature, Anion, and Alkyl Chain Length on the Density and Refractive Index of 1-Alkyl-3-methylimidazolium-Based Ionic Liquids. **Journal of Chemical & Engineering Data**, [S. l.], v. 60, n. 7, p. 1986–1996, 2015. DOI: 10.1021/je501091q. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/je501091q>.

MUSIAŁ, M.; CHENG, S.; WOJNAROWSKA, Z.; PALUCH, M. Density, viscosity, and high-pressure conductivity studies of tricyanomethanide-based ionic liquids. **Journal of Molecular Liquids**, [S. l.], v. 317, p. 113971, 2020. DOI: 10.1016/j.molliq.2020.113971. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0167732220332736>.

MUSIAŁ, Małgorzata; ZOREŃSKI, Edward; ZOREŃSKI, Michał; DZIDA, Marzena. Effect of alkyl chain length in cation on thermophysical properties of two homologous series: 1-alkyl-1-methylpyrrolidinium bis(trifluoromethylsulfonyl)imides and 1-alkyl-3-methylimidazolium trifluoromethanesulfonates. **Journal of Molecular Liquids**, [S. l.], v. 293, p. 111511, 2019. DOI: 10.1016/j.molliq.2019.111511. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0167732219333070>.

NEBIG, Silke; GMEHLING, Jürgen. Measurements of different thermodynamic properties of systems containing ionic liquids and correlation of these properties using modified UNIFAC (Dortmund). **Fluid Phase Equilibria**, [S. l.], v. 294, n. 1–2, p. 206–212, 2010. DOI: 10.1016/j.fluid.2010.02.010. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0378381210000853>.

NEVES, Catarina M. S. S.; KURNIA, Kiki Adi; COUTINHO, João A. P.; MARRUCHO, Isabel M.; LOPES, José N. Canongia; FREIRE, Mara G.; REBELO, Luís Paulo N. Systematic Study of the Thermophysical Properties of Imidazolium-Based Ionic Liquids with Cyano-Functionalized Anions. **The Journal of Physical Chemistry B**, [S. l.], v. 117, n. 35, p. 10271–10283, 2013. DOI: 10.1021/jp405913b. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jp405913b>.

NIETO DE CASTRO, Carlos Alberto et al. Thermophysical Properties of 1-Butyl-3-methylimidazolium tris(pentafluoroethyl)trifluorophosphate, [C 4 mim][(C 2 F 5 ) 3 PF 3 ], and of Its IoNanofluid with Multi-Walled Carbon Nanotubes. **Journal of Chemical & Engineering Data**, [S. l.], v. 66, n. 4, p. 1717–1729, 2021. DOI: 10.1021/acs.jced.0c01017. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jced.0c01017>.

NULWALA, Hunaid; MIRJAFARI, Arsalan; ZHOU, Xu. Ionic liquids and poly(ionic liquid)s for 3D printing – A focused mini-review. **European Polymer Journal**, [S. l.], v. 108, n. June, p. 390–398, 2018. DOI: 10.1016/j.eurpolymj.2018.09.023. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.eurpolymj.2018.09.023>.

OKUNIEWSKI, Marcin; PADUSZYŃSKI, Kamil; DOMAŃSKA, Urszula. Effect of Cation Structure in Trifluoromethanesulfonate-Based Ionic Liquids: Density, Viscosity, and Aqueous Biphasic Systems Involving Carbohydrates as “Salting-Out” Agents. **Journal of Chemical & Engineering Data**, [S. l.], v. 61, n. 3, p. 1296–1304, 2016. DOI: 10.1021/acs.jced.5b00931. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jced.5b00931>.

PADUSZYŃSKI, Kamil; DOMAŃSKA, Urszula. A New Group Contribution Method For Prediction of Density of Pure Ionic Liquids over a Wide Range of Temperature and Pressure. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, [S. l.], v. 51, n. 1, p. 591–604, 2012. DOI: 10.1021/ie202134z. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ie202134z>.

PALUMBO, O.; CIMINI, A.; TREQUATTRINI, F.; BRUBACH, J. B.; ROY, P.; PAOLONE, A. The infrared spectra of protic ionic liquids: performances of different computational models to predict hydrogen bonds and conformer evolution. **Physical chemistry chemical physics : PCCP**, [S. l.], v. 22, n. 14, p. 7497–7506, 2020. DOI: 10.1039/d0cp00907e. Disponível em: <http://xlink.rsc.org/?DOI=D0CP00907E>.

QIAO, Yan; MA, Youguang; HUO, Yan; MA, Peisheng; XIA, Shuqian. A group contribution method to estimate the densities of ionic liquids. **The Journal of Chemical Thermodynamics**, [S. l.], v. 42, n. 7, p. 852–855, 2010. DOI: 10.1016/j.jct.2010.02.007. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jct.2010.02.007>.

RABARI, Dharamashi; PATEL, Nikunj; JOSHIPURA, Milind; BANERJEE, Tamal. Densities of Six Commercial Ionic Liquids: Experiments and Prediction Using a Cohesion Based Cubic Equation of State. **Journal of Chemical & Engineering Data**, [S. l.], v. 59, n. 3, p. 571–578, 2014. DOI: 10.1021/je400231q. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/je400231q>.

REZAEI NEZHAD, Eshagh; SAJJADIFAR, Sami; HEIDARIZADEH, Fariba; KARIMIAN, Saaed. Task specific ionic liquid as solvent, catalyst and reagent for regioselective ring opening of epoxides in water. **Arabian Journal of Chemistry**, [S. l.], v. 12, n. 8, p. 2098–2103, 2019. DOI: 10.1016/j.arabjc.2014.12.037. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.arabjc.2014.12.037>.

ROSENBOOM, Jan-Georg; AFZAL, Waheed; PRAUSNITZ, John M. Solubilities of some organic solutes in 1-ethyl-3-methylimidazolium acetate. Chromatographic measurements and predictions from COSMO-RS. **The Journal of Chemical Thermodynamics**, [S. l.], v. 47, p. 320–327, 2012. DOI: 10.1016/j.jct.2011.11.005. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jct.2011.11.005>.

SALINAS, Rocio; PLA-FRANCO, Jordi; LLADOSA, Estela; MONTÓN, Juan B. Density, Speed of Sound, Viscosity, and Excess Properties of Binary Mixtures Formed by Ethanol and Bis(trifluorosulfonyl)imide-Based Ionic Liquids. **Journal of Chemical & Engineering Data**, [S. l.], v. 60, n. 3, p. 525–540, 2015. DOI: 10.1021/je500594z. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/je500594z>.

SANTOS, Dheiver; SANTOS, Maria; FRANCESCHI, Elton; DARIVA, Cláudio; BARISON, Andersson; MATTEDI, Silvana. Experimental Density of Ionic Liquids and Thermodynamic Modeling with Group Contribution Equation of State Based on the Lattice Fluid Theory.

**Journal of Chemical & Engineering Data**, [*S. l.*], v. 61, n. 1, p. 348–353, 2016. DOI: 10.1021/acs.jced.5b00592. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jced.5b00592>.

SAS, Olalla G.; IVANIŠ, Gorica R.; KIJEVČANIN, Mirjana Lj; GONZÁLEZ, Begon'a; DOMÍNGUEZ, Angeles; RADOVIĆ, Ivona R. Densities and Derived Volumetric Properties of Ionic Liquids with [Nf<sub>2</sub>] and [NTf<sub>2</sub>] Anions at High Pressures. **Journal of Chemical and Engineering Data**, [*S. l.*], v. 63, n. 4, p. 954–964, 2018. DOI: 10.1021/acs.jced.7b00771. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jced.7b00771>.

SASTRY, Nandhibatla V.; VAGHELA, Nilesh M.; MACWAN, Pradip M. Densities, excess molar and partial molar volumes for water+1-butyl- or, 1-hexyl- or, 1-octyl-3-methylimidazolium halide room temperature ionic liquids at T=(298.15 and 308.15) K. **Journal of Molecular Liquids**, [*S. l.*], v. 180, p. 12–18, 2013. DOI: 10.1016/j.molliq.2012.12.018. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1016/j.molliq.2012.12.018>.

SHARMA, Mukesh; MONDAL, Dibyendu; SEQUEIRA, Rosy Alphons; TALSANIYA, Rajan K.; MARU, Doli A.; MORADIYA, Kinjal; PRASAD, Kamalesh. Syntheses and characterization of few bio-ionic liquids comprising of cholinium cation and plant derived carboxylic acids as anions. **Journal of the Indian Chemical Society**, [*S. l.*], v. 98, n. 11, p. 100205, 2021. DOI: 10.1016/j.jics.2021.100205. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0019452221002053>.

SHIFLETT, Mark B.; YOKOZEKI, A. Phase Behavior of Carbon Dioxide in Ionic Liquids: [emim][Acetate], [emim][Trifluoroacetate], and [emim][Acetate] + [emim][Trifluoroacetate] Mixtures. **Journal of Chemical & Engineering Data**, [*S. l.*], v. 54, n. 1, p. 108–114, 2009. DOI: 10.1021/jc800701j. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jc800701j>.

SINGH, Sandip K.; SAVOY, Anthony W. Ionic liquids synthesis and applications: An overview. **Journal of Molecular Liquids**, [*S. l.*], v. 297, p. 112038, 2020. DOI: 10.1016/j.molliq.2019.112038. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0167732219333719>.

SOUČKOVÁ, Monika; KLOMFAR, Jaroslav; PÁTEK, Jaroslav. Surface tension and 0.1 MPa density data for 1-C<sub>n</sub>-3-methylimidazolium iodides with n = 3, 4, and 6, validated using a parachor and group contribution model. **The Journal of Chemical Thermodynamics**, [*S. l.*], v. 83, p. 52–60, 2015. DOI: 10.1016/j.jct.2014.11.016. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021961414003656>.

STEVANOVIC, Stéphane; PODGORŠEK, Ajda; PÁDUA, Agilio A. H.; COSTA GOMES, Margarida F. Effect of Water on the Carbon Dioxide Absorption by 1-Alkyl-3-methylimidazolium Acetate Ionic Liquids. **The Journal of Physical Chemistry B**, [*S. l.*], v. 116, n. 49, p. 14416–14425, 2012. DOI: 10.1021/jp3100377. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jp3100377>.

TAHERIFARD, Hamid; RAEISSI, Sona. Estimation of the Densities of Ionic Liquids Using a Group Contribution Method. **Journal of Chemical & Engineering Data**, [*S. l.*], v. 61, n. 12, p. 4031–4038, 2016. DOI: 10.1021/acs.jced.6b00535. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jced.6b00535>.

TARIQ, M.; FORTE, P. A. S.; GOMES, M. F. Costa; LOPES, J. N. Canongia; REBELO, L.

P. N. Densities and refractive indices of imidazolium- and phosphonium-based ionic liquids: Effect of temperature, alkyl chain length, and anion. **The Journal of Chemical Thermodynamics**, [*S. l.*], v. 41, n. 6, p. 790–798, 2009. DOI: 10.1016/j.jct.2009.01.012. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jct.2009.01.012>.

TARIQ, Mohammad; CARVALHO, Pedro J.; COUTINHO, João A. P.; MARRUCHO, Isabel M.; LOPES, José N. Canongia; REBELO, Luís P. N. Viscosity of (C2–C14) 1-alkyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)amide ionic liquids in an extended temperature range. **Fluid Phase Equilibria**, [*S. l.*], v. 301, n. 1, p. 22–32, 2011. DOI: 10.1016/j.fluid.2010.10.018. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1016/j.fluid.2010.10.018>.

TEODORESCU, Mariana. Isothermal Vapor + Liquid Equilibrium and Thermophysical Properties for 1-Butyl-3-methylimidazolium Bromide + 1-Butanol Binary System. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, [*S. l.*], v. 53, n. 34, p. 13522–13528, 2014. DOI: 10.1021/ie502247d. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ie502247d>.

VENTURA, Sónia P. M.; GURBISZ, Monika; GHAVRE, Mukund; FERREIRA, Fábio M. M.; GONÇALVES, Fernando; BEADHAM, Ian; QUILTY, Brid; COUTINHO, João A. P.; GATHERGOOD, Nicholas. Imidazolium and Pyridinium Ionic Liquids from Mandelic Acid Derivatives: Synthesis and Bacteria and Algae Toxicity Evaluation. **ACS Sustainable Chemistry & Engineering**, [*S. l.*], v. 1, n. 4, p. 393–402, 2013. DOI: 10.1021/sc3001299. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/sc3001299>.

VIEIRA, Jean C. B.; PAZ, Alisson V.; HENNEMANN, Bruno L.; KUHN, Bruna L.; BENDER, Caroline R.; MEYER, Alexandre R.; PAGLIARI, Anderson B.; VILLETTI, Marcos A.; FRIZZO, Clarissa P. Effect of large anions in thermal properties and cation-anion interaction strength of dicationic ionic liquids. **Journal of Molecular Liquids**, [*S. l.*], v. 298, p. 112077, 2020. DOI: 10.1016/j.molliq.2019.112077. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2019.112077>.

WANG, Junfeng; LUO, Jianquan; FENG, Shicao; LI, Haoran; WAN, Yinhua; ZHANG, Xiangping. Recent development of ionic liquid membranes. **Green Energy & Environment**, [*S. l.*], v. 1, n. 1, p. 43–61, 2016. DOI: 10.1016/j.gee.2016.05.002. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1016/j.gee.2016.05.002>.

WATANABE, Masaki; KODAMA, Daisuke; MAKINO, Takashi; KANAKUBO, Mitsuhiro. Density, Viscosity, and Electrical Conductivity of Protic Amidium Bis(trifluoromethanesulfonyl)amide Ionic Liquids. **Journal of Chemical & Engineering Data**, [*S. l.*], v. 61, n. 12, p. 4215–4221, 2016. DOI: 10.1021/acs.jced.6b00575. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jced.6b00575>.

WELTON, Tom. Ionic liquids in catalysis. **Coordination Chemistry Reviews**, [*S. l.*], v. 248, n. 21–24, p. 2459–2477, 2004. DOI: 10.1016/j.ccr.2004.04.015. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0010854504001183>.

WELTON, Tom. Ionic liquids: a brief history. **Biophysical Reviews**, [*S. l.*], v. 10, n. 3, p. 691–706, 2018. DOI: 10.1007/s12551-018-0419-2. Disponível em: <http://link.springer.com/10.1007/s12551-018-0419-2>.

WILKES, John S. A short history of ionic liquids—from molten salts to neoteric solvents.



**Green Chemistry**, [*S. l.*], v. 4, n. 2, p. 73–80, 2002. DOI: 10.1039/b110838g. Disponível em: <http://xlink.rsc.org/?DOI=b110838g>.

XU, Wei-Guo; CHEN, Xiao-Ying; ZHANG, Si-Cai; FANG, Da-Wei. Volumetric properties of aqueous solution of [C 3 mim][Ac] and [C 4 mim][Ac] from 283.15 to 323.15 K. **Journal of Molecular Liquids**, [*S. l.*], v. 234, p. 24–29, 2017. DOI: 10.1016/j.molliq.2017.03.048. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0167732216342611>.

XU, Zixuan; ZHAO, Yonglu; WANG, Peiyu; YAN, Xinqi; CAI, Miaomiao; YANG, Ying. Extraction of Pt(IV), Pt(II), and Pd(II) from Acidic Chloride Media Using Imidazolium-Based Task-Specific Polymeric Ionic Liquid. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, [*S. l.*], v. 58, n. 5, p. 1779–1786, 2019. DOI: 10.1021/acs.iecr.8b03408. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.iecr.8b03408>.

YANG, Fuxin; WANG, Xiaopo; CHEN, Qiang; TAN, Houzhang. Improvement of the properties of 1-ethyl-3-methylimidazolium acetate using organic solvents for biofuel process. **Journal of Molecular Liquids**, [*S. l.*], v. 284, p. 82–91, 2019. DOI: 10.1016/j.molliq.2019.03.144. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2019.03.144>.

YANG, Zhen-Yu; HU, Yu-Feng; WANG, Zhi-Xin; SUN, Yu; JIANG, Chen-Chen; CHEN, Yu-Fei. Densities and Viscosities of the Binary and Ternary Aqueous Solutions of Pyrrolidone-Based Ionic Liquids at Different Temperatures and Atmospheric Pressure. **Journal of Chemical & Engineering Data**, [*S. l.*], v. 59, n. 4, p. 1094–1104, 2014. DOI: 10.1021/je4002009. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/je4002009>.

YOKOZEKI, A.; SHIFLETT, Mark B.; JUNK, Christopher P.; GRIECO, Liane M.; FOO, Thomas. Physical and Chemical Absorptions of Carbon Dioxide in Room-Temperature Ionic Liquids. **The Journal of Physical Chemistry B**, [*S. l.*], v. 112, n. 51, p. 16654–16663, 2008. DOI: 10.1021/jp805784u. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jp805784u>.

ZEC, Nebojša; BEŠTER-ROGAČ, Marija; VRANEŠ, Milan; GADŽURIĆ, Slobodan. Physicochemical properties of (1-butyl-1-methylpyrrolydinium dicyanamide +  $\gamma$ -butyrolactone) binary mixtures. **The Journal of Chemical Thermodynamics**, [*S. l.*], v. 91, p. 327–335, 2015. DOI: 10.1016/j.jct.2015.08.014. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021961415002967>.

ZHANG, Qingguo; CAI, Siyi; ZHANG, Wenbo; LAN, Yalin; ZHANG, Xinyuan. Density, viscosity, conductivity, refractive index and interaction study of binary mixtures of the ionic liquid 1-ethyl-3-methylimidazolium acetate with methyldiethanolamine. **Journal of Molecular Liquids**, [*S. l.*], v. 233, p. 471–478, 2017. DOI: 10.1016/j.molliq.2017.03.036. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1016/j.molliq.2017.03.036>.

ZHAO, Wei; LEROY, Frédéric; HEGGEN, Berit; ZAHN, Stefan; KIRCHNER, Barbara; BALASUBRAMANIAN, Sundaram; MÜLLER-PLATHE, Florian. Are There Stable Ion-Pairs in Room-Temperature Ionic Liquids? Molecular Dynamics Simulations of 1- n -Butyl-3-methylimidazolium Hexafluorophosphate. **Journal of the American Chemical Society**, [*S. l.*], v. 131, n. 43, p. 15825–15833, 2009. DOI: 10.1021/ja906337p. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ja906337p>.

ZOREBSKI, Edward; MUSIAŁ, Małgorzata; DZIDA, Marzena. Relation between

temperature–pressure dependence of internal pressure and intermolecular interactions in ionic liquids – Comparison with molecular liquids. **The Journal of Chemical Thermodynamics**, [S. l.], v. 131, p. 347–359, 2019. DOI: 10.1016/j.jct.2018.11.007. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021961418310565>.

## APÊNDICE A – DENSIDADE EXPERIMENTAL

Tabela A.1 - Trietilsulfônio bis(trifluorometilsulfonil) imida<sup>a</sup>

<i>P</i> /MPa	$\rho$ / (kg/m <sup>3</sup> ) em <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	298,15	373,15	298,15
0,2	1457,4	1433,5	1410,3	1387,3	1365,3
5,0	1460,9	1437,6	1414,7	1392,1	1370,2
10,0	1464,5	1441,5	1418,9	1396,6	1375,1
20,0	1471,4	1449,0	1426,9	1405,3	1384,4
30,0	1478,0	1456,0	1434,4	1413,4	1393,0
40,0	1484,3	1462,8	1441,6	1421,1	1401,2
50,0	1490,5	1469,4	1448,5	1428,4	1409,0
60,0	1496,3	1475,6	1455,2	1435,4	1416,5
70,0	1502,1	1481,7	1461,5	1442,2	1423,6
80,0	1507,7	1487,4	1467,7	1448,7	1430,5
90,0	1513,0	1493,1	1473,6	1455,0	1437,2
100,0	1518,3	1498,6	1479,3	1461,1	1443,6

<sup>a</sup> As incertezas das medidas são:  $u(P) = 0,7$  MPa,  $u(T) = 0,02$  K e  $u_c(\rho_r) = 0,01$  kg/m<sup>3</sup>. A incerteza expandida para  $\rho$  é  $U(\rho) = 1.9$  kg/m<sup>3</sup> (0.95 nível de confiança).

Tabela A.2 - 2,3-dimetil-1-propilimidazólio

bis(trifluorometilsulfonil) imida<sup>a</sup>

<i>P</i> /MPa	$\rho$ / (kg/m <sup>3</sup> ) em <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	298,15	373,15	298,15
0,2	1452,6	1429,0	1405,6	1383,3	1361,2
5,0	1456,0	1432,7	1409,9	1387,6	1365,7
10,0	1459,3	1436,4	1413,8	1391,9	1370,3
20,0	1465,9	1443,4	1421,5	1400,1	1379,1
30,0	1472,2	1450,2	1428,7	1407,9	1387,4
40,0	1478,2	1456,6	1435,5	1415,2	1395,3
50,0	1484,0	1462,9	1442,2	1422,3	1402,8
60,0	1489,7	1468,9	1448,6	1429,0	1410,0
70,0	1495,2	1474,6	1454,7	1435,5	1416,9
80,0	1500,4	1480,2	1460,6	1441,8	1423,6
90,0	1505,7	1485,6	1466,3	1447,8	1430,0
100,0	1510,6	1490,9	1471,8	1453,7	1436,2

<sup>a</sup> As incertezas das medidas são:  $u(P) = 0,7$  MPa,  $u(T) = 0,02$  K e  $u_c(\rho_r) = 0,01$  kg/m<sup>3</sup>. A incerteza expandida para  $\rho$  é  $U(\rho) = 1.9$  kg/m<sup>3</sup> (0.95 nível de confiança).

Tabela A.3 - 1-Metil-1-propilpirrolidínio  
bis(trifluorometilsulfonil) imida<sup>a</sup>

$P$ /MPa	$\rho$ / (kg/m <sup>3</sup> ) em $T$ / K				
	298,15	323,15	298,15	373,15	298,15
0,2	1425,7	1403,4	1381,6	1360,3	1339,3
5,0	1429,1	1407,1	1384,9	1364,1	1343,4
10,0	1432,4	1410,8	1389,0	1368,3	1348,0
20,0	1439,1	1417,9	1396,4	1376,4	1356,7
30,0	1445,3	1424,7	1403,7	1384,0	1364,7
40,0	1451,4	1431,0	1410,4	1391,3	1372,5
50,0	1457,3	1437,3	1417,1	1398,5	1379,9
60,0	1462,9	1443,2	1423,4	1405,0	1386,9
70,0	1468,3	1449,0	1429,5	1411,4	1393,6
80,0	1473,6	1454,6	1435,4	1417,5	1400,1
90,0	1478,7	1460,0	1440,9	1423,4	1406,3
100,0	1483,7	1465,2	1446,4	1429,1	1412,3

<sup>a</sup> As incertezas das medidas são:  $u(P) = 0,7$  MPa,  $u(T) = 0,02$  K e  $u_c(\rho_r) = 0,01$  kg/m<sup>3</sup>. A incerteza expandida para  $\rho$  é  $U(\rho) = 1,9$  kg/m<sup>3</sup> (0.95 nível de confiança).

Tabela A.4 - 3-butil-1,2-dimetilimidazólio  
bis(trifluorometilsulfonil) imida<sup>a</sup>

$P$ /MPa	$\rho$ / (kg/m <sup>3</sup> ) em $T$ / K				
	298,15	323,15	298,15	373,15	298,15
0,2	1415,8	1392,8	1370,4	1348,3	1326,6
5,0	1419,1	1396,5	1374,4	1352,7	1331,3
10,0	1422,5	1400,2	1378,4	1356,9	1335,9
20,0	1429,1	1407,2	1386,0	1365,1	1344,7
30,0	1435,4	1414,0	1393,3	1373,0	1353,1
40,0	1441,4	1420,4	1400,2	1380,3	1361,0
50,0	1447,3	1426,7	1406,9	1387,4	1368,5
60,0	1452,9	1432,7	1413,3	1394,2	1375,7
70,0	1458,3	1438,5	1419,3	1400,6	1382,6
80,0	1463,6	1444,0	1425,2	1407,0	1389,2
90,0	1468,8	1449,4	1431,0	1413,0	1395,6
100,0	1473,8	1454,7	1436,6	1418,9	1401,7

<sup>a</sup> As incertezas das medidas são:  $u(P) = 0,7$  MPa,  $u(T) = 0,02$  K e  $u_c(\rho_r) = 0,01$  kg/m<sup>3</sup>. A incerteza expandida para  $\rho$  é  $U(\rho) = 1,9$  kg/m<sup>3</sup> (0.95 nível de confiança).

Tabela A.13 - 1-butil-3-metilimidazólio iodeto<sup>a</sup>

$P$ /MPa	$\rho$ / (kg/m <sup>3</sup> ) em $T$ / K				
	298,15	323,15	298,15	373,15	298,15
0,2	1484,2	1464,7	1445,5	1427,4	1408,7
5,0	1486,8	1467,4	1448,5	1430,3	1412,4
10,0	1489,4	1470,2	1451,3	1433,4	1415,7
20,0	1494,5	1475,5	1457,0	1439,4	1422,0
30,0	1499,4	1480,8	1462,5	1445,1	1428,1
40,0	1504,2	1485,8	1467,8	1450,7	1433,9
50,0	1509,0	1490,8	1473,0	1456,2	1439,7
60,0	1513,6	1495,7	1478,2	1461,4	1445,1
70,0	1518,1	1500,5	1483,2	1466,6	1450,6
80,0	1522,5	1505,2	1488,0	1471,7	1456,0
90,0	1526,9	1509,7	1492,8	1476,7	1461,2
100,0	1531,2	1514,2	1497,4	1481,7	1466,2

<sup>a</sup> As incertezas das medidas são:  $u(P) = 0,7$  MPa,  $u(T) = 0,02$  K e  $u_c(\rho_r) = 0,01$  kg/m<sup>3</sup>. A incerteza expandida para  $\rho$  é  $U(\rho) = 1,9$  kg/m<sup>3</sup> (0.95 nível de confiança).

Tabela A.14 - 3-hexil-1-metilimidazólio iodeto<sup>a</sup>

$P$ /MPa	$\rho$ / (kg/m <sup>3</sup> ) em $T$ / K				
	298,15	323,15	298,15	373,15	298,15
0,2	1380,5	1361,7	1343,4	1325,5	1308,9
5,0	1382,9	1364,5	1346,4	1328,6	1312,2
10,0	1385,6	1367,4	1349,5	1331,9	1315,6
20,0	1390,9	1372,9	1355,4	1338,1	1322,1
30,0	1395,8	1378,3	1361,1	1344,1	1328,4
40,0	1400,8	1383,4	1366,4	1349,9	1334,3
50,0	1405,5	1388,4	1371,7	1355,4	1340,2
60,0	1410,2	1393,4	1376,9	1360,8	1345,9
70,0	1414,7	1398,1	1381,9	1366,1	1351,4
80,0	1419,1	1402,7	1386,9	1371,2	1356,7
90,0	1423,4	1407,2	1391,6	1376,1	1362,0
100,0	1427,6	1411,6	1396,2	1381,0	1367,0

<sup>a</sup> As incertezas das medidas são:  $u(P) = 0,7$  MPa,  $u(T) = 0,02$  K e  $u_c(\rho_r) = 0,01$  kg/m<sup>3</sup>. A incerteza expandida para  $\rho$  é  $U(\rho) = 1,9$  kg/m<sup>3</sup> (0.95 nível de confiança).

Tabela A.15 - 3-metil-1-propilimidazólio iodeto<sup>a</sup>

$P$ /MPa	$\rho$ / (kg/m <sup>3</sup> ) em $T$ / K				
	298,15	323,15	298,15	373,15	298,15
0,2	1534,4	1514,1	1494,2	1474,7	1454,8
5,0	1536,8	1515,9	1496,7	1477,5	1458,1
10,0	1539,3	1518,6	1499,5	1480,7	1461,0
20,0	1544,4	1523,9	1505,0	1486,5	1466,8
30,0	1549,2	1529,1	1510,3	1492,2	1472,4
40,0	1554,0	1534,1	1515,6	1497,7	1478,0
50,0	1558,7	1539,0	1520,7	1503,2	1483,4
60,0	1563,3	1543,8	1525,7	1508,3	1488,7
70,0	1567,8	1548,5	1530,6	1513,6	1494,0
80,0	1572,2	1553,1	1535,4	1518,6	1499,1
90,0	1576,5	1557,7	1540,2	1523,5	1504,1
100,0	1580,7	1562,2	1544,8	1528,4	1509,0

<sup>a</sup> As incertezas das medidas são:  $u(P) = 0,7$  MPa,  $u(T) = 0,02$  K e  $u_c(\rho_r) = 0,01$  kg/m<sup>3</sup>. A incerteza expandida para  $\rho$  é  $U(\rho) = 1,9$  kg/m<sup>3</sup> (0.95 nível de confiança).

Tabela A.16 - 1-metil-3-octilimidazólio trifluorometanosulfonato<sup>a</sup>

$P$ /MPa	$\rho$ / (kg/m <sup>3</sup> ) em $T$ / K				
	298,15	323,15	298,15	373,15	298,15
0,2	1180,7	1161,7	1143,2	1125,2	1107,6
5,0	1183,4	1164,9	1146,9	1129,3	1111,7
10,0	1186,3	1168,2	1150,3	1133,0	1115,8
20,0	1192,0	1174,3	1157,0	1140,1	1123,4
30,0	1197,4	1180,2	1163,3	1146,8	1130,6
40,0	1202,7	1185,7	1169,2	1153,2	1137,4
50,0	1207,7	1191,1	1174,9	1159,3	1143,7
60,0	1212,6	1196,2	1180,4	1165,0	1149,8
70,0	1217,3	1201,1	1185,5	1170,4	1155,7
80,0	1221,7	1205,8	1190,5	1175,7	1161,3
90,0	1226,1	1210,5	1195,4	1180,9	1166,7
100,0	1230,3	1215,0	1200,1	1185,8	1171,8

<sup>a</sup> As incertezas das medidas são:  $u(P) = 0,7$  MPa,  $u(T) = 0,02$  K e  $u_c(\rho_r) = 0,01$  kg/m<sup>3</sup>. A incerteza expandida para  $\rho$  é  $U(\rho) = 1,9$  kg/m<sup>3</sup> (0.95 nível de confiança).

Tabela A.17 - 1-butil-1-metilpirrolidínio dicianamida<sup>a</sup>

$P$ /MPa	$\rho$ / (kg/m <sup>3</sup> ) em $T$ / K				
	298,15	323,15	298,15	373,15	298,15
0,2	1024,0	1010,0	996,5	983,3	970,3
5,0	1025,4	1010,9	997,3	984,2	971,5
10,0	1026,6	1012,8	999,2	986,3	973,6
20,0	1029,9	1016,3	1003,0	990,4	977,8
30,0	1033,2	1019,8	1006,7	994,2	982,0
40,0	1036,4	1023,2	1010,2	998,0	985,9
50,0	1039,5	1026,5	1013,7	1001,6	989,7
60,0	1042,5	1029,7	1017,1	1005,2	993,5
70,0	1045,4	1032,8	1020,3	1008,6	997,1
80,0	1048,3	1035,9	1023,5	1012,0	1000,6
90,0	1051,0	1038,8	1026,7	1015,2	1004,0
100,0	1055,7	1041,7	1029,7	1018,4	1007,3

<sup>a</sup> As incertezas das medidas são:  $u(P) = 0,7$  MPa,  $u(T) = 0,02$  K e  $u_c(\rho_r) = 0,01$  kg/m<sup>3</sup>. A incerteza expandida para  $\rho$  é  $U(\rho) = 1,9$  kg/m<sup>3</sup> (0.95 nível de confiança).

Tabela A.18 - 1-etil-3-metilimidazólio acetato<sup>a</sup>

$P$ /MPa	$\rho$ / (kg/m <sup>3</sup> ) em $T$ / K				
	298,15	323,15	298,15	373,15	298,15
0,2	1096,6	1081,4	1066,5	1052,0	1037,4
5,0	1098,5	1083,5	1068,5	1054,2	1039,8
10,0	1100,4	1085,5	1070,7	1056,4	1042,3
20,0	1104,1	1089,4	1074,8	1060,8	1046,8
30,0	1107,6	1093,1	1078,8	1065,0	1051,3
40,0	1111,1	1096,8	1082,7	1069,0	1055,6
50,0	1114,4	1100,3	1086,4	1073,0	1059,7
60,0	1117,7	1103,8	1090,0	1076,8	1063,7
70,0	1120,9	1107,1	1093,5	1080,5	1067,6
80,0	1124,0	1110,4	1097,0	1084,1	1071,5
90,0	1127,0	1113,6	1100,3	1087,6	1075,1
100,0	1130,0	1116,6	1103,6	1091,1	1078,7

<sup>a</sup> As incertezas das medidas são:  $u(P) = 0,7$  MPa,  $u(T) = 0,02$  K e  $u_c(\rho_r) = 0,01$  kg/m<sup>3</sup>. A incerteza expandida para  $\rho$  é  $U(\rho) = 1,9$  kg/m<sup>3</sup> (0.95 nível de confiança).

**APÊNDICE B – DENSIDADE CALCULADA PELA EQUAÇÃO DE TAMMANN-TAIT**

Tabela B.1 - Trietilsulfônio bis(trifluorometilsulfonil) imida

<i>P</i> /MPa	$\rho$ / (kg/m <sup>3</sup> ) em <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	298,15	373,15	298,15
0,2	1457,4	1433,5	1410,2	1387,5	1365,3
5,0	1460,9	1437,4	1414,4	1392,0	1370,2
10,0	1464,5	1441,3	1418,6	1396,6	1375,1
20,0	1471,5	1448,8	1426,7	1405,2	1384,4
30,0	1478,1	1456,0	1434,4	1413,5	1393,1
40,0	1484,4	1462,8	1441,7	1421,2	1401,3
50,0	1490,5	1469,3	1448,7	1428,6	1409,1
60,0	1496,4	1475,6	1455,3	1435,6	1416,5
70,0	1502,1	1481,6	1461,7	1442,4	1423,6
80,0	1507,5	1487,4	1467,9	1448,8	1430,4
90,0	1512,8	1493,0	1473,8	1455,0	1436,8
100,0	1517,9	1498,4	1479,4	1461,0	1443,0

Tabela B.2 - 2,3-dimetil-1-propilimidazólio  
bis(trifluorometilsulfonil) imida

<i>P</i> /MPa	$\rho$ / (kg/m <sup>3</sup> ) em <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	298,15	373,15	298,15
0,2	1452,7	1429,0	1405,8	1383,2	1361,3
5,0	1456,0	1432,6	1409,7	1387,5	1365,8
10,0	1459,4	1436,2	1413,7	1391,8	1370,4
20,0	1465,9	1443,3	1421,4	1400,0	1379,2
30,0	1472,2	1450,1	1428,7	1407,8	1387,6
40,0	1478,2	1456,6	1435,6	1415,2	1395,4
50,0	1484,0	1462,9	1442,3	1422,3	1402,9
60,0	1489,7	1468,9	1448,7	1429,0	1410,0
70,0	1495,1	1474,7	1454,8	1435,5	1416,9
80,0	1500,3	1480,2	1460,7	1441,8	1423,4
90,0	1505,4	1485,6	1466,4	1447,8	1429,7
100,0	1510,4	1490,9	1471,9	1453,5	1435,7



Tabela B.3 - 1-Metil-1-propilpirrolidínio  
bis(trifluorometilsulfonil) imida

$P$ /MPa	$\rho$ / (kg/m <sup>3</sup> ) em $T$ / K				
	298,15	323,15	298,15	373,15	298,15
0,2	1425,7	1403,4	1381,5	1360,1	1339,1
5,0	1429,1	1407,0	1385,4	1364,2	1343,5
10,0	1432,5	1410,7	1389,3	1368,4	1348,0
20,0	1439,0	1417,7	1396,9	1376,5	1356,6
30,0	1445,3	1424,5	1404,1	1384,2	1364,7
40,0	1451,4	1431,0	1411,0	1391,5	1372,4
50,0	1457,2	1437,2	1417,6	1398,5	1379,7
60,0	1462,9	1443,2	1424,0	1405,1	1386,7
70,0	1468,3	1449,0	1430,1	1411,6	1393,4
80,0	1473,6	1454,6	1436,0	1417,7	1399,8
90,0	1478,7	1460,0	1441,6	1423,6	1406,0
100,0	1483,6	1465,2	1447,1	1429,4	1412,0

Tabela B.4 - 3-butil-1,2-dimetilimidazólio  
bis(trifluorometilsulfonil) imida

$P$ /MPa	$\rho$ / (kg/m <sup>3</sup> ) em $T$ / K				
	298,15	323,15	298,15	373,15	298,15
0,2	1415,9	1392,9	1370,4	1348,3	1326,7
5,0	1419,2	1396,5	1374,3	1352,5	1331,3
10,0	1422,6	1400,2	1378,3	1356,8	1335,9
20,0	1429,1	1407,3	1385,9	1365,1	1344,8
30,0	1435,4	1414,0	1393,2	1372,9	1353,1
40,0	1441,4	1420,5	1400,2	1380,3	1361,0
50,0	1447,2	1426,8	1406,8	1387,4	1368,5
60,0	1452,8	1432,8	1413,2	1394,2	1375,7
70,0	1458,2	1438,6	1419,4	1400,7	1382,6
80,0	1463,5	1444,2	1425,3	1407,0	1389,2
90,0	1468,5	1449,6	1431,1	1413,0	1395,5
100,0	1473,5	1454,8	1436,6	1418,9	1401,6

Tabela B.5 - 1-butil-3-metilimidazólio iodeto

$P$ /MPa	$\rho$ / (kg/m <sup>3</sup> ) em $T$ / K				
	298,15	323,15	298,15	373,15	298,15
0,2	1484,5	1464,7	1445,6	1427,1	1409,2
5,0	1487,0	1467,4	1448,4	1430,1	1412,4
10,0	1489,5	1470,1	1451,3	1433,2	1415,6
20,0	1494,6	1475,5	1457,0	1439,2	1421,9
30,0	1499,5	1480,7	1462,6	1445,0	1428,0
40,0	1504,3	1485,8	1468,0	1450,7	1434,0
50,0	1509,0	1490,8	1473,2	1456,2	1439,7
60,0	1513,6	1495,7	1478,3	1461,5	1445,3
70,0	1518,1	1500,4	1483,3	1466,7	1450,7
80,0	1522,5	1505,1	1488,2	1471,8	1456,0
90,0	1526,8	1509,6	1492,9	1476,8	1461,2
100,0	1531,0	1514,0	1497,6	1481,6	1466,2

Tabela B.6 - 3-hexil-1-metilimidazólio iodeto

$P$ /MPa	$\rho$ / (kg/m <sup>3</sup> ) em $T$ / K				
	298,15	323,15	298,15	373,15	298,15
0,2	1380,6	1361,6	1343,4	1325,8	1308,9
5,0	1383,1	1364,4	1346,3	1328,9	1312,2
10,0	1385,8	1367,2	1349,3	1332,1	1315,5
20,0	1390,9	1372,7	1355,2	1338,3	1322,1
30,0	1395,9	1378,0	1360,8	1344,2	1328,3
40,0	1400,8	1383,2	1366,3	1350,0	1334,4
50,0	1405,5	1388,3	1371,6	1355,6	1340,2
60,0	1410,2	1393,2	1376,8	1361,0	1345,9
70,0	1414,7	1398,0	1381,8	1366,3	1351,4
80,0	1419,1	1402,6	1386,7	1371,4	1356,7
90,0	1423,4	1407,2	1391,5	1376,4	1361,9
100,0	1427,7	1411,6	1396,2	1381,3	1367,0

Tabela B.7 - 3-metil-1-propilimidazólio iodeto

$P$ /MPa	$\rho$ / (kg/m <sup>3</sup> ) em $T$ / K				
	298,15	323,15	298,15	373,15	298,15
0,2	1534,3	1514,2	1494,2	1474,4	1454,8
5,0	1536,8	1516,8	1496,9	1477,3	1457,7
10,0	1539,3	1519,5	1499,7	1480,2	1460,8
20,0	1544,3	1524,7	1505,2	1485,9	1466,7
30,0	1549,2	1529,8	1510,6	1491,4	1472,4
40,0	1554,0	1534,8	1515,8	1496,8	1478,0
50,0	1558,7	1539,7	1520,9	1502,1	1483,5
60,0	1563,3	1544,5	1525,9	1507,3	1488,8
70,0	1567,8	1549,2	1530,8	1512,3	1494,0
80,0	1572,2	1553,8	1535,5	1517,3	1499,1
90,0	1576,5	1558,4	1540,2	1522,1	1504,0
100,0	1580,7	1562,8	1544,8	1526,8	1508,9

Tabela B.8 - 1-metil-3-octilimidazólio  
trifluorometanossulfonato

$P$ /MPa	$\rho$ / (kg/m <sup>3</sup> ) em $T$ / K				
	298,15	323,15	298,15	373,15	298,15
0,2	1180,7	1161,7	1143,3	1125,2	1107,7
5,0	1183,6	1164,9	1146,7	1129,0	1111,7
10,0	1186,5	1168,1	1150,2	1132,7	1115,8
20,0	1192,2	1174,3	1156,8	1139,9	1123,4
30,0	1197,6	1180,1	1163,1	1146,6	1130,6
40,0	1202,8	1185,7	1169,1	1153,0	1137,4
50,0	1207,8	1191,1	1174,9	1159,1	1143,9
60,0	1212,6	1196,2	1180,3	1164,9	1150,0
70,0	1217,2	1201,2	1185,6	1170,4	1155,8
80,0	1221,7	1205,9	1190,6	1175,7	1161,3
90,0	1226,0	1210,5	1195,5	1180,8	1166,7
100,0	1230,2	1214,9	1200,1	1185,7	1171,8

Tabela B.9 - 1-butil-1-metilpirrolidínio dicianamida

$P$ /MPa	$\rho$ / (kg/m <sup>3</sup> ) em $T$ / K				
	298,15	323,15	298,15	373,15	298,15
0,2	1023,5	1009,6	996,0	982,7	969,7
5,0	1025,1	1011,3	997,8	984,6	971,7
10,0	1026,7	1013,0	999,6	986,5	973,8
20,0	1029,9	1016,5	1003,3	990,4	977,8
30,0	1033,1	1019,8	1006,8	994,2	981,8
40,0	1036,2	1023,2	1010,4	997,9	985,6
50,0	1039,3	1026,4	1013,8	1001,5	989,4
60,0	1042,3	1029,6	1017,2	1005,0	993,2
70,0	1045,3	1032,8	1020,5	1008,5	996,8
80,0	1048,2	1035,9	1023,8	1012,0	1000,4
90,0	1051,1	1039,0	1027,0	1015,3	1003,9
100,0	1054,0	1042,0	1030,2	1018,7	1007,4

Tabela B.10 - 1-etil-3-metilimidazólio acetato

$P$ /MPa	$\rho$ / (kg/m <sup>3</sup> ) em $T$ / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	1096,7	1081,5	1066,6	1051,9	1037,5
5,0	1098,5	1083,5	1068,7	1054,1	1039,8
10,0	1100,4	1085,5	1070,8	1056,4	1042,2
20,0	1104,0	1089,4	1075,0	1060,8	1046,8
30,0	1107,5	1093,1	1079,0	1065,0	1051,3
40,0	1110,9	1096,8	1082,8	1069,1	1055,6
50,0	1114,3	1100,3	1086,6	1073,0	1059,7
60,0	1117,5	1103,8	1090,2	1076,9	1063,7
70,0	1120,7	1107,1	1093,7	1080,6	1067,6
80,0	1123,8	1110,4	1097,2	1084,2	1071,3
90,0	1126,8	1113,6	1100,5	1087,6	1074,9
100,0	1129,7	1116,7	1103,8	1091,0	1078,5

## APÊNDICE C – COMPRESSIBILIDADE ISOTÉRMICA

Tabela C.1 - Compressibilidade isotérmica para os líquidos iônicos com [NTf<sub>2</sub>]<sup>a</sup>

<i>P</i> / MPa	[(C2)3S][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K					[C3C1C1Im][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	0,51	0,57	0,63	0,69	0,75	0,48	0,53	0,59	0,65	0,71
5,0	0,50	0,55	0,61	0,67	0,73	0,47	0,52	0,57	0,63	0,69
10,0	0,48	0,54	0,59	0,64	0,70	0,46	0,51	0,56	0,61	0,66
20,0	0,46	0,51	0,55	0,60	0,65	0,44	0,48	0,53	0,57	0,62
30,0	0,44	0,48	0,52	0,56	0,61	0,42	0,46	0,50	0,54	0,58
40,0	0,42	0,46	0,49	0,53	0,57	0,40	0,44	0,47	0,51	0,55
50,0	0,40	0,44	0,47	0,50	0,54	0,38	0,42	0,45	0,49	0,52
60,0	0,39	0,42	0,45	0,48	0,51	0,37	0,40	0,43	0,46	0,49
70,0	0,37	0,40	0,43	0,46	0,48	0,36	0,39	0,41	0,44	0,47
80,0	0,36	0,38	0,41	0,44	0,46	0,34	0,37	0,40	0,42	0,45
90,0	0,34	0,37	0,39	0,42	0,44	0,33	0,36	0,38	0,41	0,43
100,0	0,33	0,36	0,38	0,40	0,42	0,32	0,35	0,37	0,39	0,41
<i>P</i> / MPa	[C3C1Pyr][NTf <sub>2</sub> ]					[C <sub>3</sub> C <sub>1</sub> C <sub>1</sub> Im][NTf <sub>2</sub> ]				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	0,49	0,54	0,59	0,65	0,70	0,49	0,55	0,60	0,66	0,73
5,0	0,48	0,53	0,58	0,63	0,68	0,48	0,53	0,59	0,64	0,70
10,0	0,47	0,51	0,56	0,61	0,66	0,47	0,52	0,57	0,62	0,68
20,0	0,45	0,49	0,53	0,57	0,61	0,45	0,49	0,54	0,59	0,64
30,0	0,43	0,47	0,50	0,54	0,58	0,43	0,47	0,51	0,56	0,60
40,0	0,41	0,44	0,48	0,51	0,55	0,41	0,45	0,49	0,53	0,57
50,0	0,39	0,43	0,46	0,49	0,52	0,39	0,43	0,46	0,50	0,54
60,0	0,38	0,41	0,44	0,47	0,49	0,38	0,41	0,44	0,48	0,51
70,0	0,36	0,39	0,42	0,44	0,47	0,37	0,40	0,43	0,46	0,49
80,0	0,35	0,38	0,40	0,43	0,45	0,35	0,38	0,41	0,44	0,46
90,0	0,34	0,36	0,39	0,41	0,43	0,34	0,37	0,39	0,42	0,44
100,0	0,33	0,35	0,37	0,39	0,41	0,33	0,36	0,38	0,40	0,43

<sup>a</sup> Incerteza padrão:  $u(P) = 0,7$  MPa,  $u(T) = 0,02$  K. Incerteza expandida ( $k = 2$ ):  $U(\kappa_T) = 0,012$  GPa<sup>-1</sup>.

Tabela C.2 – Compressibilidade isotérmica para os líquidos iônicos com [I]<sup>a</sup>

<i>P</i> /MPa	[C4C1Im][I], <i>T</i> / K					[C6C1Im][I], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	0,35	0,38	0,41	0,44	0,47	0,39	0,42	0,46	0,49	0,53
5,0	0,35	0,38	0,41	0,43	0,46	0,38	0,42	0,45	0,48	0,52
10,0	0,34	0,37	0,40	0,43	0,45	0,38	0,41	0,44	0,47	0,50
20,0	0,33	0,36	0,39	0,41	0,44	0,37	0,39	0,42	0,45	0,48
30,0	0,32	0,35	0,37	0,40	0,42	0,35	0,38	0,41	0,44	0,46
40,0	0,32	0,34	0,36	0,38	0,41	0,34	0,37	0,40	0,42	0,45
50,0	0,31	0,33	0,35	0,37	0,39	0,33	0,36	0,38	0,41	0,43
60,0	0,30	0,32	0,34	0,36	0,38	0,32	0,35	0,37	0,39	0,41
70,0	0,29	0,31	0,33	0,35	0,37	0,32	0,34	0,36	0,38	0,40
80,0	0,29	0,30	0,32	0,34	0,36	0,31	0,33	0,35	0,37	0,39
90,0	0,28	0,30	0,31	0,33	0,35	0,30	0,32	0,34	0,36	0,38
100,0	0,27	0,29	0,31	0,32	0,34	0,29	0,31	0,33	0,35	0,36

[C3C1Im][I]					
0,2	0,34	0,36	0,38	0,40	0,42
5,0	0,33	0,35	0,38	0,40	0,42
10,0	0,33	0,35	0,37	0,39	0,41
20,0	0,32	0,34	0,36	0,38	0,40
30,0	0,31	0,33	0,35	0,37	0,39
40,0	0,30	0,32	0,34	0,36	0,37
50,0	0,30	0,31	0,33	0,35	0,36
60,0	0,29	0,31	0,32	0,34	0,35
70,0	0,28	0,30	0,32	0,33	0,34
80,0	0,28	0,29	0,31	0,32	0,34
90,0	0,27	0,29	0,30	0,31	0,33
100,0	0,27	0,28	0,29	0,31	0,32

<sup>a</sup> Incerteza padrão:  $u(P) = 0,7$  MPa,  $u(T) = 0,02$  K. Incerteza expandida ( $k = 2$ ):  $U(\kappa_T) = 0,012$  GPa<sup>-1</sup>.

Tabela C.3 – Compressibilidade isotérmica para os líquidos iônicos sem similaridade<sup>a</sup>

<i>P</i> /MPa	[C8C1Im][OTF], <i>T</i> / K					[C4C1PYR][DCA], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	0,52	0,57	0,64	0,70	0,77	0,32	0,35	0,38	0,40	0,43
5,0	0,50	0,56	0,62	0,68	0,74	0,32	0,35	0,37	0,40	0,43
10,0	0,49	0,54	0,60	0,65	0,71	0,32	0,34	0,37	0,39	0,42
20,0	0,47	0,51	0,56	0,61	0,66	0,31	0,34	0,36	0,38	0,41
30,0	0,44	0,49	0,53	0,57	0,62	0,30	0,33	0,35	0,38	0,40
40,0	0,42	0,46	0,50	0,54	0,58	0,30	0,32	0,34	0,37	0,39
50,0	0,41	0,44	0,48	0,51	0,55	0,29	0,32	0,34	0,36	0,38
60,0	0,39	0,42	0,45	0,49	0,52	0,29	0,31	0,33	0,35	0,37
70,0	0,37	0,40	0,43	0,46	0,49	0,28	0,30	0,32	0,34	0,36
80,0	0,36	0,39	0,41	0,44	0,47	0,28	0,30	0,32	0,34	0,36
90,0	0,35	0,37	0,40	0,42	0,45	0,27	0,29	0,31	0,33	0,35
100,0	0,33	0,36	0,38	0,40	0,43	0,27	0,29	0,31	0,32	0,34

<i>P</i> /MPa	[C2C1Im][C1COO]				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	0,35	0,38	0,41	0,44	0,47
5,0	0,34	0,37	0,40	0,43	0,46
10,0	0,33	0,36	0,39	0,42	0,45
20,0	0,32	0,35	0,38	0,41	0,43
30,0	0,31	0,34	0,36	0,39	0,42
40,0	0,30	0,33	0,35	0,38	0,40
50,0	0,30	0,32	0,34	0,36	0,38
60,0	0,29	0,31	0,33	0,35	0,37
70,0	0,28	0,30	0,32	0,34	0,36
80,0	0,27	0,29	0,31	0,33	0,34
90,0	0,26	0,28	0,30	0,32	0,33
100,0	0,26	0,27	0,29	0,31	0,32

<sup>a</sup> Incerteza padrão:  $u(P) = 0,7$  MPa,  $u(T) = 0,02$  K. Incerteza expandida ( $k = 2$ ):  $U(\kappa_T) = 0,012$  GPa<sup>-1</sup>.

## APÊNDICE D – EXPANSIVIDADE ISOBÁRICA

Tabela D.1 - Expansividade isobárica para os líquidos iônicos com [NTf<sub>2</sub>]<sup>a</sup>

<i>P</i> / MPa	[(C2)3S][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K					[C3C1C1Im][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
	$(\alpha_p) \cdot 10^3$					$(\alpha_p) \cdot 10^3$				
0,2	0,66	0,66	0,65	0,65	0,64	0,66	0,66	0,65	0,64	0,64
5,0	0,65	0,65	0,64	0,64	0,63	0,65	0,65	0,64	0,63	0,62
10,0	0,64	0,64	0,63	0,62	0,62	0,64	0,64	0,63	0,62	0,61
20,0	0,62	0,62	0,61	0,60	0,59	0,62	0,62	0,61	0,60	0,59
30,0	0,61	0,60	0,59	0,58	0,58	0,61	0,60	0,59	0,58	0,57
40,0	0,59	0,58	0,58	0,57	0,56	0,59	0,58	0,58	0,57	0,56
50,0	0,58	0,57	0,56	0,55	0,54	0,58	0,57	0,56	0,55	0,54
60,0	0,56	0,56	0,55	0,54	0,53	0,57	0,56	0,55	0,54	0,53
70,0	0,55	0,55	0,54	0,53	0,52	0,55	0,55	0,54	0,53	0,52
80,0	0,54	0,53	0,53	0,52	0,51	0,54	0,53	0,53	0,52	0,51
90,0	0,53	0,52	0,52	0,51	0,50	0,53	0,52	0,52	0,51	0,50
100,0	0,52	0,51	0,51	0,50	0,49	0,52	0,52	0,51	0,50	0,49
	[C3C1Pyr][NTf <sub>2</sub> ]					[C <sub>3</sub> C <sub>1</sub> C <sub>1</sub> Im][NTf <sub>2</sub> ]				
	$(\alpha_p) \cdot 10^3$					$(\alpha_p) \cdot 10^3$				
0,2	0,63	0,63	0,62	0,62	0,62	0,65	0,65	0,65	0,65	0,65
5,0	0,62	0,62	0,62	0,61	0,61	0,64	0,64	0,64	0,64	0,64
10,0	0,61	0,61	0,61	0,60	0,60	0,63	0,63	0,63	0,63	0,62
20,0	0,59	0,59	0,59	0,58	0,58	0,61	0,61	0,61	0,61	0,60
30,0	0,58	0,58	0,57	0,57	0,56	0,60	0,59	0,59	0,59	0,58
40,0	0,56	0,56	0,56	0,55	0,55	0,58	0,58	0,57	0,57	0,57
50,0	0,55	0,55	0,54	0,54	0,54	0,57	0,56	0,56	0,55	0,55
60,0	0,54	0,54	0,53	0,53	0,52	0,55	0,55	0,55	0,54	0,54
70,0	0,53	0,52	0,52	0,52	0,51	0,54	0,54	0,53	0,53	0,52
80,0	0,52	0,51	0,51	0,51	0,50	0,53	0,53	0,52	0,52	0,51
90,0	0,51	0,50	0,50	0,50	0,49	0,52	0,51	0,51	0,51	0,50
100,0	0,50	0,50	0,49	0,49	0,49	0,51	0,50	0,50	0,50	0,49

<sup>a</sup> Incerteza padrão:  $u(P) = 0,7$  MPa,  $u(T) = 0,02$  K. Incerteza expandida ( $k = 2$ ):  $U(\alpha_p) = 0,001$  K<sup>-1</sup>.



Tabela D.2 – Expansividade isobárica para os líquidos iônicos com [I]<sup>a</sup>

<i>P</i> /MPa	[C4C1Im][I], <i>T</i> / K					[C6C1Im][I], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
	$(\alpha_p) \cdot 10^3$					$(\alpha_p) \cdot 10^3$				
0,2	0,53	0,52	0,52	0,52	0,51	0,56	0,55	0,53	0,52	0,51
5,0	0,52	0,52	0,52	0,51	0,51	0,55	0,54	0,53	0,51	0,50
10,0	0,52	0,51	0,51	0,51	0,50	0,55	0,53	0,52	0,51	0,49
20,0	0,51	0,50	0,50	0,50	0,49	0,53	0,52	0,51	0,50	0,48
30,0	0,50	0,49	0,49	0,49	0,48	0,52	0,51	0,50	0,48	0,47
40,0	0,49	0,48	0,48	0,48	0,47	0,51	0,50	0,49	0,47	0,46
50,0	0,48	0,47	0,47	0,47	0,46	0,50	0,49	0,48	0,46	0,45
60,0	0,47	0,47	0,46	0,46	0,46	0,49	0,48	0,47	0,45	0,44
70,0	0,46	0,46	0,45	0,45	0,45	0,48	0,47	0,46	0,45	0,43
80,0	0,45	0,45	0,45	0,44	0,44	0,47	0,46	0,45	0,44	0,43
90,0	0,44	0,44	0,44	0,44	0,43	0,47	0,45	0,44	0,43	0,42
100,0	0,44	0,44	0,43	0,43	0,43	0,46	0,45	0,44	0,42	0,41
	[C3C1Im][I]									
	$(\alpha_p) \cdot 10^3$									
0,2	0,53	0,53	0,53	0,53	0,54					
5,0	0,52	0,52	0,53	0,53	0,53					
10,0	0,52	0,52	0,52	0,53	0,53					
20,0	0,51	0,51	0,52	0,52	0,52					
30,0	0,50	0,50	0,51	0,51	0,51					
40,0	0,49	0,50	0,50	0,50	0,51					
50,0	0,49	0,49	0,49	0,50	0,50					
60,0	0,48	0,48	0,49	0,49	0,50					
70,0	0,47	0,48	0,48	0,49	0,49					
80,0	0,47	0,47	0,48	0,48	0,48					
90,0	0,46	0,46	0,47	0,47	0,48					
100,0	0,45	0,46	0,46	0,47	0,47					

<sup>a</sup> Incerteza padrão:  $u(P) = 0,7$  MPa,  $u(T) = 0,02$  K. Incerteza expandida ( $k = 2$ ):  $U(\alpha_p) = 0.0011$  K<sup>-1</sup>.

Tabela D.3 – Expansividade isobárica para os líquidos iônicos sem similaridade<sup>a</sup>

[C8C1Im][OTF], T / K						[C4C1PYR][DCA], T / K				
P/MPa	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
	$(\alpha_p) \cdot 10^3$					$(\alpha_p) \cdot 10^3$				
0,2	0,65	0,64	0,64	0,63	0,63	0,55	0,54	0,54	0,53	0,53
5,0	0,64	0,63	0,63	0,62	0,61	0,54	0,54	0,53	0,53	0,52
10,0	0,63	0,62	0,62	0,61	0,60	0,54	0,53	0,53	0,52	0,52
20,0	0,61	0,60	0,60	0,59	0,58	0,53	0,52	0,52	0,51	0,51
30,0	0,59	0,58	0,58	0,57	0,56	0,52	0,51	0,51	0,50	0,50
40,0	0,58	0,57	0,56	0,55	0,54	0,51	0,50	0,50	0,49	0,49
50,0	0,56	0,55	0,55	0,54	0,53	0,50	0,49	0,49	0,48	0,48
60,0	0,55	0,54	0,53	0,52	0,51	0,49	0,49	0,48	0,48	0,47
70,0	0,54	0,53	0,52	0,51	0,50	0,48	0,48	0,47	0,47	0,46
80,0	0,52	0,52	0,51	0,50	0,49	0,47	0,47	0,47	0,46	0,46
90,0	0,51	0,51	0,50	0,49	0,48	0,47	0,46	0,46	0,45	0,45
100,0	0,50	0,50	0,49	0,48	0,47	0,46	0,45	0,45	0,45	0,44
[C2C1Im][C1COO]										
	$(\alpha_p) \cdot 10^3$									
0,2	0,56	0,56	0,55	0,55	0,55					
5,0	0,55	0,55	0,55	0,55	0,54					
10,0	0,54	0,54	0,54	0,54	0,54					
20,0	0,53	0,53	0,53	0,53	0,53					
30,0	0,52	0,52	0,52	0,52	0,52					
40,0	0,51	0,51	0,51	0,51	0,51					
50,0	0,50	0,50	0,50	0,50	0,50					
60,0	0,49	0,49	0,49	0,49	0,49					
70,0	0,49	0,49	0,48	0,48	0,48					
80,0	0,48	0,48	0,48	0,48	0,48					
90,0	0,47	0,47	0,47	0,47	0,47					
100,0	0,46	0,46	0,46	0,46	0,46					

<sup>a</sup> Incerteza padrão:  $u(P) = 0,7$  MPa,  $u(T) = 0,02$  K. Incerteza expandida ( $k = 2$ ):  $U(\alpha_p) = 0.0011$  K<sup>-1</sup>.

## APÊNDICE E – COEFICIENTE DE PRESSÃO TÉRMICO

Tabela E.1 - Coeficiente de pressão térmico para os líquidos iônicos com [NTf<sub>2</sub>]<sup>a</sup>

<i>P</i> / MPa	[(C2)3S][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K					[C3C1C1Im][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	1,30	1,16	1,04	0,94	0,85	1,38	1,23	1,10	0,99	0,90
5,0	1,31	1,18	1,06	0,96	0,87	1,39	1,24	1,12	1,01	0,91
10,0	1,33	1,19	1,07	0,97	0,88	1,40	1,26	1,13	1,02	0,93
20,0	1,36	1,22	1,11	1,00	0,91	1,43	1,28	1,16	1,05	0,96
30,0	1,38	1,25	1,14	1,04	0,95	1,45	1,31	1,19	1,08	0,99
40,0	1,41	1,28	1,17	1,07	0,98	1,48	1,34	1,22	1,11	1,02
50,0	1,44	1,31	1,20	1,10	1,01	1,50	1,36	1,24	1,14	1,04
60,0	1,47	1,34	1,23	1,13	1,04	1,53	1,39	1,27	1,17	1,07
70,0	1,49	1,37	1,26	1,16	1,07	1,55	1,42	1,30	1,19	1,10
80,0	1,52	1,39	1,28	1,19	1,10	1,58	1,44	1,32	1,22	1,13
90,0	1,54	1,42	1,31	1,22	1,13	1,60	1,47	1,35	1,25	1,16
100,0	1,57	1,45	1,34	1,25	1,16	1,62	1,49	1,38	1,27	1,18
<i>P</i> / MPa	[C3C1Pyr][NTf <sub>2</sub> ]					[C <sub>3</sub> C <sub>1</sub> C <sub>1</sub> Im][NTf <sub>2</sub> ]				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	1,28	1,16	1,05	0,96	0,88	1,33	1,20	1,08	0,98	0,89
5,0	1,29	1,17	1,07	0,98	0,90	1,34	1,21	1,09	0,99	0,90
10,0	1,31	1,19	1,08	0,99	0,91	1,35	1,22	1,10	1,00	0,92
20,0	1,33	1,21	1,11	1,02	0,94	1,37	1,24	1,13	1,03	0,94
30,0	1,35	1,24	1,14	1,05	0,97	1,40	1,27	1,15	1,06	0,97
40,0	1,38	1,26	1,16	1,08	1,00	1,42	1,29	1,18	1,08	1,00
50,0	1,40	1,29	1,19	1,11	1,03	1,44	1,31	1,20	1,11	1,02
60,0	1,42	1,31	1,22	1,14	1,06	1,46	1,33	1,23	1,13	1,05
70,0	1,45	1,34	1,25	1,16	1,09	1,48	1,36	1,25	1,16	1,08
80,0	1,47	1,36	1,27	1,19	1,12	1,50	1,38	1,27	1,18	1,10
90,0	1,49	1,39	1,30	1,22	1,15	1,52	1,40	1,30	1,21	1,13
100,0	1,51	1,41	1,32	1,24	1,18	1,54	1,42	1,32	1,23	1,15

<sup>a</sup> Incerteza padrão:  $u(P) = 0,7$  MPa,  $u(T) = 0,02$  K. Incerteza expandida ( $k = 2$ ):  $U(\gamma_v) = 0.002$  GPa/K.

Tabela E.2 – Coeficiente de pressão térmico para os líquidos iônicos com [I]<sup>a</sup>

<i>P</i> /MPa	[C4C1Im][I], <i>T</i> / K					[C6C1Im][I], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	1,50	1,37	1,26	1,17	1,09	1,43	1,29	1,17	1,06	0,96
5,0	1,50	1,38	1,27	1,18	1,10	1,44	1,30	1,17	1,07	0,97
10,0	1,51	1,39	1,28	1,19	1,11	1,45	1,31	1,18	1,07	0,98
20,0	1,52	1,40	1,30	1,20	1,12	1,46	1,32	1,20	1,09	1,00
30,0	1,53	1,41	1,31	1,22	1,14	1,47	1,34	1,21	1,11	1,01
40,0	1,54	1,43	1,33	1,24	1,16	1,49	1,35	1,23	1,13	1,03
50,0	1,55	1,44	1,34	1,25	1,18	1,50	1,36	1,25	1,14	1,05
60,0	1,56	1,45	1,36	1,27	1,20	1,51	1,38	1,26	1,16	1,06
70,0	1,57	1,46	1,37	1,29	1,21	1,53	1,39	1,28	1,17	1,08
80,0	1,58	1,48	1,38	1,30	1,23	1,54	1,41	1,29	1,19	1,10
90,0	1,59	1,49	1,40	1,32	1,25	1,55	1,42	1,31	1,21	1,11
100,0	1,60	1,50	1,41	1,33	1,26	1,56	1,43	1,32	1,22	1,13

[C3C1Im][I]					
0,2	1,56	1,47	1,39	1,33	1,27
5,0	1,57	1,48	1,40	1,34	1,28
10,0	1,58	1,49	1,41	1,35	1,29
20,0	1,59	1,51	1,43	1,37	1,31
30,0	1,61	1,52	1,45	1,39	1,34
40,0	1,62	1,54	1,47	1,41	1,36
50,0	1,63	1,56	1,49	1,43	1,38
60,0	1,65	1,57	1,51	1,45	1,40
70,0	1,66	1,59	1,53	1,47	1,42
80,0	1,68	1,60	1,54	1,49	1,45
90,0	1,69	1,62	1,56	1,51	1,47
100,0	1,70	1,64	1,58	1,53	1,49

<sup>a</sup> Incerteza padrão:  $u(P) = 0,7$  MPa,  $u(T) = 0,02$  K. Incerteza expandida ( $k = 2$ ):  $U(\gamma_v) = 0.002$  GPa/K.

Tabela E.3 – Coeficiente de pressão térmico para os líquidos iônicos sem similaridade<sup>a</sup>

<i>P</i> /MPa	[C8C1Im][OTF], <i>T</i> / K					[C4C1PYR][DCA], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	1,26	1,12	1,01	0,90	0,81	1,70	1,55	1,43	1,32	1,22
5,0	1,27	1,14	1,02	0,92	0,83	1,70	1,55	1,43	1,32	1,22
10,0	1,28	1,15	1,03	0,93	0,84	1,70	1,56	1,43	1,32	1,23
20,0	1,31	1,18	1,06	0,96	0,87	1,70	1,56	1,44	1,33	1,24
30,0	1,33	1,20	1,09	0,99	0,90	1,70	1,56	1,44	1,34	1,24
40,0	1,36	1,23	1,12	1,02	0,93	1,70	1,57	1,45	1,34	1,25
50,0	1,38	1,26	1,15	1,05	0,96	1,70	1,57	1,45	1,35	1,26
60,0	1,41	1,28	1,17	1,08	0,99	1,70	1,57	1,46	1,36	1,27
70,0	1,43	1,31	1,20	1,10	1,02	1,71	1,58	1,46	1,36	1,27
80,0	1,46	1,33	1,23	1,13	1,05	1,71	1,58	1,47	1,37	1,28
90,0	1,48	1,36	1,25	1,16	1,07	1,71	1,58	1,47	1,37	1,29
100,0	1,50	1,38	1,28	1,18	1,10	1,71	1,58	1,48	1,38	1,30

<i>P</i> /MPa	[C2C1Im][C1COO]				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	1,61	1,47	1,35	1,25	1,16
5,0	1,62	1,48	1,37	1,26	1,18
10,0	1,63	1,49	1,38	1,28	1,19
20,0	1,65	1,52	1,40	1,30	1,22
30,0	1,67	1,54	1,43	1,33	1,25
40,0	1,69	1,56	1,45	1,36	1,27
50,0	1,71	1,58	1,47	1,38	1,30
60,0	1,73	1,60	1,50	1,41	1,33
70,0	1,74	1,62	1,52	1,43	1,35
80,0	1,76	1,65	1,55	1,46	1,38
90,0	1,78	1,67	1,57	1,48	1,41
100,0	1,80	1,69	1,59	1,51	1,43

<sup>a</sup> Incerteza padrão:  $u(P) = 0,7$  MPa,  $u(T) = 0,02$  K. Incerteza expandida ( $k = 2$ ):  $U(\gamma_v) = 0.002$  GPa/K.

## APÊNDICE F – PRESSÃO INTERNA

Tabela F.1 - Pressão interna para os líquidos iônicos com [NTf<sub>2</sub>]

<i>P</i> /MPa	[(C2)3S][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K					[C3C1C1Im][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	387,43	375,20	362,88	350,46	337,96	410,58	397,30	383,92	370,44	356,89
5,0	386,73	375,13	363,40	351,54	339,56	409,49	396,80	383,98	371,03	357,96
10,0	385,98	375,02	363,90	352,62	341,19	408,34	396,25	384,00	371,59	359,02
20,0	384,38	374,70	364,78	354,64	344,27	405,95	395,06	383,94	372,59	361,02
30,0	382,68	374,25	365,52	356,49	347,17	403,47	393,76	383,75	373,44	362,83
40,0	380,88	373,68	366,12	358,19	349,88	400,89	392,34	383,43	374,15	364,47
50,0	378,98	373,00	366,59	359,73	352,42	398,22	390,82	382,99	374,71	365,97
60,0	376,99	372,21	366,93	361,14	354,81	395,47	389,20	382,44	375,15	367,31
70,0	374,91	371,32	367,16	362,41	357,05	392,64	387,49	381,77	375,46	368,51
80,0	372,75	370,33	367,28	363,56	359,15	389,72	385,69	381,01	375,65	369,59
90,0	370,51	369,25	367,29	364,59	361,11	386,73	383,79	380,14	375,73	370,53
100,0	368,19	368,08	367,20	365,50	362,95	383,67	381,82	379,18	375,70	371,36
	[C3C1Pyr][NTf <sub>2</sub> ]					[C <sub>3</sub> C <sub>1</sub> C <sub>1</sub> Im][NTf <sub>2</sub> ]				
0,2	382,15	374,41	366,57	358,61	350,54	396,84	386,10	375,26	364,33	353,30
5,0	380,87	373,77	366,55	359,20	351,72	395,16	385,03	374,78	364,42	353,96
10,0	379,51	373,08	366,50	359,78	352,92	393,39	383,89	374,25	364,49	354,59
20,0	376,72	371,59	366,30	360,82	355,16	389,77	381,51	373,08	364,48	355,71
30,0	373,83	370,00	365,97	361,72	357,24	386,05	379,01	371,77	364,32	356,66
40,0	370,86	368,31	365,51	362,47	359,16	382,25	376,41	370,34	364,02	357,43
50,0	367,80	366,51	364,95	363,09	360,93	378,35	373,71	368,79	363,57	358,05
60,0	364,65	364,62	364,27	363,59	362,57	374,38	370,91	367,12	363,00	358,52
70,0	361,43	362,64	363,49	363,97	364,07	370,32	368,01	365,35	362,30	358,85
80,0	358,14	360,57	362,61	364,24	365,44	366,19	365,03	363,47	361,48	359,04
90,0	354,77	358,42	361,63	364,40	366,70	361,98	361,96	361,49	360,56	359,11
100,0	351,33	356,18	360,57	364,46	367,84	357,70	358,81	359,42	359,52	359,06

<sup>a</sup> Incerteza padrão:  $u(P) = 0,7$  MPa,  $u(T) = 0,02$  K. Incerteza expandida ( $k = 2$ ):  $U(P_i) = 0.21$  MPa.

Tabela F.2 - Pressão interna para os líquidos iônicos com [I]<sup>a</sup>

<i>P</i> /MPa	[C4C1Im][I], <i>T</i> / K					[C6C1Im][I], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	446,04	443,10	439,96	436,61	433,05	427,11	416,66	405,80	394,52	382,84
5,0	442,89	440,44	437,78	434,90	431,80	424,30	414,25	403,76	392,83	381,44
10,0	439,60	437,66	435,50	433,11	430,48	421,36	411,73	401,63	391,03	379,95
20,0	432,97	432,05	430,88	429,46	427,77	415,43	406,64	397,29	387,38	376,91
30,0	426,29	426,38	426,19	425,73	424,97	409,45	401,48	392,88	383,65	373,77
40,0	419,56	420,65	421,45	421,93	422,10	403,40	396,25	388,40	379,84	370,55
50,0	412,79	414,87	416,64	418,06	419,15	397,31	390,96	383,85	375,94	367,23
60,0	405,97	409,04	411,77	414,13	416,12	391,15	385,61	379,22	371,98	363,84
70,0	399,11	403,16	406,84	410,13	413,02	384,95	380,20	374,54	367,94	360,37
80,0	392,21	397,23	401,85	406,07	409,85	378,70	374,74	369,79	363,83	356,82
90,0	385,26	391,25	396,82	401,95	406,62	372,40	369,22	364,98	359,65	353,19
100,0	378,27	385,22	391,73	397,76	403,31	366,05	363,65	360,11	355,41	349,50
	[C3C1Im][I]									
0,2	466,38	475,74	485,18	494,68	504,26					
5,0	463,63	473,59	483,62	493,72	503,90					
10,0	460,76	471,33	481,97	492,70	503,50					
20,0	454,99	466,78	478,65	490,60	502,64					
30,0	449,17	462,17	475,26	488,44	501,70					
40,0	443,30	457,51	471,81	486,21	500,70					
50,0	437,40	452,81	468,31	483,92	499,62					
60,0	431,45	448,05	464,76	481,57	498,48					
70,0	425,46	443,25	461,15	479,16	497,27					
80,0	419,44	438,41	457,49	476,69	495,99					
90,0	413,37	433,52	453,79	474,16	494,66					
100,0	407,27	428,59	450,03	471,59	493,26					

<sup>a</sup> Incerteza padrão:  $u(P) = 0,7$  MPa,  $u(T) = 0,02$  K. Incerteza expandida ( $k = 2$ ):  $U(P_i) = 0.21$  MPa.

Tabela F.3 - Pressão interna para os líquidos iônicos sem similaridade<sup>a</sup>

<i>P</i> /MPa	[C8C1Im][OTF], <i>T</i> / K					[C4C1PYR][DCA], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	375,05	362,46	349,80	337,06	324,27	506,18	501,39	496,30	490,91	485,22
5,0	373,97	361,96	349,85	337,64	325,33	501,59	497,16	492,43	487,39	482,03
10,0	372,81	361,41	349,87	338,19	326,38	496,79	492,75	488,38	483,70	478,69
20,0	370,41	360,20	349,79	339,16	328,34	487,17	483,89	480,26	476,29	471,96
30,0	367,90	358,87	349,56	339,97	330,10	477,52	474,98	472,09	468,82	465,16
40,0	365,30	357,42	349,20	340,62	331,68	467,82	466,04	463,87	461,29	458,31
50,0	362,60	355,86	348,71	341,13	333,10	458,09	457,05	455,60	453,72	451,40
60,0	359,81	354,19	348,09	341,49	334,36	448,33	448,02	447,28	446,09	444,43
70,0	356,93	352,42	347,37	341,73	335,48	438,53	438,96	438,92	438,41	437,40
80,0	353,97	350,56	346,53	341,84	336,45	428,70	429,85	430,52	430,68	430,32
90,0	350,93	348,61	345,59	341,83	337,30	418,83	420,71	422,07	422,90	423,18
100,0	347,82	346,57	344,55	341,71	338,02	408,94	411,53	413,59	415,08	415,99
	[C2C1Im][C1COO]									
0,2	479,08	475,17	471,14	466,99	462,70					
5,0	477,18	473,90	470,49	466,94	463,27					
10,0	475,19	472,56	469,78	466,88	463,82					
20,0	471,16	469,81	468,32	466,67	464,86					
30,0	467,07	467,00	466,77	466,37	465,79					
40,0	462,92	464,12	465,14	465,98	466,62					
50,0	458,72	461,17	463,44	465,50	467,35					
60,0	454,46	458,17	461,67	464,95	468,00					
70,0	450,15	455,10	459,82	464,31	468,55					
80,0	445,79	451,97	457,92	463,60	469,02					
90,0	441,38	448,79	455,94	462,82	469,41					
100,0	436,92	445,56	453,91	461,97	469,72					

<sup>a</sup> Incerteza padrão:  $u(P) = 0,7$  MPa,  $u(T) = 0,02$  K. Incerteza expandida ( $k = 2$ ):  $U(P_i) = 0.21$  MPa.



**APÊNDICE G – DENSIDADE DETERMINADA PELOS MODELOS DE CONTRIBUIÇÃO DE GRUPOS E DESVIOS RELATIVOS**

Tabela G.1 - Modelo de Evangelista *et al.* (2015) para os líquidos iônicos com [NTf<sub>2</sub>]

<i>P</i> / MPa	[(C2)3S][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K					[C3C1C1Im][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	-	-	-	-	-	1452,46	1421,11	1391,09	1362,31	1334,69
5,0	-	-	-	-	-	1455,61	1424,43	1394,60	1366,05	1338,72
10,0	-	-	-	-	-	1458,81	1427,78	1398,14	1369,82	1342,77
20,0	-	-	-	-	-	1464,95	1434,22	1404,93	1377,02	1350,45
30,0	-	-	-	-	-	1470,81	1440,33	1411,34	1383,79	1357,64
40,0	-	-	-	-	-	1476,40	1446,15	1417,43	1390,19	1364,41
50,0	-	-	-	-	-	1481,74	1451,71	1423,22	1396,26	1370,81
60,0	-	-	-	-	-	1486,88	1457,02	1428,75	1402,03	1376,87
70,0	-	-	-	-	-	1491,81	1462,12	1434,04	1407,54	1382,64
80,0	-	-	-	-	-	1496,55	1467,02	1439,11	1412,82	1388,14
90,0	-	-	-	-	-	1501,13	1471,73	1443,98	1417,87	1393,41
100,0	-	-	-	-	-	1505,55	1476,28	1448,67	1422,72	1398,45
	[C3C1Pyr][NTf <sub>2</sub> ]					[C <sub>3</sub> C <sub>1</sub> C <sub>1</sub> Im][NTf <sub>2</sub> ]				
0,2	1425,47	1402,65	1380,55	1359,14	1338,38	1430,77	1399,91	1370,36	1342,03	1314,85
5,0	1428,56	1405,92	1384,04	1362,88	1342,42	1433,87	1403,17	1373,81	1345,72	1318,82
10,0	1431,70	1409,24	1387,56	1366,64	1346,48	1437,01	1406,48	1377,31	1349,43	1322,80
20,0	1437,73	1415,59	1394,29	1373,82	1354,18	1443,07	1412,82	1383,99	1356,52	1330,37
30,0	1443,47	1421,63	1400,66	1380,57	1361,40	1448,83	1418,84	1390,31	1363,19	1337,46
40,0	1448,96	1427,37	1406,70	1386,96	1368,18	1454,34	1424,58	1396,31	1369,49	1344,12
50,0	1454,21	1432,85	1412,44	1393,01	1374,60	1459,61	1430,05	1402,01	1375,47	1350,43
60,0	1459,25	1438,10	1417,93	1398,77	1380,68	1464,66	1435,28	1407,46	1381,16	1356,40
70,0	1464,08	1443,13	1423,18	1404,27	1386,46	1469,52	1440,31	1412,67	1386,59	1362,08
80,0	1468,74	1447,96	1428,21	1409,53	1391,98	1474,20	1445,13	1417,66	1391,79	1367,50
90,0	1473,24	1452,62	1433,05	1414,57	1397,26	1478,71	1449,77	1422,46	1396,76	1372,69
100,0	1477,58	1457,10	1437,70	1419,42	1402,32	1483,06	1454,25	1427,08	1401,55	1377,66

Tabela G.2 – Desvios relativos pelo modelo de Evangelista *et al.* (2015) para os líquidos iônicos com [NTf<sub>2</sub>]

<i>P</i> / MPa	[(C2)3S][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K					[C3C1C1Im][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	-	-	-	-	-	0,71%	0,16%	0,32%	0,81%	1,24%
5,0	-	-	-	-	-	0,70%	0,14%	0,37%	0,84%	1,27%
10,0	-	-	-	-	-	0,68%	0,12%	0,40%	0,88%	1,30%
20,0	-	-	-	-	-	0,66%	0,08%	0,45%	0,94%	1,37%
30,0	-	-	-	-	-	0,63%	0,04%	0,50%	1,00%	1,44%
40,0	-	-	-	-	-	0,60%	0,00%	0,55%	1,06%	1,51%
50,0	-	-	-	-	-	0,56%	0,05%	0,61%	1,12%	1,57%
60,0	-	-	-	-	-	0,53%	0,09%	0,66%	1,18%	1,65%
70,0	-	-	-	-	-	0,49%	0,13%	0,71%	1,24%	1,72%
80,0	-	-	-	-	-	0,46%	0,18%	0,76%	1,30%	1,79%
90,0	-	-	-	-	-	0,42%	0,22%	0,81%	1,36%	1,86%
100,0	-	-	-	-	-	0,38%	0,26%	0,86%	1,42%	1,93%
	[C3C1Pyr][NTf <sub>2</sub> ]					[C <sub>3</sub> C <sub>1</sub> C <sub>1</sub> Im][NTf <sub>2</sub> ]				
0,2	0,02%	0,05%	0,08%	0,09%	0,07%	1,06%	0,51%	0,00%	0,47%	0,88%
5,0	0,03%	0,08%	0,06%	0,09%	0,07%	1,04%	0,48%	0,04%	0,51%	0,94%
10,0	0,05%	0,11%	0,10%	0,12%	0,11%	1,02%	0,45%	0,08%	0,55%	0,98%
20,0	0,09%	0,16%	0,15%	0,19%	0,18%	0,98%	0,40%	0,15%	0,63%	1,07%
30,0	0,13%	0,21%	0,21%	0,25%	0,24%	0,94%	0,34%	0,21%	0,71%	1,16%
40,0	0,17%	0,25%	0,26%	0,31%	0,31%	0,90%	0,29%	0,28%	0,78%	1,24%
50,0	0,21%	0,31%	0,33%	0,39%	0,38%	0,85%	0,24%	0,34%	0,86%	1,32%
60,0	0,25%	0,35%	0,38%	0,44%	0,45%	0,81%	0,18%	0,41%	0,94%	1,40%
70,0	0,29%	0,41%	0,44%	0,50%	0,51%	0,77%	0,13%	0,47%	1,00%	1,49%
80,0	0,33%	0,45%	0,50%	0,56%	0,58%	0,73%	0,08%	0,53%	1,08%	1,56%
90,0	0,37%	0,51%	0,55%	0,62%	0,64%	0,67%	0,02%	0,60%	1,15%	1,64%
100,0	0,41%	0,55%	0,60%	0,68%	0,71%	0,63%	0,03%	0,66%	1,22%	1,72%

Tabela G.3 - Modelo de Gardas e Coutinho (2008) para os líquidos iônicos com [NTf<sub>2</sub>]

<i>P</i> / MPa	[(C2)3S][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K					[C3C1C1Im][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	-	-	-	-	-	1414,36	1391,19	1368,77	1347,07	1326,04
5,0	-	-	-	-	-	1418,39	1395,10	1372,55	1350,73	1329,58
10,0	-	-	-	-	-	1422,62	1399,19	1376,51	1354,56	1333,30
20,0	-	-	-	-	-	1431,15	1407,44	1384,50	1362,29	1340,79
30,0	-	-	-	-	-	1439,79	1415,79	1392,58	1370,11	1348,36
40,0	-	-	-	-	-	1448,53	1424,24	1400,75	1378,02	1356,03
50,0	-	-	-	-	-	1457,37	1432,79	1409,02	1386,03	1363,77
60,0	-	-	-	-	-	1466,33	1441,44	1417,39	1394,13	1371,61
70,0	-	-	-	-	-	1475,39	1450,20	1425,86	1402,32	1379,54
80,0	-	-	-	-	-	1484,57	1459,07	1434,43	1410,61	1387,56
90,0	-	-	-	-	-	1493,86	1468,04	1443,10	1418,99	1395,68
100,0	-	-	-	-	-	1503,27	1477,13	1451,88	1427,48	1403,89
	[C3C1Pyr][NTf <sub>2</sub> ]					[C <sub>3</sub> C <sub>1</sub> C <sub>1</sub> Im][NTf <sub>2</sub> ]				
0,2	1435,53	1412,02	1389,26	1367,23	1345,89	1383,09	1360,44	1338,51	1317,29	1296,72
5,0	1439,62	1415,98	1393,10	1370,94	1349,48	1387,04	1364,25	1342,21	1320,86	1300,19
10,0	1443,92	1420,13	1397,12	1374,84	1353,25	1391,17	1368,25	1346,08	1324,61	1303,82
20,0	1452,58	1428,51	1405,22	1382,68	1360,86	1399,51	1376,32	1353,89	1332,18	1311,15
30,0	1461,34	1436,98	1413,42	1390,62	1368,55	1407,96	1384,49	1361,79	1339,82	1318,55
40,0	1470,21	1445,56	1421,72	1398,65	1376,32	1416,50	1392,75	1369,78	1347,56	1326,05
50,0	1479,19	1454,24	1430,11	1406,78	1384,19	1425,15	1401,11	1377,87	1355,39	1333,62
60,0	1488,28	1463,02	1438,61	1414,99	1392,14	1433,91	1409,58	1386,05	1363,30	1341,29
70,0	1497,48	1471,91	1447,20	1423,31	1400,19	1442,78	1418,14	1394,34	1371,32	1349,04
80,0	1506,79	1480,91	1455,90	1431,72	1408,33	1451,75	1426,81	1402,72	1379,42	1356,89
90,0	1516,22	1490,02	1464,70	1440,23	1416,57	1460,84	1435,59	1411,20	1387,62	1364,82
100,0	1525,78	1499,24	1473,61	1448,85	1424,90	1470,04	1444,48	1419,78	1395,92	1372,85

Tabela G.4 – Desvios relativos pelo modelo de Gardas e Coutinho (2008) para os líquidos iônicos com [NTf<sub>2</sub>]

<i>P</i> / MPa	[(C2)3S][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K					[C3C1C1Im][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	-	-	-	-	-	2,63%	2,65%	2,62%	2,62%	2,59%
5,0	-	-	-	-	-	2,58%	2,62%	2,65%	2,66%	2,65%
10,0	-	-	-	-	-	2,52%	2,59%	2,64%	2,68%	2,70%
20,0	-	-	-	-	-	2,37%	2,49%	2,60%	2,70%	2,78%
30,0	-	-	-	-	-	2,20%	2,37%	2,53%	2,68%	2,81%
40,0	-	-	-	-	-	2,01%	2,22%	2,42%	2,63%	2,81%
50,0	-	-	-	-	-	1,80%	2,06%	2,30%	2,55%	2,78%
60,0	-	-	-	-	-	1,57%	1,87%	2,15%	2,44%	2,72%
70,0	-	-	-	-	-	1,32%	1,66%	1,98%	2,31%	2,64%
80,0	-	-	-	-	-	1,06%	1,43%	1,79%	2,16%	2,53%
90,0	-	-	-	-	-	0,78%	1,18%	1,58%	1,99%	2,40%
100,0	-	-	-	-	-	0,49%	0,92%	1,36%	1,80%	2,25%
	[C3C1Pyr][NTf <sub>2</sub> ]					[C <sub>3</sub> C <sub>1</sub> C <sub>1</sub> Im][NTf <sub>2</sub> ]				
0,2	-0,69%	-0,61%	-0,55%	-0,51%	-0,49%	2,31%	2,32%	2,33%	2,30%	2,25%
5,0	-0,74%	-0,63%	-0,59%	-0,50%	-0,45%	2,26%	2,31%	2,34%	2,35%	2,34%
10,0	-0,80%	-0,66%	-0,59%	-0,48%	-0,39%	2,20%	2,28%	2,34%	2,38%	2,40%
20,0	-0,94%	-0,75%	-0,63%	-0,46%	-0,31%	2,07%	2,20%	2,32%	2,41%	2,50%
30,0	-1,11%	-0,86%	-0,70%	-0,48%	-0,28%	1,91%	2,09%	2,26%	2,41%	2,56%
40,0	-1,30%	-1,02%	-0,80%	-0,53%	-0,28%	1,73%	1,95%	2,17%	2,37%	2,57%
50,0	-1,50%	-1,18%	-0,92%	-0,59%	-0,31%	1,53%	1,79%	2,06%	2,31%	2,55%
60,0	-1,74%	-1,37%	-1,07%	-0,71%	-0,38%	1,31%	1,61%	1,93%	2,22%	2,50%
70,0	-1,99%	-1,58%	-1,24%	-0,84%	-0,48%	1,07%	1,42%	1,76%	2,09%	2,43%
80,0	-2,25%	-1,81%	-1,43%	-1,00%	-0,59%	0,81%	1,19%	1,58%	1,96%	2,33%
90,0	-2,54%	-2,06%	-1,65%	-1,18%	-0,73%	0,54%	0,95%	1,38%	1,79%	2,20%
100,0	-2,84%	-2,32%	-1,88%	-1,38%	-0,89%	0,25%	0,70%	1,17%	1,62%	2,06%

Tabela G.5 – Modelo proposto por Jacquemin *et al.* (2008b, 2008a) para os líquidos iônicos com [NTf<sub>2</sub>]

<i>P</i> / MPa	[(C2)3S][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K					[C3C1C1Im][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
5,0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
10,0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
20,0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
30,0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
40,0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
50,0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
60,0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
70,0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
80,0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
90,0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
100,0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	[C3C1Pyr][NTf <sub>2</sub> ]					[C <sub>3</sub> C <sub>1</sub> C <sub>1</sub> Im][NTf <sub>2</sub> ]				
0,2	1433,58	1408,76	1384,70	1361,39	1338,77	1425,07	1400,24	1376,69	1354,33	1333,08
5,0	1437,13	1412,55	1388,79	1365,79	1343,39	1432,27	1406,90	1382,98	1360,38	1338,90
10,0	1440,74	1416,40	1392,94	1370,25	1348,08	1439,65	1413,73	1389,45	1366,60	1344,87
20,0	1447,71	1423,82	1400,94	1378,83	1357,05	1454,05	1427,09	1402,10	1378,76	1356,53
30,0	1454,36	1430,91	1408,56	1386,97	1365,55	1467,98	1440,07	1414,41	1390,57	1367,83
40,0	1460,72	1437,69	1415,83	1394,73	1373,63	1481,48	1452,69	1426,39	1402,05	1378,79
50,0	1466,82	1444,19	1422,79	1402,13	1381,31	1494,56	1464,96	1438,06	1413,24	1389,46
60,0	1472,68	1450,43	1429,47	1409,21	1388,65	1507,26	1476,90	1449,43	1424,13	1399,83
70,0	1478,32	1456,44	1435,88	1416,00	1395,67	1519,59	1488,54	1460,52	1434,75	1409,94
80,0	1483,77	1462,23	1442,05	1422,52	1402,39	1531,57	1499,87	1471,34	1445,11	1419,80
90,0	1489,03	1467,82	1447,99	1428,78	1408,84	1543,23	1510,92	1481,90	1455,22	1429,42
100,0	1494,11	1473,22	1453,73	1434,81	1415,04	1554,57	1521,70	1492,21	1465,10	1438,81

Tabela G.6 – Desvios relativos pelo modelo proposto por Jacquemin *et al.* (2008b, 2008a) para os líquidos iônicos com [NTf<sub>2</sub>]

<i>P</i> / MPa	[(C2)3S][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K					[C3C1C1Im][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
5,0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
10,0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
20,0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
30,0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
40,0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
50,0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
60,0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
70,0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
80,0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
90,0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
100,0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	[C3C1Pyr][NTf <sub>2</sub> ]					[C <sub>3</sub> C <sub>1</sub> C <sub>1</sub> Im][NTf <sub>2</sub> ]				
0,2	-0,55%	-0,38%	-0,22%	-0,08%	0,04%	0,65%	0,53%	0,46%	0,45%	0,49%
5,0	-0,57%	-0,39%	-0,28%	-0,13%	0,00%	0,93%	0,75%	0,63%	0,57%	0,57%
10,0	-0,58%	-0,40%	-0,29%	-0,14%	-0,01%	1,21%	0,97%	0,80%	0,71%	0,67%
20,0	-0,60%	-0,42%	-0,32%	-0,18%	-0,03%	1,75%	1,41%	1,16%	1,00%	0,88%
30,0	-0,63%	-0,44%	-0,35%	-0,21%	-0,06%	2,27%	1,84%	1,52%	1,28%	1,09%
40,0	-0,64%	-0,47%	-0,38%	-0,25%	-0,09%	2,78%	2,27%	1,87%	1,58%	1,31%
50,0	-0,66%	-0,48%	-0,40%	-0,26%	-0,11%	3,27%	2,68%	2,22%	1,86%	1,53%
60,0	-0,67%	-0,50%	-0,43%	-0,30%	-0,13%	3,74%	3,09%	2,56%	2,15%	1,76%
70,0	-0,68%	-0,51%	-0,45%	-0,33%	-0,15%	4,20%	3,48%	2,91%	2,44%	1,97%
80,0	-0,69%	-0,53%	-0,47%	-0,35%	-0,17%	4,65%	3,87%	3,24%	2,71%	2,20%
90,0	-0,70%	-0,54%	-0,49%	-0,38%	-0,18%	5,07%	4,24%	3,56%	2,99%	2,43%
100,0	-0,70%	-0,55%	-0,51%	-0,40%	-0,19%	5,48%	4,61%	3,87%	3,26%	2,64%

Tabela G.7 – Modelo proposto por Qiao *et al.* (2010) para os líquidos iônicos com [NTf<sub>2</sub>]

<i>P</i> / MPa	[(C2)3S][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K					[C3C1C1Im][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	-	-	-	-	-	1435,00	1417,55	1400,09	1382,64	1365,18
5,0	-	-	-	-	-	1445,88	1428,42	1410,97	1393,51	1376,06
10,0	-	-	-	-	-	1457,20	1439,75	1422,30	1404,84	1387,39
20,0	-	-	-	-	-	1479,86	1462,41	1444,96	1427,50	1410,05
30,0	-	-	-	-	-	1502,52	1485,07	1467,62	1450,16	1432,71
40,0	-	-	-	-	-	1525,18	1507,73	1490,27	1472,82	1455,37
50,0	-	-	-	-	-	1547,84	1530,39	1512,93	1495,48	1478,03
60,0	-	-	-	-	-	1570,50	1553,05	1535,59	1518,14	1500,68
70,0	-	-	-	-	-	1593,16	1575,71	1558,25	1540,80	1523,34
80,0	-	-	-	-	-	1615,82	1598,36	1580,91	1563,46	1546,00
90,0	-	-	-	-	-	1638,48	1621,02	1603,57	1586,12	1568,66
100,0	-	-	-	-	-	1661,14	1643,68	1626,23	1608,77	1591,32
<i>P</i> / MPa	[C3C1Pyr][NTf <sub>2</sub> ]					[C <sub>3</sub> C <sub>1</sub> C <sub>1</sub> Im][NTf <sub>2</sub> ]				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	1443,59	1443,94	1444,29	1444,63	1444,98	1403,77	1386,55	1369,32	1352,10	1334,88
5,0	1445,90	1446,25	1446,60	1446,95	1447,29	1414,41	1397,19	1379,97	1362,75	1345,53
10,0	1448,31	1448,66	1449,01	1449,35	1449,70	1425,50	1408,28	1391,06	1373,84	1356,61
20,0	1453,13	1453,48	1453,82	1454,17	1454,52	1447,68	1430,46	1413,24	1396,01	1378,79
30,0	1457,95	1458,29	1458,64	1458,99	1459,34	1469,86	1452,64	1435,41	1418,19	1400,97
40,0	1462,76	1463,11	1463,46	1463,81	1464,16	1492,04	1474,81	1457,59	1440,37	1423,15
50,0	1467,58	1467,93	1468,28	1468,63	1468,97	1514,21	1496,99	1479,77	1462,55	1445,33
60,0	1472,40	1472,75	1473,10	1473,44	1473,79	1536,39	1519,17	1501,95	1484,73	1467,50
70,0	1477,22	1477,57	1477,91	1478,26	1478,61	1558,57	1541,35	1524,13	1506,91	1489,68
80,0	1482,04	1482,38	1482,73	1483,08	1483,43	1580,75	1563,53	1546,31	1529,08	1511,86
90,0	1486,85	1487,20	1487,55	1487,90	1488,24	1602,93	1585,71	1568,48	1551,26	1534,04
100,0	1491,67	1492,02	1492,37	1492,71	1493,06	1625,11	1607,88	1590,66	1573,44	1556,22

Tabela G.8 – Desvios relativos pelo modelo proposto por Qiao *et al.* (2010) para os líquidos iônicos com [NTf<sub>2</sub>]

<i>P</i> / MPa	[(C2)3S][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K					[C3C1C1Im][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	-	-	-	-	-	1,21%	0,80%	0,39%	0,05%	0,29%
5,0	-	-	-	-	-	0,69%	0,30%	0,07%	0,43%	0,76%
10,0	-	-	-	-	-	0,15%	0,23%	0,60%	0,93%	1,25%
20,0	-	-	-	-	-	0,95%	1,32%	1,65%	1,96%	2,24%
30,0	-	-	-	-	-	2,06%	2,41%	2,72%	3,00%	3,27%
40,0	-	-	-	-	-	3,18%	3,51%	3,81%	4,07%	4,31%
50,0	-	-	-	-	-	4,30%	4,62%	4,90%	5,15%	5,37%
60,0	-	-	-	-	-	5,42%	5,73%	6,01%	6,24%	6,43%
70,0	-	-	-	-	-	6,55%	6,86%	7,12%	7,33%	7,51%
80,0	-	-	-	-	-	7,69%	7,98%	8,24%	8,44%	8,60%
90,0	-	-	-	-	-	8,82%	9,12%	9,36%	9,55%	9,70%
100,0	-	-	-	-	-	9,96%	10,25%	10,49%	10,67%	10,80%
	[C3C1Pyr][NTf <sub>2</sub> ]					[C <sub>3</sub> C <sub>1</sub> C <sub>1</sub> Im][NTf <sub>2</sub> ]				
0,2	-1,25%	-2,89%	-4,54%	-6,20%	-7,89%	0,85%	0,45%	0,08%	0,28%	0,63%
5,0	-1,18%	-2,78%	-4,45%	-6,08%	-7,73%	0,33%	0,05%	0,41%	0,75%	1,07%
10,0	-1,11%	-2,68%	-4,32%	-5,92%	-7,55%	0,21%	0,58%	0,92%	1,25%	1,55%
20,0	-0,98%	-2,51%	-4,11%	-5,65%	-7,21%	1,30%	1,65%	1,96%	2,26%	2,53%
30,0	-0,88%	-2,36%	-3,92%	-5,42%	-6,93%	2,40%	2,73%	3,03%	3,29%	3,53%
40,0	-0,78%	-2,24%	-3,76%	-5,21%	-6,68%	3,51%	3,83%	4,10%	4,35%	4,56%
50,0	-0,71%	-2,13%	-3,61%	-5,02%	-6,46%	4,62%	4,93%	5,18%	5,42%	5,61%
60,0	-0,65%	-2,05%	-3,49%	-4,87%	-6,27%	5,75%	6,04%	6,28%	6,49%	6,67%
70,0	-0,61%	-1,97%	-3,39%	-4,74%	-6,10%	6,87%	7,15%	7,39%	7,59%	7,74%
80,0	-0,57%	-1,91%	-3,30%	-4,63%	-5,95%	8,01%	8,28%	8,50%	8,68%	8,83%
90,0	-0,55%	-1,86%	-3,23%	-4,53%	-5,83%	9,13%	9,40%	9,61%	9,79%	9,92%
100,0	-0,54%	-1,83%	-3,18%	-4,45%	-5,72%	10,27%	10,53%	10,72%	10,90%	11,02%



Tabela G.9 – Modelo proposto por Lazzús (2010) para os líquidos iônicos com [NTf<sub>2</sub>]

<i>P</i> / MPa	[(C2)3S][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K					[C3C1C1Im][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	1385,35	1367,37	1349,40	1331,42	1313,45	1460,73	1442,76	1424,78	1406,81	1388,83
5,0	1388,08	1370,11	1352,13	1334,16	1316,18	1463,47	1445,49	1427,52	1409,54	1391,57
10,0	1390,93	1372,96	1354,98	1337,01	1319,03	1466,32	1448,34	1430,37	1412,39	1394,42
20,0	1396,63	1378,66	1360,68	1342,71	1324,73	1472,01	1454,04	1436,06	1418,09	1400,11
30,0	1402,33	1384,35	1366,38	1348,40	1330,43	1477,71	1459,74	1441,76	1423,79	1405,81
40,0	1408,03	1390,05	1372,08	1354,10	1336,13	1483,41	1465,44	1447,46	1429,49	1411,51
50,0	1413,73	1395,75	1377,78	1359,80	1341,83	1489,11	1471,13	1453,16	1435,18	1417,21
60,0	1419,42	1401,45	1383,47	1365,50	1347,52	1494,81	1476,83	1458,86	1440,88	1422,91
70,0	1425,12	1407,15	1389,17	1371,20	1353,22	1500,50	1482,53	1464,55	1446,58	1428,60
80,0	1430,82	1412,84	1394,87	1376,89	1358,92	1506,20	1488,23	1470,25	1452,28	1434,30
90,0	1436,52	1418,54	1400,57	1382,59	1364,62	1511,90	1493,93	1475,95	1457,98	1440,00
100,0	1442,22	1424,24	1406,27	1388,29	1370,32	1517,60	1499,62	1481,65	1463,67	1445,70
	[C3C1Pyr][NTf <sub>2</sub> ]					[C <sub>3</sub> C <sub>1</sub> C <sub>1</sub> Im][NTf <sub>2</sub> ]				
0,2	1407,26	1389,28	1371,31	1353,33	1335,36	1424,71	1406,74	1388,76	1370,79	1352,81
5,0	1409,99	1392,02	1374,04	1356,07	1338,09	1427,45	1409,47	1391,50	1373,52	1355,55
10,0	1412,84	1394,87	1376,89	1358,92	1340,94	1430,30	1412,32	1394,35	1376,37	1358,40
20,0	1418,54	1400,57	1382,59	1364,62	1346,64	1435,99	1418,02	1400,04	1382,07	1364,09
30,0	1424,24	1406,26	1388,29	1370,31	1352,34	1441,69	1423,72	1405,74	1387,77	1369,79
40,0	1429,94	1411,96	1393,99	1376,01	1358,04	1447,39	1429,41	1411,44	1393,46	1375,49
50,0	1435,63	1417,66	1399,68	1381,71	1363,73	1453,09	1435,11	1417,14	1399,16	1381,19
60,0	1441,33	1423,36	1405,38	1387,41	1369,43	1458,79	1440,81	1422,84	1404,86	1386,89
70,0	1447,03	1429,06	1411,08	1393,11	1375,13	1464,48	1446,51	1428,53	1410,56	1392,58
80,0	1452,73	1434,75	1416,78	1398,80	1380,83	1470,18	1452,21	1434,23	1416,26	1398,28
90,0	1458,43	1440,45	1422,48	1404,50	1386,53	1475,88	1457,90	1439,93	1421,95	1403,98
100,0	1464,12	1446,15	1428,17	1410,20	1392,22	1481,58	1463,60	1445,63	1427,65	1409,68

Tabela G.10 – Desvios relativos pelo modelo proposto por Lazzús (2010) para os líquidos iônicos com [NTf<sub>2</sub>]

<i>P</i> / MPa	[(C2)3S][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K					[C3C1C1Im][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	4,94%	4,61%	4,32%	4,03%	3,80%	0,56%	0,96%	1,36%	1,70%	2,03%
5,0	4,98%	4,69%	4,42%	4,16%	3,94%	0,52%	0,89%	1,25%	1,58%	1,89%
10,0	5,02%	4,76%	4,50%	4,27%	4,08%	0,48%	0,83%	1,17%	1,47%	1,76%
20,0	5,08%	4,85%	4,64%	4,45%	4,31%	0,42%	0,74%	1,03%	1,29%	1,52%
30,0	5,12%	4,92%	4,74%	4,60%	4,49%	0,38%	0,66%	0,91%	1,13%	1,33%
40,0	5,14%	4,97%	4,82%	4,72%	4,64%	0,35%	0,61%	0,83%	1,01%	1,16%
50,0	5,15%	5,01%	4,88%	4,80%	4,76%	0,34%	0,57%	0,76%	0,91%	1,03%
60,0	5,14%	5,02%	4,93%	4,87%	4,87%	0,34%	0,54%	0,71%	0,83%	0,92%
70,0	5,13%	5,03%	4,95%	4,92%	4,95%	0,36%	0,54%	0,68%	0,77%	0,82%
80,0	5,10%	5,01%	4,96%	4,96%	5,00%	0,39%	0,54%	0,66%	0,73%	0,75%
90,0	5,05%	5,00%	4,95%	4,98%	5,05%	0,41%	0,56%	0,66%	0,70%	0,70%
100,0	5,01%	4,96%	4,94%	4,98%	5,08%	0,46%	0,59%	0,67%	0,69%	0,66%
	[C3C1Pyr][NTf <sub>2</sub> ]					[C <sub>3</sub> C <sub>1</sub> C <sub>1</sub> Im][NTf <sub>2</sub> ]				
0,2	1,29%	1,01%	0,74%	0,51%	0,29%	0,63%	1,00%	1,34%	1,67%	1,98%
5,0	1,33%	1,07%	0,79%	0,59%	0,40%	0,59%	0,93%	1,25%	1,54%	1,82%
10,0	1,37%	1,13%	0,87%	0,68%	0,52%	0,55%	0,87%	1,16%	1,43%	1,68%
20,0	1,43%	1,22%	0,99%	0,85%	0,74%	0,48%	0,77%	1,01%	1,24%	1,44%
30,0	1,46%	1,29%	1,10%	0,99%	0,91%	0,44%	0,69%	0,90%	1,08%	1,23%
40,0	1,48%	1,33%	1,17%	1,10%	1,05%	0,41%	0,63%	0,80%	0,96%	1,06%
50,0	1,48%	1,37%	1,23%	1,20%	1,17%	0,40%	0,59%	0,73%	0,85%	0,93%
60,0	1,47%	1,38%	1,26%	1,25%	1,26%	0,41%	0,57%	0,68%	0,76%	0,81%
70,0	1,45%	1,38%	1,29%	1,30%	1,32%	0,42%	0,56%	0,65%	0,71%	0,72%
80,0	1,42%	1,36%	1,29%	1,32%	1,37%	0,45%	0,57%	0,63%	0,66%	0,65%
90,0	1,37%	1,34%	1,28%	1,33%	1,40%	0,48%	0,58%	0,62%	0,64%	0,60%
100,0	1,32%	1,30%	1,26%	1,32%	1,42%	0,53%	0,61%	0,63%	0,62%	0,57%

Tabela G.11 – Modelo proposto por Paduszynski e Domanska (2012) para os líquidos iônicos com [NTf<sub>2</sub>]

<i>P</i> / MPa	[(C2)3S][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K					[C3C1C1Im][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	1411,50	1389,15	1367,49	1346,50	1326,14	1450,88	1427,90	1405,64	1384,06	1363,13
5,0	1414,28	1392,22	1370,85	1350,13	1330,03	1453,74	1431,06	1409,09	1387,79	1367,14
10,0	1417,13	1395,35	1374,26	1353,81	1333,97	1456,66	1434,28	1412,60	1391,57	1371,19
20,0	1422,64	1401,41	1380,83	1360,87	1341,50	1462,33	1440,51	1419,35	1398,84	1378,93
30,0	1427,94	1407,21	1387,10	1367,58	1348,63	1467,78	1446,47	1425,79	1405,73	1386,25
40,0	1433,05	1412,77	1393,09	1373,97	1355,39	1473,03	1452,19	1431,95	1412,30	1393,20
50,0	1437,98	1418,13	1398,83	1380,07	1361,83	1478,10	1457,69	1437,85	1418,57	1399,82
60,0	1442,75	1423,28	1404,34	1385,92	1367,98	1482,99	1462,99	1443,52	1424,58	1406,14
70,0	1447,36	1428,25	1409,65	1391,52	1373,86	1487,73	1468,10	1448,97	1430,34	1412,19
80,0	1451,83	1433,06	1414,76	1396,91	1379,51	1492,33	1473,04	1454,23	1435,89	1417,99
90,0	1456,16	1437,71	1419,70	1402,11	1384,93	1496,78	1477,82	1459,30	1441,22	1423,57
100,0	1460,37	1442,22	1424,47	1407,12	1390,15	1501,11	1482,45	1464,21	1446,37	1428,94
	[C3C1Pyr][NTf <sub>2</sub> ]					[C <sub>3</sub> C <sub>1</sub> C <sub>1</sub> Im][NTf <sub>2</sub> ]				
0,2	1428,65	1406,02	1384,10	1362,85	1342,25	1417,35	1394,90	1373,15	1352,07	1331,63
5,0	1431,47	1409,14	1387,50	1366,53	1346,19	1420,14	1397,99	1376,53	1355,72	1335,55
10,0	1434,34	1412,31	1390,95	1370,25	1350,18	1423,00	1401,14	1379,95	1359,42	1339,50
20,0	1439,92	1418,43	1397,61	1377,40	1357,80	1428,53	1407,22	1386,55	1366,51	1347,06
30,0	1445,29	1424,30	1403,95	1384,19	1365,01	1433,86	1413,04	1392,84	1373,25	1354,22
40,0	1450,46	1429,94	1410,01	1390,66	1371,86	1438,99	1418,63	1398,86	1379,66	1361,01
50,0	1455,45	1435,35	1415,82	1396,84	1378,37	1443,94	1424,00	1404,63	1385,79	1367,47
60,0	1460,27	1440,57	1421,40	1402,75	1384,60	1448,72	1429,18	1410,16	1391,66	1373,65
70,0	1464,94	1445,61	1426,77	1408,43	1390,55	1453,35	1434,17	1415,49	1397,29	1379,55
80,0	1469,46	1450,47	1431,95	1413,89	1396,26	1457,84	1439,00	1420,62	1402,70	1385,22
90,0	1473,85	1455,18	1436,94	1419,14	1401,76	1462,19	1443,67	1425,58	1407,92	1390,67
100,0	1478,11	1459,74	1441,77	1424,21	1407,04	1466,42	1448,19	1430,37	1412,95	1395,91

Tabela G.12 – Desvios relativos pelo modelo proposto por Padaszynski e Domanska (2012) para os líquidos iônicos com [NTf<sub>2</sub>]

<i>P</i> / MPa	[(C2)3S][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K					[C3C1C1Im][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	3,15%	3,10%	3,03%	2,94%	2,87%	0,12%	0,08%	0,00%	0,05%	0,14%
5,0	3,19%	3,15%	3,10%	3,02%	2,93%	0,15%	0,11%	0,06%	0,01%	0,10%
10,0	3,23%	3,20%	3,14%	3,06%	2,99%	0,18%	0,15%	0,09%	0,02%	0,07%
20,0	3,31%	3,28%	3,23%	3,16%	3,10%	0,24%	0,20%	0,15%	0,09%	0,02%
30,0	3,39%	3,35%	3,29%	3,24%	3,19%	0,30%	0,25%	0,20%	0,15%	0,08%
40,0	3,46%	3,42%	3,37%	3,32%	3,27%	0,35%	0,30%	0,25%	0,21%	0,15%
50,0	3,52%	3,49%	3,43%	3,38%	3,34%	0,40%	0,35%	0,30%	0,26%	0,21%
60,0	3,58%	3,54%	3,49%	3,45%	3,42%	0,45%	0,40%	0,35%	0,31%	0,27%
70,0	3,65%	3,61%	3,55%	3,51%	3,50%	0,50%	0,44%	0,39%	0,36%	0,34%
80,0	3,70%	3,65%	3,60%	3,58%	3,56%	0,54%	0,49%	0,44%	0,41%	0,39%
90,0	3,76%	3,71%	3,66%	3,64%	3,63%	0,59%	0,52%	0,48%	0,46%	0,45%
100,0	3,81%	3,76%	3,71%	3,69%	3,70%	0,63%	0,56%	0,52%	0,50%	0,51%
	[C3C1Pyr][NTf <sub>2</sub> ]					[C <sub>3</sub> C <sub>1</sub> C <sub>1</sub> Im][NTf <sub>2</sub> ]				
0,2	-0,21%	-0,19%	-0,18%	-0,19%	-0,22%	0,11%	0,15%	0,20%	0,28%	0,38%
5,0	-0,17%	-0,14%	-0,19%	-0,18%	-0,21%	0,07%	0,11%	0,16%	0,23%	0,32%
10,0	-0,13%	-0,11%	-0,14%	-0,14%	-0,16%	0,03%	0,07%	0,11%	0,18%	0,27%
20,0	-0,06%	-0,04%	-0,08%	-0,08%	-0,08%	0,04%	0,00%	0,04%	0,10%	0,17%
30,0	0,00%	0,03%	-0,02%	-0,01%	-0,02%	0,11%	0,07%	0,03%	0,02%	0,08%
40,0	0,06%	0,07%	0,03%	0,05%	0,04%	0,17%	0,13%	0,10%	0,04%	0,00%
50,0	0,12%	0,13%	0,09%	0,12%	0,11%	0,23%	0,19%	0,16%	0,11%	0,07%
60,0	0,18%	0,18%	0,14%	0,16%	0,16%	0,29%	0,24%	0,22%	0,18%	0,15%
70,0	0,23%	0,24%	0,19%	0,21%	0,22%	0,34%	0,30%	0,27%	0,24%	0,22%
80,0	0,28%	0,28%	0,24%	0,26%	0,27%	0,39%	0,35%	0,32%	0,31%	0,29%
90,0	0,33%	0,33%	0,28%	0,30%	0,32%	0,45%	0,40%	0,38%	0,36%	0,35%
100,0	0,38%	0,37%	0,32%	0,34%	0,37%	0,50%	0,45%	0,43%	0,42%	0,42%

Tabela G.13 – Modelo proposto por Taherifard and Raeissi (2016) para os líquidos iônicos com [NTf<sub>2</sub>]

<i>P</i> / MPa	[(C2)3S][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K					[C3C1C1Im][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	1451,62	1433,56	1415,93	1398,73	1381,95	1437,85	1419,61	1401,82	1384,47	1367,54
5,0	1453,96	1435,83	1418,15	1400,90	1384,07	1440,21	1421,91	1404,06	1386,65	1369,67
10,0	1456,40	1438,21	1420,48	1403,17	1386,28	1442,68	1424,31	1406,40	1388,94	1371,91
20,0	1461,31	1443,00	1425,14	1407,72	1390,72	1447,64	1429,14	1411,11	1393,54	1376,39
30,0	1466,25	1447,82	1429,84	1412,31	1395,20	1452,63	1434,01	1415,86	1398,16	1380,90
40,0	1471,22	1452,67	1434,57	1416,92	1399,70	1457,66	1438,91	1420,63	1402,82	1385,44
50,0	1476,23	1457,55	1439,33	1421,57	1404,23	1462,72	1443,84	1425,44	1407,50	1390,01
60,0	1481,28	1462,46	1444,13	1426,24	1408,80	1467,82	1448,81	1430,28	1412,22	1394,62
70,0	1486,35	1467,41	1448,95	1430,95	1413,39	1472,95	1453,81	1435,15	1416,97	1399,25
80,0	1491,46	1472,40	1453,81	1435,69	1418,01	1478,12	1458,84	1440,06	1421,76	1403,91
90,0	1496,61	1477,41	1458,70	1440,45	1422,66	1483,32	1463,91	1445,00	1426,57	1408,61
100,0	1501,79	1482,46	1463,62	1445,25	1427,34	1488,57	1469,02	1449,98	1431,42	1413,33
	[C3C1Pyr][NTf <sub>2</sub> ]					[C <sub>3</sub> C <sub>1</sub> C <sub>1</sub> Im][NTf <sub>2</sub> ]				
0,2	1436,39	1416,78	1397,69	1379,11	1361,02	1404,60	1386,49	1368,84	1351,63	1334,86
5,0	1438,93	1419,25	1400,09	1381,45	1363,30	1406,94	1388,77	1371,06	1353,80	1336,97
10,0	1441,59	1421,83	1402,61	1383,90	1365,68	1409,39	1391,16	1373,39	1356,07	1339,18
20,0	1446,93	1427,03	1407,66	1388,82	1370,47	1414,31	1395,95	1378,06	1360,63	1343,63
30,0	1452,31	1432,26	1412,75	1393,77	1375,30	1419,27	1400,78	1382,77	1365,21	1348,10
40,0	1457,73	1437,53	1417,88	1398,76	1380,15	1424,26	1405,65	1387,51	1369,83	1352,60
50,0	1463,19	1442,84	1423,05	1403,79	1385,05	1429,29	1410,54	1392,28	1374,48	1357,14
60,0	1468,69	1448,19	1428,25	1408,85	1389,98	1434,35	1415,47	1397,08	1379,16	1361,70
70,0	1474,23	1453,58	1433,49	1413,95	1394,94	1439,45	1420,44	1401,92	1383,88	1366,29
80,0	1479,82	1459,00	1438,77	1419,09	1399,94	1444,59	1425,44	1406,79	1388,62	1370,92
90,0	1485,44	1464,47	1444,09	1424,26	1404,97	1449,76	1430,47	1411,69	1393,40	1375,58
100,0	1491,11	1469,98	1449,45	1429,47	1410,04	1454,97	1435,54	1416,63	1398,21	1380,27

Tabela G.14 – Desvios relativos pelo modelo proposto por Taherifard and Raeissi (2016) para os líquidos iônicos com [NTf<sub>2</sub>]

<i>P</i> / MPa	[(C2)3S][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K					[C3C1C1Im][NTf <sub>2</sub> ], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	0,40%	0,00%	-0,40%	-0,82%	-1,22%	1,02%	0,66%	0,27%	0,08%	0,46%
5,0	0,47%	0,12%	-0,24%	-0,63%	-1,01%	1,08%	0,75%	0,42%	0,07%	0,29%
10,0	0,55%	0,23%	-0,11%	-0,47%	-0,81%	1,14%	0,84%	0,53%	0,21%	0,12%
20,0	0,68%	0,41%	0,12%	-0,18%	-0,46%	1,24%	0,99%	0,73%	0,47%	0,20%
30,0	0,79%	0,56%	0,31%	0,08%	-0,16%	1,33%	1,11%	0,90%	0,69%	0,47%
40,0	0,88%	0,69%	0,49%	0,30%	0,10%	1,39%	1,21%	1,04%	0,88%	0,71%
50,0	0,96%	0,81%	0,63%	0,48%	0,33%	1,44%	1,30%	1,16%	1,04%	0,91%
60,0	1,01%	0,89%	0,76%	0,64%	0,54%	1,47%	1,37%	1,26%	1,18%	1,09%
70,0	1,05%	0,96%	0,86%	0,78%	0,72%	1,49%	1,41%	1,34%	1,29%	1,25%
80,0	1,07%	1,01%	0,94%	0,90%	0,87%	1,48%	1,44%	1,41%	1,39%	1,38%
90,0	1,08%	1,05%	1,01%	1,00%	1,01%	1,48%	1,46%	1,45%	1,47%	1,50%
100,0	1,08%	1,08%	1,06%	1,08%	1,13%	1,46%	1,47%	1,49%	1,53%	1,59%
	[C3C1Pyr][NTf <sub>2</sub> ]					[C <sub>3</sub> C <sub>1</sub> C <sub>1</sub> Im][NTf <sub>2</sub> ]				
0,2	-0,75%	-0,95%	-1,16%	-1,38%	-1,62%	0,79%	0,45%	0,11%	0,25%	0,62%
5,0	-0,69%	-0,86%	-1,09%	-1,27%	-1,48%	0,86%	0,55%	0,24%	0,09%	0,42%
10,0	-0,64%	-0,78%	-0,98%	-1,14%	-1,31%	0,92%	0,64%	0,36%	0,06%	0,24%
20,0	-0,55%	-0,64%	-0,80%	-0,90%	-1,02%	1,03%	0,80%	0,57%	0,33%	0,08%
30,0	-0,49%	-0,53%	-0,65%	-0,70%	-0,77%	1,12%	0,94%	0,75%	0,56%	0,37%
40,0	-0,44%	-0,46%	-0,53%	-0,54%	-0,56%	1,19%	1,04%	0,91%	0,76%	0,62%
50,0	-0,41%	-0,39%	-0,42%	-0,38%	-0,38%	1,24%	1,13%	1,04%	0,93%	0,83%
60,0	-0,40%	-0,34%	-0,34%	-0,27%	-0,22%	1,28%	1,20%	1,14%	1,08%	1,02%
70,0	-0,40%	-0,31%	-0,28%	-0,18%	-0,10%	1,29%	1,26%	1,22%	1,20%	1,18%
80,0	-0,42%	-0,30%	-0,24%	-0,11%	0,01%	1,30%	1,29%	1,29%	1,31%	1,32%
90,0	-0,46%	-0,31%	-0,22%	-0,06%	0,09%	1,30%	1,31%	1,35%	1,39%	1,43%
100,0	-0,50%	-0,33%	-0,21%	-0,02%	0,16%	1,28%	1,32%	1,39%	1,45%	1,53%

Tabela G.15 – Modelo proposto por Lazzús (2010) para os líquidos iônicos com [I]

<i>P</i> / MPa	[C4C1Im][I], <i>T</i> / K					[C6C1Im][I], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	1669,63	1651,65	1633,68	1615,70	1597,73	1519,58	1501,61	1483,63	1465,66	1447,68
5,0	1672,36	1654,39	1636,41	1618,44	1600,46	1522,32	1504,34	1486,37	1468,39	1450,42
10,0	1675,21	1657,24	1639,26	1621,29	1603,31	1525,17	1507,19	1489,22	1471,24	1453,27
20,0	1680,91	1662,94	1644,96	1626,99	1609,01	1530,86	1512,89	1494,91	1476,94	1458,96
30,0	1686,61	1668,63	1650,66	1632,68	1614,71	1536,56	1518,59	1500,61	1482,64	1464,66
40,0	1692,31	1674,33	1656,36	1638,38	1620,41	1542,26	1524,28	1506,31	1488,33	1470,36
50,0	1698,01	1680,03	1662,06	1644,08	1626,11	1547,96	1529,98	1512,01	1494,03	1476,06
60,0	1703,70	1685,73	1667,75	1649,78	1631,80	1553,66	1535,68	1517,71	1499,73	1481,76
70,0	1709,40	1691,43	1673,45	1655,48	1637,50	1559,35	1541,38	1523,40	1505,43	1487,45
80,0	1715,10	1697,12	1679,15	1661,17	1643,20	1565,05	1547,08	1529,10	1511,13	1493,15
90,0	1720,80	1702,82	1684,85	1666,87	1648,90	1570,75	1552,77	1534,80	1516,82	1498,85
100,0	1726,50	1708,52	1690,55	1672,57	1654,60	1576,45	1558,47	1540,50	1522,52	1504,55
	[C3C1Im][I]									
0,2	1771,67	1753,69	1735,72	1717,74	1699,77					
5,0	1774,40	1756,43	1738,45	1720,48	1702,50					
10,0	1777,25	1759,27	1741,30	1723,32	1705,35					
20,0	1782,95	1764,97	1747,00	1729,02	1711,05					
30,0	1788,65	1770,67	1752,70	1734,72	1716,75					
40,0	1794,34	1776,37	1758,39	1740,42	1722,44					
50,0	1800,04	1782,07	1764,09	1746,12	1728,14					
60,0	1805,74	1787,76	1769,79	1751,81	1733,84					
70,0	1811,44	1793,46	1775,49	1757,51	1739,54					
80,0	1817,14	1799,16	1781,19	1763,21	1745,24					
90,0	1822,83	1804,86	1786,88	1768,91	1750,93					
100,0	1828,53	1810,56	1792,58	1774,61	1756,63					

Tabela G.16 – Desvios relativos pelo modelo proposto por Lazzús (2010) para os líquidos iônicos com [I]

<i>P</i> / MPa	[C4C1Im][I], <i>T</i> / K					[C6C1Im][I], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	-12,49%	-12,76%	-13,02%	-13,20%	-13,42%	-10,08%	-10,27%	-10,44%	-10,57%	-10,60%
5,0	-12,48%	-12,74%	-12,98%	-13,15%	-13,32%	-10,08%	-10,25%	-10,40%	-10,52%	-10,53%
10,0	-12,48%	-12,72%	-12,95%	-13,11%	-13,25%	-10,07%	-10,22%	-10,36%	-10,46%	-10,47%
20,0	-12,47%	-12,70%	-12,90%	-13,03%	-13,16%	-10,07%	-10,20%	-10,29%	-10,37%	-10,35%
30,0	-12,49%	-12,69%	-12,86%	-12,98%	-13,07%	-10,08%	-10,18%	-10,25%	-10,31%	-10,26%
40,0	-12,50%	-12,69%	-12,84%	-12,94%	-13,00%	-10,10%	-10,18%	-10,24%	-10,26%	-10,19%
50,0	-12,53%	-12,69%	-12,83%	-12,90%	-12,95%	-10,14%	-10,20%	-10,23%	-10,23%	-10,13%
60,0	-12,56%	-12,71%	-12,83%	-12,89%	-12,92%	-10,17%	-10,21%	-10,23%	-10,21%	-10,10%
70,0	-12,60%	-12,73%	-12,83%	-12,88%	-12,88%	-10,23%	-10,25%	-10,24%	-10,20%	-10,07%
80,0	-12,65%	-12,75%	-12,85%	-12,87%	-12,86%	-10,29%	-10,29%	-10,26%	-10,21%	-10,06%
90,0	-12,70%	-12,79%	-12,87%	-12,88%	-12,84%	-10,36%	-10,35%	-10,29%	-10,22%	-10,05%
100,0	-12,76%	-12,84%	-12,90%	-12,88%	-12,85%	-10,43%	-10,40%	-10,33%	-10,25%	-10,07%
	[C3C1Im][I]									
0,2	-15,46%	-15,82%	-16,17%	-16,48%	-16,84%					
5,0	-15,46%	-15,87%	-16,15%	-16,44%	-16,76%					
10,0	-15,46%	-15,85%	-16,13%	-16,39%	-16,73%					
20,0	-15,45%	-15,82%	-16,08%	-16,31%	-16,65%					
30,0	-15,46%	-15,80%	-16,05%	-16,25%	-16,59%					
40,0	-15,47%	-15,80%	-16,02%	-16,21%	-16,54%					
50,0	-15,49%	-15,80%	-16,00%	-16,16%	-16,50%					
60,0	-15,51%	-15,81%	-16,00%	-16,14%	-16,46%					
70,0	-15,54%	-15,82%	-16,00%	-16,12%	-16,44%					
80,0	-15,58%	-15,84%	-16,00%	-16,11%	-16,42%					
90,0	-15,63%	-15,87%	-16,02%	-16,11%	-16,41%					
100,0	-15,68%	-15,90%	-16,04%	-16,11%	-16,41%					



Tabela G.17 – Modelo proposto por Paduszynski e Domanska (2012) para os líquidos iônicos com [I]

<i>P</i> /MPa	[C4C1Im][I], <i>T</i> /K					[C6C1Im][I], <i>T</i> /K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	1471,28	1447,98	1425,40	1403,52	1382,30	1372,48	1350,74	1329,68	1309,27	1289,48
5,0	1474,18	1451,18	1428,90	1407,31	1386,36	1375,19	1353,73	1332,95	1312,80	1293,27
10,0	1477,14	1454,45	1432,46	1411,14	1390,47	1377,95	1356,78	1336,27	1316,38	1297,09
20,0	1482,89	1460,76	1439,31	1418,51	1398,32	1383,31	1362,67	1342,66	1323,25	1304,42
30,0	1488,42	1466,81	1445,84	1425,50	1405,75	1388,47	1368,31	1348,75	1329,77	1311,35
40,0	1493,74	1472,61	1452,09	1432,16	1412,79	1393,43	1373,72	1354,58	1335,99	1317,92
50,0	1498,88	1478,18	1458,07	1438,52	1419,51	1398,23	1378,92	1360,16	1341,92	1324,18
60,0	1503,85	1483,56	1463,82	1444,61	1425,91	1402,86	1383,93	1365,52	1347,60	1330,16
70,0	1508,65	1488,74	1469,35	1450,46	1432,05	1407,34	1388,77	1370,68	1353,06	1335,88
80,0	1513,31	1493,75	1474,68	1456,08	1437,93	1411,69	1393,44	1375,65	1358,30	1341,37
90,0	1517,83	1498,60	1479,82	1461,49	1443,58	1415,90	1397,97	1380,45	1363,35	1346,64
100,0	1522,22	1503,30	1484,80	1466,71	1449,03	1420,00	1402,35	1385,09	1368,22	1351,72
	[C3C1Im][I]									
0,2	1535,75	1511,43	1487,87	1465,03	1442,88					
5,0	1538,78	1514,78	1491,52	1468,98	1447,11					
10,0	1541,87	1518,18	1495,23	1472,98	1451,40					
20,0	1547,87	1524,77	1502,38	1480,67	1459,59					
30,0	1553,64	1531,08	1509,20	1487,97	1467,35					
40,0	1559,20	1537,14	1515,72	1494,92	1474,70					
50,0	1564,56	1542,96	1521,97	1501,56	1481,71					
60,0	1569,75	1548,57	1527,97	1507,92	1488,40					
70,0	1574,76	1553,98	1533,74	1514,02	1494,80					
80,0	1579,63	1559,21	1539,30	1519,88	1500,94					
90,0	1584,34	1564,27	1544,67	1525,53	1506,84					
100,0	1588,92	1569,17	1549,86	1530,98	1512,53					

Tabela G.18 – Desvios relativos pelo modelo proposto por Padaszynski e Domanska (2012) para os líquidos iônicos com [I]

<i>P</i> / MPa	[C4C1Im][I], <i>T</i> / K					[C6C1Im][I], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	0,87%	1,14%	1,39%	1,67%	1,87%	0,58%	0,81%	1,02%	1,23%	1,49%
5,0	0,85%	1,10%	1,35%	1,61%	1,84%	0,56%	0,79%	1,00%	1,19%	1,44%
10,0	0,82%	1,07%	1,30%	1,55%	1,78%	0,55%	0,78%	0,98%	1,17%	1,40%
20,0	0,78%	1,00%	1,22%	1,45%	1,66%	0,54%	0,74%	0,94%	1,11%	1,34%
30,0	0,73%	0,94%	1,14%	1,35%	1,56%	0,53%	0,72%	0,90%	1,07%	1,28%
40,0	0,70%	0,89%	1,07%	1,28%	1,47%	0,52%	0,70%	0,87%	1,03%	1,23%
50,0	0,67%	0,85%	1,02%	1,21%	1,40%	0,52%	0,68%	0,84%	1,00%	1,20%
60,0	0,64%	0,81%	0,97%	1,15%	1,33%	0,52%	0,68%	0,82%	0,97%	1,17%
70,0	0,62%	0,78%	0,93%	1,10%	1,28%	0,52%	0,67%	0,81%	0,95%	1,14%
80,0	0,61%	0,76%	0,90%	1,06%	1,24%	0,52%	0,66%	0,81%	0,94%	1,13%
90,0	0,59%	0,74%	0,87%	1,03%	1,21%	0,52%	0,65%	0,80%	0,93%	1,12%
100,0	0,58%	0,72%	0,84%	1,01%	1,17%	0,53%	0,66%	0,80%	0,93%	1,11%
	[C3C1Im][I]									
0,2	-0,09%	0,18%	0,42%	0,66%	0,82%					
5,0	-0,13%	0,08%	0,35%	0,58%	0,76%					
10,0	-0,16%	0,03%	0,28%	0,52%	0,66%					
20,0	-0,23%	-0,06%	0,18%	0,40%	0,49%					
30,0	-0,29%	-0,13%	0,07%	0,29%	0,35%					
40,0	-0,33%	-0,20%	-0,01%	0,19%	0,22%					
50,0	-0,38%	-0,26%	-0,08%	0,11%	0,11%					
60,0	-0,41%	-0,31%	-0,15%	0,03%	0,02%					
70,0	-0,44%	-0,35%	-0,20%	-0,03%	-0,06%					
80,0	-0,47%	-0,39%	-0,25%	-0,08%	-0,12%					
90,0	-0,50%	-0,42%	-0,29%	-0,13%	-0,19%					
100,0	-0,52%	-0,45%	-0,33%	-0,17%	-0,23%					

Tabela G.19 – Modelo proposto por Evangelista *et al.* (2015) para os líquidos iônicos com [I]

[C4C1Im][I], T / K						[C6C1Im][I], T / K				
P/ MPa	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	1416,61	1404,02	1391,65	1379,49	1367,55	1335,06	1320,73	1306,71	1292,99	1279,55
5,0	1419,68	1407,29	1395,16	1383,28	1371,68	1337,95	1323,81	1310,01	1296,54	1283,41
10,0	1422,80	1410,61	1398,70	1387,10	1375,82	1340,89	1326,93	1313,34	1300,12	1287,29
20,0	1428,79	1416,97	1405,49	1394,39	1383,69	1346,54	1332,92	1319,71	1306,95	1294,65
30,0	1434,50	1423,01	1411,91	1401,24	1391,06	1351,92	1338,60	1325,74	1313,37	1301,55
40,0	1439,95	1428,76	1418,00	1407,72	1398,00	1357,05	1344,00	1331,46	1319,45	1308,04
50,0	1445,17	1434,24	1423,79	1413,87	1404,55	1361,97	1349,17	1336,90	1325,21	1314,17
60,0	1450,17	1439,50	1429,32	1419,72	1410,76	1366,69	1354,11	1342,09	1330,69	1319,98
70,0	1454,98	1444,53	1434,61	1425,30	1416,68	1371,22	1358,84	1347,06	1335,92	1325,51
80,0	1459,61	1449,37	1439,69	1430,64	1422,31	1375,58	1363,40	1351,82	1340,92	1330,79
90,0	1464,08	1454,03	1444,56	1435,75	1427,71	1379,79	1367,78	1356,40	1345,72	1335,84
100,0	1468,39	1458,52	1449,25	1440,67	1432,87	1383,86	1372,00	1360,80	1350,33	1340,67
[C3C1Im][I]										
0,2	1468,94	1457,62	1446,47	1435,50	1424,69					
5,0	1472,12	1461,02	1450,12	1439,44	1428,99					
10,0	1475,35	1464,46	1453,81	1443,42	1433,31					
20,0	1481,57	1471,06	1460,86	1451,00	1441,51					
30,0	1487,49	1477,33	1467,53	1458,13	1449,18					
40,0	1493,14	1483,30	1473,86	1464,88	1456,41					
50,0	1498,55	1489,00	1479,89	1471,27	1463,24					
60,0	1503,74	1494,45	1485,64	1477,36	1469,71					
70,0	1508,73	1499,68	1491,14	1483,17	1475,87					
80,0	1513,53	1504,70	1496,41	1488,72	1481,74					
90,0	1518,16	1509,54	1501,47	1494,04	1487,36					
100,0	1522,63	1514,20	1506,35	1499,16	1492,74					

Tabela G.20 – Desvios relativos pelo modelo proposto por Evangelista *et al.* (2015) para os líquidos iônicos com [I]

<i>P</i> / MPa	[C4C1Im][I], <i>T</i> / K					[C6C1Im][I], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	4,55%	4,14%	3,73%	3,35%	2,92%	3,29%	3,01%	2,73%	2,45%	2,24%
5,0	4,51%	4,10%	3,68%	3,29%	2,88%	3,25%	2,98%	2,70%	2,42%	2,19%
10,0	4,47%	4,05%	3,63%	3,23%	2,82%	3,23%	2,96%	2,68%	2,39%	2,15%
20,0	4,40%	3,97%	3,54%	3,13%	2,69%	3,19%	2,91%	2,63%	2,33%	2,08%
30,0	4,33%	3,90%	3,46%	3,03%	2,59%	3,15%	2,88%	2,60%	2,29%	2,02%
40,0	4,27%	3,84%	3,40%	2,96%	2,51%	3,12%	2,85%	2,56%	2,25%	1,97%
50,0	4,23%	3,80%	3,34%	2,91%	2,44%	3,10%	2,83%	2,54%	2,23%	1,94%
60,0	4,19%	3,76%	3,30%	2,85%	2,38%	3,08%	2,82%	2,53%	2,21%	1,92%
70,0	4,16%	3,73%	3,27%	2,82%	2,34%	3,07%	2,81%	2,52%	2,21%	1,91%
80,0	4,13%	3,71%	3,25%	2,79%	2,31%	3,06%	2,80%	2,53%	2,21%	1,91%
90,0	4,11%	3,69%	3,23%	2,78%	2,29%	3,06%	2,80%	2,53%	2,21%	1,92%
100,0	4,10%	3,68%	3,22%	2,77%	2,27%	3,06%	2,81%	2,54%	2,22%	1,92%
[C3C1Im][I]										
0,2	4,26%	3,73%	3,19%	2,66%	2,07%					
5,0	4,21%	3,62%	3,11%	2,58%	2,00%					
10,0	4,16%	3,57%	3,04%	2,52%	1,89%					
20,0	4,07%	3,46%	2,93%	2,39%	1,72%					
30,0	3,98%	3,39%	2,83%	2,28%	1,58%					
40,0	3,92%	3,31%	2,75%	2,19%	1,46%					
50,0	3,86%	3,25%	2,69%	2,12%	1,36%					
60,0	3,81%	3,19%	2,63%	2,05%	1,28%					
70,0	3,77%	3,15%	2,58%	2,01%	1,21%					
80,0	3,73%	3,12%	2,54%	1,97%	1,16%					
90,0	3,70%	3,09%	2,51%	1,93%	1,11%					
100,0	3,68%	3,07%	2,49%	1,91%	1,08%					

Tabela G.21 – Modelo proposto por Taherifard and Raeissi (2016) para os líquidos iônicos com [I]

[C4C1Im][I], T / K						[C6C1Im][I], T / K				
P/MPa	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	1437,13	1418,46	1400,28	1382,55	1365,27	1343,56	1325,41	1307,74	1290,53	1273,77
5,0	1439,54	1420,82	1402,57	1384,78	1367,45	1345,91	1327,70	1309,96	1292,70	1275,88
10,0	1442,07	1423,28	1404,97	1387,12	1369,72	1348,37	1330,09	1312,29	1294,97	1278,09
20,0	1447,14	1428,22	1409,78	1391,81	1374,30	1353,31	1334,89	1316,97	1299,52	1282,53
30,0	1452,25	1433,20	1414,63	1396,54	1378,91	1358,29	1339,74	1321,68	1304,11	1287,00
40,0	1457,40	1438,21	1419,51	1401,30	1383,55	1363,30	1344,61	1326,43	1308,73	1291,50
50,0	1462,58	1443,26	1424,43	1406,09	1388,22	1368,35	1349,53	1331,21	1313,39	1296,03
60,0	1467,80	1448,34	1429,38	1410,92	1392,92	1373,44	1354,48	1336,03	1318,07	1300,60
70,0	1473,06	1453,46	1434,37	1415,77	1397,65	1378,57	1359,46	1340,88	1322,79	1305,19
80,0	1478,36	1458,61	1439,39	1420,66	1402,42	1383,73	1364,48	1345,76	1327,55	1309,82
90,0	1483,69	1463,80	1444,44	1425,59	1407,22	1388,94	1369,54	1350,68	1332,34	1314,48
100,0	1489,06	1469,03	1449,53	1430,55	1412,05	1394,18	1374,64	1355,64	1337,16	1319,18
[C3C1Im][I]										
0,2	1497,97	1479,02	1460,55	1442,53	1424,96					
5,0	1500,42	1481,41	1462,88	1444,81	1427,17					
10,0	1502,98	1483,91	1465,31	1447,18	1429,49					
20,0	1508,12	1488,92	1470,20	1451,95	1434,15					
30,0	1513,31	1493,97	1475,13	1456,75	1438,83					
40,0	1518,52	1499,06	1480,09	1461,59	1443,55					
50,0	1523,78	1504,18	1485,08	1466,46	1448,30					
60,0	1529,07	1509,33	1490,10	1471,36	1453,07					
70,0	1534,40	1514,53	1495,16	1476,29	1457,88					
80,0	1539,76	1519,75	1500,26	1481,25	1462,73					
90,0	1545,16	1525,02	1505,38	1486,25	1467,60					
100,0	1550,61	1530,31	1510,55	1491,29	1472,51					

Tabela G.22 – Desvios relativos pelo modelo proposto por Taherifard and Raeissi (2016) para os líquidos iônicos com [I]

<i>P</i> /MPa	[C4C1Im][I], <i>T</i> / K					[C6C1Im][I], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	3,17%	3,16%	3,13%	3,14%	3,08%	2,67%	2,67%	2,65%	2,64%	2,69%
5,0	3,18%	3,17%	3,17%	3,18%	3,18%	2,68%	2,70%	2,70%	2,71%	2,77%
10,0	3,17%	3,19%	3,20%	3,23%	3,25%	2,69%	2,73%	2,75%	2,78%	2,85%
20,0	3,17%	3,21%	3,24%	3,30%	3,35%	2,70%	2,76%	2,84%	2,89%	2,99%
30,0	3,14%	3,21%	3,27%	3,36%	3,44%	2,69%	2,80%	2,89%	2,98%	3,12%
40,0	3,11%	3,21%	3,29%	3,41%	3,51%	2,67%	2,81%	2,93%	3,05%	3,21%
50,0	3,08%	3,19%	3,30%	3,44%	3,58%	2,64%	2,80%	2,95%	3,10%	3,30%
60,0	3,03%	3,17%	3,30%	3,46%	3,61%	2,61%	2,79%	2,97%	3,14%	3,36%
70,0	2,97%	3,13%	3,29%	3,47%	3,65%	2,55%	2,76%	2,97%	3,17%	3,42%
80,0	2,90%	3,09%	3,27%	3,47%	3,68%	2,49%	2,73%	2,96%	3,18%	3,46%
90,0	2,83%	3,04%	3,24%	3,46%	3,69%	2,42%	2,67%	2,94%	3,18%	3,49%
100,0	2,75%	2,98%	3,20%	3,45%	3,70%	2,34%	2,62%	2,91%	3,18%	3,50%
[C3C1Im][I]										
0,2	2,37%	2,32%	2,25%	2,18%	2,05%					
5,0	2,37%	2,28%	2,26%	2,22%	2,12%					
10,0	2,36%	2,28%	2,28%	2,26%	2,16%					
20,0	2,35%	2,29%	2,31%	2,33%	2,23%					
30,0	2,32%	2,30%	2,33%	2,38%	2,28%					
40,0	2,28%	2,28%	2,34%	2,41%	2,33%					
50,0	2,24%	2,26%	2,34%	2,44%	2,37%					
60,0	2,19%	2,23%	2,33%	2,45%	2,40%					
70,0	2,13%	2,19%	2,32%	2,46%	2,41%					
80,0	2,06%	2,15%	2,29%	2,46%	2,42%					
90,0	1,99%	2,10%	2,26%	2,45%	2,42%					
100,0	1,91%	2,04%	2,22%	2,43%	2,42%					

Tabela G.23 – Modelo proposto por Evangelista *et al.* (2015) para os líquidos iônicos sem similaridade

$P / \text{MPa}$	[C8C1Im][OTF], $T / \text{K}$					[C4C1PYR][DCA], $T / \text{K}$				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	1200,49	1179,52	1159,28	1139,72	1120,80	1020,17	1007,62	995,37	983,42	971,76
5,0	1203,09	1182,27	1162,20	1142,85	1124,19	1022,38	1009,97	997,88	986,13	974,69
10,0	1205,73	1185,06	1165,16	1146,00	1127,59	1024,62	1012,34	1000,42	988,85	977,64
20,0	1210,81	1190,40	1170,81	1152,02	1134,04	1028,94	1016,91	1005,27	994,04	983,23
30,0	1215,65	1195,48	1176,16	1157,69	1140,08	1033,05	1021,24	1009,87	998,93	988,47
40,0	1220,27	1200,30	1181,23	1163,04	1145,76	1036,97	1025,37	1014,22	1003,55	993,39
50,0	1224,69	1204,92	1186,06	1168,12	1151,13	1040,73	1029,31	1018,37	1007,93	998,05
60,0	1228,93	1209,33	1190,66	1172,95	1156,22	1044,33	1033,08	1022,32	1012,10	1002,47
70,0	1233,00	1213,56	1195,07	1177,56	1161,07	1047,80	1036,69	1026,11	1016,08	1006,67
80,0	1236,93	1217,62	1199,30	1181,97	1165,69	1051,13	1040,16	1029,73	1019,88	1010,67
90,0	1240,71	1221,54	1203,36	1186,20	1170,11	1054,35	1043,51	1033,22	1023,53	1014,51
100,0	1244,37	1225,31	1207,27	1190,26	1174,34	1057,45	1046,73	1036,58	1027,04	1018,18
	[C2C1Im][C1COO]									
0,2	1067,14	1057,22	1047,48	1037,92	1028,54					
5,0	1069,45	1059,68	1050,12	1040,77	1031,64					
10,0	1071,79	1062,18	1052,79	1043,65	1034,76					
20,0	1076,31	1066,97	1057,90	1049,13	1040,68					
30,0	1080,61	1071,51	1062,73	1054,29	1046,22					
40,0	1084,72	1075,84	1067,31	1059,16	1051,44					
50,0	1088,65	1079,98	1071,68	1063,79	1056,37					
60,0	1092,42	1083,93	1075,84	1068,19	1061,04					
70,0	1096,04	1087,72	1079,82	1072,39	1065,49					
80,0	1099,53	1091,37	1083,64	1076,40	1069,73					
90,0	1102,89	1094,87	1087,31	1080,25	1073,78					
100,0	1106,14	1098,26	1090,84	1083,95	1077,67					

Tabela G.24 – Desvios relativos pelo modelo proposto por Evangelista *et al.* (2015) para os líquidos iônicos sem similaridade

$P / \text{MPa}$	[C8C1Im][OTF], $T / \text{K}$					[C4C1PYR][DCA], $T / \text{K}$				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	-1,68%	-1,53%	-1,41%	-1,29%	-1,20%	0,37%	0,23%	0,11%	-0,01%	-0,15%
5,0	-1,67%	-1,49%	-1,33%	-1,20%	-1,12%	0,29%	0,09%	-0,06%	-0,19%	-0,33%
10,0	-1,64%	-1,45%	-1,29%	-1,15%	-1,06%	0,19%	0,04%	-0,12%	-0,26%	-0,41%
20,0	-1,58%	-1,37%	-1,19%	-1,05%	-0,94%	0,10%	-0,06%	-0,23%	-0,37%	-0,56%
30,0	-1,52%	-1,29%	-1,11%	-0,95%	-0,84%	0,02%	-0,14%	-0,31%	-0,48%	-0,66%
40,0	-1,46%	-1,23%	-1,03%	-0,86%	-0,74%	-0,06%	-0,21%	-0,39%	-0,56%	-0,76%
50,0	-1,41%	-1,16%	-0,95%	-0,77%	-0,65%	-0,12%	-0,27%	-0,46%	-0,63%	-0,84%
60,0	-1,35%	-1,10%	-0,87%	-0,68%	-0,56%	-0,18%	-0,33%	-0,51%	-0,69%	-0,91%
70,0	-1,29%	-1,03%	-0,81%	-0,61%	-0,46%	-0,23%	-0,37%	-0,57%	-0,74%	-0,96%
80,0	-1,25%	-0,98%	-0,74%	-0,53%	-0,38%	-0,27%	-0,41%	-0,61%	-0,78%	-1,01%
90,0	-1,19%	-0,91%	-0,67%	-0,45%	-0,29%	-0,32%	-0,45%	-0,64%	-0,82%	-1,05%
100,0	-1,15%	-0,85%	-0,60%	-0,38%	-0,21%	-0,16%	-0,49%	-0,67%	-0,85%	-1,08%
	[C2C1Im][C1COO]									
0,2	2,69%	2,23%	1,78%	1,34%	0,85%					
5,0	2,65%	2,19%	1,72%	1,27%	0,78%					
10,0	2,60%	2,15%	1,67%	1,21%	0,72%					
20,0	2,51%	2,06%	1,58%	1,10%	0,59%					
30,0	2,44%	1,98%	1,49%	1,00%	0,48%					
40,0	2,37%	1,91%	1,42%	0,92%	0,39%					
50,0	2,31%	1,85%	1,35%	0,86%	0,32%					
60,0	2,26%	1,80%	1,30%	0,80%	0,25%					
70,0	2,22%	1,75%	1,25%	0,75%	0,20%					
80,0	2,18%	1,71%	1,21%	0,71%	0,16%					
90,0	2,14%	1,68%	1,18%	0,68%	0,12%					
100,0	2,11%	1,64%	1,16%	0,65%	0,09%					



Tabela G.25 - Modelo de Gardas e Coutinho (2008) para os líquidos iônicos sem similaridade

<i>P</i> / MPa	[C8C1Im][OTF], <i>T</i> / K					[C4C1PYR][DCA], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	1195,46	1175,88	1156,93	1138,58	1120,81	1106,59	1088,46	1070,92	1053,94	1037,48
5,0	1198,87	1179,18	1160,12	1141,67	1123,80	1109,74	1091,52	1073,88	1056,80	1040,26
10,0	1202,44	1182,63	1163,47	1144,91	1126,94	1113,05	1094,72	1076,97	1059,80	1043,16
20,0	1209,65	1189,61	1170,22	1151,45	1133,27	1119,73	1101,17	1083,22	1065,85	1049,02
30,0	1216,95	1196,67	1177,05	1158,06	1139,68	1126,48	1107,70	1089,54	1071,97	1054,95
40,0	1224,34	1203,81	1183,96	1164,75	1146,15	1133,32	1114,32	1095,94	1078,16	1060,95
50,0	1231,81	1211,04	1190,95	1171,51	1152,70	1140,24	1121,01	1102,41	1084,42	1067,01
60,0	1239,38	1218,35	1198,02	1178,36	1159,33	1147,25	1127,78	1108,96	1090,76	1073,14
70,0	1247,05	1225,75	1205,18	1185,28	1166,03	1154,34	1134,63	1115,58	1097,17	1079,35
80,0	1254,80	1233,25	1212,42	1192,29	1172,81	1161,52	1141,57	1122,29	1103,65	1085,62
90,0	1262,66	1240,84	1219,75	1199,38	1179,67	1168,79	1148,59	1129,08	1110,21	1091,97
100,0	1270,61	1248,52	1227,17	1206,55	1186,61	1176,15	1155,70	1135,94	1116,85	1098,39
	[C2C1Im][C1COO]									
0,2	1056,01	1038,72	1021,98	1005,77	990,07					
5,0	1059,03	1041,63	1024,80	1008,50	992,72					
10,0	1062,18	1044,69	1027,76	1011,37	995,49					
20,0	1068,55	1050,85	1033,72	1017,14	1001,08					
30,0	1075,00	1057,08	1039,75	1022,98	1006,74					
40,0	1081,53	1063,39	1045,85	1028,89	1012,46					
50,0	1088,13	1069,77	1052,03	1034,86	1018,25					
60,0	1094,82	1076,24	1058,28	1040,91	1024,10					
70,0	1101,58	1082,78	1064,60	1047,02	1030,02					
80,0	1108,44	1089,40	1071,00	1053,21	1036,01					
90,0	1115,38	1096,10	1077,48	1059,48	1042,07					
100,0	1122,40	1102,88	1084,03	1065,81	1048,20					

Tabela G.26 – Desvios relativos pelo modelo de Gardas e Coutinho (2008) para os líquidos iônicos sem similaridade

<i>P</i> / MPa	[C8C1Im][OTF], <i>T</i> / K					[C4C1PYR][DCA], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	-1,25%	-1,22%	-1,20%	-1,19%	-1,20%	-8,07%	-7,77%	-7,47%	-7,18%	-6,93%
5,0	-1,31%	-1,23%	-1,15%	-1,10%	-1,09%	-8,23%	-7,97%	-7,68%	-7,37%	-7,07%
10,0	-1,36%	-1,24%	-1,14%	-1,05%	-1,00%	-8,42%	-8,09%	-7,78%	-7,46%	-7,15%
20,0	-1,48%	-1,30%	-1,14%	-1,00%	-0,88%	-8,72%	-8,35%	-8,00%	-7,62%	-7,28%
30,0	-1,63%	-1,39%	-1,18%	-0,98%	-0,81%	-9,03%	-8,62%	-8,23%	-7,82%	-7,43%
40,0	-1,80%	-1,52%	-1,26%	-1,00%	-0,77%	-9,35%	-8,90%	-8,48%	-8,04%	-7,61%
50,0	-2,00%	-1,67%	-1,37%	-1,06%	-0,79%	-9,69%	-9,21%	-8,75%	-8,27%	-7,81%
60,0	-2,21%	-1,86%	-1,49%	-1,14%	-0,83%	-10,05%	-9,53%	-9,03%	-8,51%	-8,02%
70,0	-2,45%	-2,05%	-1,66%	-1,27%	-0,89%	-10,42%	-9,86%	-9,34%	-8,78%	-8,25%
80,0	-2,71%	-2,27%	-1,84%	-1,41%	-0,99%	-10,80%	-10,20%	-9,65%	-9,06%	-8,50%
90,0	-2,98%	-2,51%	-2,04%	-1,57%	-1,11%	-11,20%	-10,56%	-9,98%	-9,36%	-8,77%
100,0	-3,28%	-2,76%	-2,25%	-1,75%	-1,26%	-11,41%	-10,95%	-10,32%	-9,66%	-9,04%
[C2C1Im][C1COO]										
0,2	3,70%	3,94%	4,17%	4,40%	4,56%					
5,0	3,59%	3,86%	4,09%	4,33%	4,53%					
10,0	3,47%	3,76%	4,01%	4,26%	4,49%					
20,0	3,22%	3,54%	3,83%	4,11%	4,37%					
30,0	2,94%	3,30%	3,62%	3,94%	4,24%					
40,0	2,66%	3,04%	3,40%	3,75%	4,08%					
50,0	2,36%	2,78%	3,16%	3,55%	3,91%					
60,0	2,05%	2,49%	2,91%	3,34%	3,73%					
70,0	1,73%	2,19%	2,64%	3,10%	3,52%					
80,0	1,38%	1,89%	2,37%	2,85%	3,31%					
90,0	1,03%	1,57%	2,08%	2,59%	3,07%					
100,0	0,67%	1,23%	1,77%	2,31%	2,83%					

Tabela G.27 – Modelo proposto por Qiao *et al.* (2010) para os líquidos iônicos sem similaridade

<i>P</i> / MPa	[C8C1Im][OTF], <i>T</i> / K					[C4C1PYR][DCA], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	1177,41	1157,62	1137,83	1118,04	1098,26	1036,46	1041,05	1045,65	1050,25	1054,84
5,0	1180,66	1160,87	1141,09	1121,30	1101,51	1038,76	1043,35	1047,95	1052,54	1057,14
10,0	1184,05	1164,26	1144,47	1124,69	1104,90	1041,15	1045,75	1050,34	1054,94	1059,53
20,0	1190,83	1171,04	1151,25	1131,47	1111,68	1045,94	1050,53	1055,13	1059,72	1064,32
30,0	1197,61	1177,82	1158,03	1138,25	1118,46	1050,72	1055,32	1059,91	1064,51	1069,10
40,0	1204,39	1184,60	1164,81	1145,03	1125,24	1055,51	1060,10	1064,70	1069,30	1073,89
50,0	1211,17	1191,38	1171,59	1151,81	1132,02	1060,29	1064,89	1069,49	1074,08	1078,68
60,0	1217,95	1198,16	1178,37	1158,58	1138,80	1065,08	1069,68	1074,27	1078,87	1083,46
70,0	1224,73	1204,94	1185,15	1165,36	1145,58	1069,87	1074,46	1079,06	1083,65	1088,25
80,0	1231,50	1211,72	1191,93	1172,14	1152,36	1074,65	1079,25	1083,85	1088,44	1093,04
90,0	1238,28	1218,50	1198,71	1178,92	1159,14	1079,44	1084,04	1088,63	1093,23	1097,82
100,0	1245,06	1225,28	1205,49	1185,70	1165,91	1084,23	1088,82	1093,42	1098,01	1102,61
	[C2C1Im][C1COO]									
0,2	1283,64	1264,33	1245,02	1225,71	1206,40					
5,0	1291,40	1272,09	1252,78	1233,48	1214,17					
10,0	1299,49	1280,18	1260,88	1241,57	1222,26					
20,0	1315,67	1296,36	1277,06	1257,75	1238,44					
30,0	1331,85	1312,55	1293,24	1273,93	1254,62					
40,0	1348,04	1328,73	1309,42	1290,11	1270,80					
50,0	1364,22	1344,91	1325,60	1306,29	1286,98					
60,0	1380,40	1361,09	1341,78	1322,47	1303,16					
70,0	1396,58	1377,27	1357,96	1338,65	1319,34					
80,0	1412,76	1393,45	1374,14	1354,83	1335,52					
90,0	1428,94	1409,63	1390,32	1371,01	1351,70					
100,0	1445,12	1425,81	1406,50	1387,19	1367,88					

Tabela G.28 – Desvios relativos pelo modelo proposto por Qiao *et al.* (2010) para os líquidos iônicos sem similaridade

<i>P</i> / MPa	[C8C1Im][OTF], <i>T</i> / K					[C4C1PYR][DCA], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	0,28%	0,35%	0,47%	0,64%	0,84%	-1,22%	-3,08%	-4,93%	-6,81%	-8,72%
5,0	0,23%	0,34%	0,51%	0,70%	0,92%	-1,31%	-3,21%	-5,08%	-6,94%	-8,81%
10,0	0,19%	0,33%	0,51%	0,73%	0,98%	-1,42%	-3,26%	-5,12%	-6,96%	-8,83%
20,0	0,10%	0,28%	0,50%	0,76%	1,05%	-1,55%	-3,36%	-5,20%	-7,00%	-8,85%
30,0	-0,01%	0,20%	0,45%	0,75%	1,07%	-1,69%	-3,48%	-5,29%	-7,07%	-8,87%
40,0	-0,14%	0,10%	0,37%	0,71%	1,07%	-1,84%	-3,61%	-5,39%	-7,15%	-8,93%
50,0	-0,29%	-0,02%	0,28%	0,64%	1,02%	-2,00%	-3,74%	-5,51%	-7,24%	-8,99%
60,0	-0,44%	-0,17%	0,17%	0,55%	0,96%	-2,17%	-3,88%	-5,62%	-7,33%	-9,06%
70,0	-0,61%	-0,32%	0,03%	0,43%	0,88%	-2,34%	-4,03%	-5,76%	-7,44%	-9,14%
80,0	-0,80%	-0,49%	-0,12%	0,31%	0,77%	-2,52%	-4,19%	-5,89%	-7,56%	-9,24%
90,0	-1,00%	-0,66%	-0,28%	0,16%	0,65%	-2,70%	-4,35%	-6,04%	-7,69%	-9,35%
100,0	-1,20%	-0,84%	-0,45%	0,01%	0,51%	-2,70%	-4,53%	-6,19%	-7,81%	-9,46%
	[C2C1Im][C1COO]									
0,2	-17,05%	-16,92%	-16,74%	-16,51%	-16,29%					
5,0	-17,56%	-17,41%	-17,24%	-17,01%	-16,77%					
10,0	-18,09%	-17,94%	-17,76%	-17,53%	-17,27%					
20,0	-19,17%	-19,00%	-18,81%	-18,57%	-18,30%					
30,0	-20,25%	-20,07%	-19,87%	-19,62%	-19,34%					
40,0	-21,33%	-21,15%	-20,95%	-20,68%	-20,39%					
50,0	-22,41%	-22,23%	-22,02%	-21,74%	-21,45%					
60,0	-23,50%	-23,31%	-23,10%	-22,81%	-22,51%					
70,0	-24,59%	-24,41%	-24,19%	-23,89%	-23,58%					
80,0	-25,69%	-25,50%	-25,27%	-24,97%	-24,65%					
90,0	-26,79%	-26,59%	-26,35%	-26,06%	-25,73%					
100,0	-27,89%	-27,69%	-27,45%	-27,14%	-26,81%					

Tabela G.29 – Modelo proposto por Lazzús (2010) para os líquidos iônicos sem similaridade

<i>P</i> / MPa	[C8C1Im][OTF], <i>T</i> / K					[C4C1PYR][DCA], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	1158,06	1140,08	1122,11	1104,13	1086,16	964,45	946,48	928,50	910,53	892,55
5,0	1160,79	1142,82	1124,84	1106,87	1088,89	967,19	949,21	931,24	913,26	895,29
10,0	1163,64	1145,67	1127,69	1109,72	1091,74	970,04	952,06	934,09	916,11	898,14
20,0	1169,34	1151,37	1133,39	1115,42	1097,44	975,74	957,76	939,79	921,81	903,84
30,0	1175,04	1157,06	1139,09	1121,11	1103,14	981,43	963,46	945,48	927,51	909,53
40,0	1180,74	1162,76	1144,79	1126,81	1108,84	987,13	969,16	951,18	933,21	915,23
50,0	1186,44	1168,46	1150,49	1132,51	1114,54	992,83	974,86	956,88	938,91	920,93
60,0	1192,13	1174,16	1156,18	1138,21	1120,23	998,53	980,55	962,58	944,60	926,63
70,0	1197,83	1179,86	1161,88	1143,91	1125,93	1004,23	986,25	968,28	950,30	932,33
80,0	1203,53	1185,55	1167,58	1149,60	1131,63	1009,92	991,95	973,97	956,00	938,02
90,0	1209,23	1191,25	1173,28	1155,30	1137,33	1015,62	997,65	979,67	961,70	943,72
100,0	1214,93	1196,95	1178,98	1161,00	1143,03	1021,32	1003,35	985,37	967,40	949,42
	[C2C1Im][C1COO]									
0,2	1065,20	1047,23	1029,25	1011,28	993,30					
5,0	1067,94	1049,96	1031,99	1014,01	996,04					
10,0	1070,78	1052,81	1034,83	1016,86	998,88					
20,0	1076,48	1058,51	1040,53	1022,56	1004,58					
30,0	1082,18	1064,21	1046,23	1028,26	1010,28					
40,0	1087,88	1069,90	1051,93	1033,95	1015,98					
50,0	1093,58	1075,60	1057,63	1039,65	1021,68					
60,0	1099,27	1081,30	1063,32	1045,35	1027,37					
70,0	1104,97	1087,00	1069,02	1051,05	1033,07					
80,0	1110,67	1092,70	1074,72	1056,75	1038,77					
90,0	1116,37	1098,39	1080,42	1062,44	1044,47					
100,0	1122,07	1104,09	1086,12	1068,14	1050,17					

Tabela G.30 – Desvios relativos pelo modelo proposto por Lazzús (2010) para os líquidos iônicos sem similaridade

<i>P</i> / MPa	[C8C1Im][OTF], <i>T</i> / K					[C4C1PYR][DCA], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	1,92%	1,86%	1,84%	1,87%	1,93%	5,81%	6,29%	6,82%	7,40%	8,01%
5,0	1,91%	1,89%	1,93%	1,98%	2,05%	5,67%	6,10%	6,62%	7,21%	7,85%
10,0	1,91%	1,92%	1,97%	2,05%	2,16%	5,51%	5,99%	6,52%	7,11%	7,75%
20,0	1,90%	1,95%	2,04%	2,17%	2,31%	5,26%	5,76%	6,30%	6,92%	7,56%
30,0	1,87%	1,96%	2,08%	2,24%	2,42%	5,01%	5,53%	6,08%	6,71%	7,38%
40,0	1,82%	1,94%	2,09%	2,29%	2,51%	4,75%	5,28%	5,85%	6,49%	7,17%
50,0	1,76%	1,90%	2,07%	2,31%	2,55%	4,49%	5,03%	5,60%	6,26%	6,95%
60,0	1,68%	1,84%	2,05%	2,30%	2,57%	4,21%	4,77%	5,36%	6,03%	6,73%
70,0	1,60%	1,77%	1,99%	2,26%	2,58%	3,94%	4,51%	5,10%	5,78%	6,49%
80,0	1,49%	1,68%	1,93%	2,22%	2,55%	3,66%	4,24%	4,84%	5,53%	6,25%
90,0	1,37%	1,59%	1,85%	2,16%	2,52%	3,37%	3,97%	4,58%	5,27%	6,00%
100,0	1,25%	1,49%	1,76%	2,09%	2,46%	3,26%	3,68%	4,30%	5,01%	5,75%
[C2C1Im][C1COO]										
0,2	2,87%	3,16%	3,49%	3,87%	4,25%					
5,0	2,78%	3,09%	3,42%	3,81%	4,21%					
10,0	2,69%	3,01%	3,35%	3,74%	4,16%					
20,0	2,50%	2,83%	3,19%	3,60%	4,04%					
30,0	2,29%	2,65%	3,02%	3,45%	3,90%					
40,0	2,09%	2,45%	2,84%	3,28%	3,75%					
50,0	1,87%	2,25%	2,65%	3,11%	3,59%					
60,0	1,65%	2,03%	2,45%	2,92%	3,42%					
70,0	1,42%	1,81%	2,24%	2,73%	3,24%					
80,0	1,19%	1,59%	2,03%	2,53%	3,05%					
90,0	0,95%	1,36%	1,81%	2,31%	2,85%					
100,0	0,70%	1,12%	1,59%	2,10%	2,64%					

Tabela G.31 – Modelo proposto por Paduszynski e Domanska (2012) para os líquidos iônicos sem similaridade

<i>P</i> / MPa	[C8C1Im][OTF], <i>T</i> / K					[C4C1PYR][DCA], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	1191,38	1172,51	1154,23	1136,51	1119,33	1023,55	1007,34	991,63	976,41	961,65
5,0	1193,73	1175,11	1157,06	1139,58	1122,62	1025,57	1009,57	994,07	979,05	964,48
10,0	1196,13	1177,75	1159,94	1142,68	1125,94	1027,63	1011,84	996,54	981,71	967,33
20,0	1200,78	1182,86	1165,49	1148,64	1132,30	1031,63	1016,23	1001,31	986,84	972,79
30,0	1205,25	1187,75	1170,78	1154,31	1138,31	1035,47	1020,44	1005,85	991,70	977,96
40,0	1209,57	1192,45	1175,84	1159,70	1144,02	1039,18	1024,47	1010,20	996,33	982,86
50,0	1213,73	1196,97	1180,68	1164,85	1149,45	1042,75	1028,35	1014,36	1000,76	987,53
60,0	1217,75	1201,32	1185,34	1169,78	1154,64	1046,21	1032,09	1018,36	1005,00	991,99
70,0	1221,64	1205,52	1189,81	1174,52	1159,61	1049,55	1035,70	1022,21	1009,06	996,26
80,0	1225,41	1209,57	1194,13	1179,07	1164,37	1052,79	1039,18	1025,92	1012,97	1000,35
90,0	1229,07	1213,50	1198,30	1183,45	1168,95	1055,94	1042,56	1029,49	1016,74	1004,28
100,0	1232,63	1217,30	1202,32	1187,68	1173,36	1058,99	1045,82	1032,95	1020,37	1008,07
[C2C1Im][C1COO]										
0,2	1114,20	1096,55	1079,46	1062,89	1046,82					
5,0	1116,40	1098,98	1082,11	1065,75	1049,89					
10,0	1118,64	1101,45	1084,80	1068,66	1053,00					
20,0	1122,99	1106,23	1089,99	1074,23	1058,95					
30,0	1127,18	1110,81	1094,93	1079,53	1064,57					
40,0	1131,21	1115,20	1099,66	1084,57	1069,91					
50,0	1135,10	1119,43	1104,20	1089,39	1074,99					
60,0	1138,86	1123,50	1108,55	1094,00	1079,84					
70,0	1142,50	1127,42	1112,74	1098,43	1084,49					
80,0	1146,03	1131,22	1116,77	1102,68	1088,94					
90,0	1149,45	1134,89	1120,67	1106,78	1093,22					
100,0	1152,77	1138,45	1124,44	1110,74	1097,35					

Tabela G.32 – Desvios relativos pelo modelo proposto por Paduszynski e Domanska (2012) para os líquidos iônicos sem similaridade

<i>P</i> / MPa	[C8C1Im][OTF], <i>T</i> / K					[C4C1PYR][DCA], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	-0,91%	-0,93%	-0,97%	-1,00%	-1,06%	0,04%	0,26%	0,49%	0,70%	0,89%
5,0	-0,88%	-0,88%	-0,88%	-0,91%	-0,98%	-0,02%	0,13%	0,32%	0,53%	0,73%
10,0	-0,83%	-0,82%	-0,83%	-0,86%	-0,91%	-0,10%	0,09%	0,26%	0,46%	0,64%
20,0	-0,74%	-0,73%	-0,73%	-0,75%	-0,79%	-0,16%	0,01%	0,17%	0,36%	0,51%
30,0	-0,65%	-0,64%	-0,64%	-0,65%	-0,69%	-0,22%	-0,06%	0,08%	0,25%	0,41%
40,0	-0,58%	-0,57%	-0,57%	-0,57%	-0,58%	-0,27%	-0,12%	0,00%	0,16%	0,31%
50,0	-0,50%	-0,49%	-0,50%	-0,48%	-0,50%	-0,32%	-0,18%	-0,07%	0,08%	0,22%
60,0	-0,43%	-0,43%	-0,42%	-0,41%	-0,42%	-0,36%	-0,23%	-0,12%	0,02%	0,15%
70,0	-0,36%	-0,36%	-0,37%	-0,35%	-0,34%	-0,40%	-0,28%	-0,19%	-0,05%	0,08%
80,0	-0,30%	-0,31%	-0,30%	-0,28%	-0,27%	-0,43%	-0,32%	-0,23%	-0,10%	0,02%
90,0	-0,24%	-0,25%	-0,24%	-0,22%	-0,19%	-0,47%	-0,36%	-0,28%	-0,15%	-0,03%
100,0	-0,19%	-0,19%	-0,18%	-0,16%	-0,13%	-0,31%	-0,40%	-0,32%	-0,19%	-0,07%
	[C2C1Im][C1COO]									
0,2	-1,60%	-1,40%	-1,22%	-1,03%	-0,91%					
5,0	-1,63%	-1,43%	-1,27%	-1,10%	-0,97%					
10,0	-1,66%	-1,47%	-1,32%	-1,16%	-1,03%					
20,0	-1,71%	-1,55%	-1,41%	-1,27%	-1,16%					
30,0	-1,77%	-1,62%	-1,49%	-1,37%	-1,26%					
40,0	-1,81%	-1,68%	-1,57%	-1,46%	-1,36%					
50,0	-1,86%	-1,74%	-1,64%	-1,53%	-1,44%					
60,0	-1,89%	-1,79%	-1,70%	-1,59%	-1,51%					
70,0	-1,92%	-1,84%	-1,76%	-1,66%	-1,58%					
80,0	-1,96%	-1,88%	-1,81%	-1,71%	-1,63%					
90,0	-1,99%	-1,91%	-1,85%	-1,76%	-1,69%					
100,0	-2,02%	-1,95%	-1,89%	-1,80%	-1,73%					

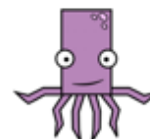


Tabela G.33 – Modelo proposto por Taherifard and Raeissi (2016) para os líquidos iônicos sem similaridade

<i>P</i> / MPa	[C8C1Im][OTF], <i>T</i> / K					[C4C1PYR][DCA], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	1209,11	1191,47	1174,33	1157,68	1141,50	1042,82	1025,97	1009,66	993,85	978,54
5,0	1211,40	1193,69	1176,49	1159,78	1143,54	1045,00	1028,09	1011,71	995,84	980,47
10,0	1213,79	1196,01	1178,74	1161,97	1145,67	1047,29	1030,30	1013,85	997,92	982,48
20,0	1218,60	1200,68	1183,28	1166,38	1149,95	1051,90	1034,76	1018,17	1002,10	986,53
30,0	1223,45	1205,39	1187,85	1170,82	1154,27	1056,55	1039,26	1022,52	1006,32	990,62
40,0	1228,33	1210,13	1192,46	1175,29	1158,62	1061,24	1043,79	1026,91	1010,57	994,74
50,0	1233,26	1214,91	1197,10	1179,80	1163,00	1065,97	1048,37	1031,34	1014,86	998,90
60,0	1238,23	1219,73	1201,78	1184,35	1167,41	1070,74	1052,99	1035,81	1019,19	1003,09
70,0	1243,23	1224,59	1206,49	1188,93	1171,86	1075,56	1057,64	1040,32	1023,55	1007,31
80,0	1248,28	1229,48	1211,25	1193,54	1176,35	1080,42	1062,34	1044,86	1027,95	1011,57
90,0	1253,37	1234,42	1216,04	1198,19	1180,87	1085,32	1067,08	1049,45	1032,39	1015,87
100,0	1258,50	1239,40	1220,87	1202,88	1185,42	1090,27	1071,87	1054,07	1036,86	1020,20
	[C2C1Im][C1COO]									
0,2	1142,48	1124,10	1106,29	1089,04	1072,33					
5,0	1144,87	1126,41	1108,53	1091,21	1074,43					
10,0	1147,37	1128,83	1110,87	1093,48	1076,63					
20,0	1152,40	1133,69	1115,58	1098,05	1081,05					
30,0	1157,47	1138,60	1120,34	1102,65	1085,51					
40,0	1162,58	1143,55	1125,13	1107,29	1090,01					
50,0	1167,74	1148,54	1129,96	1111,97	1094,55					
60,0	1172,95	1153,58	1134,84	1116,69	1099,12					
70,0	1178,21	1158,66	1139,76	1121,46	1103,74					
80,0	1183,51	1163,79	1144,72	1126,26	1108,39					
90,0	1188,86	1168,96	1149,72	1131,10	1113,08					
100,0	1194,26	1174,18	1154,77	1135,99	1117,81					

Tabela G.34 – Desvios relativos pelo modelo proposto por Taherifard and Raeissi (2016) para os líquidos iônicos sem similaridade

<i>P</i> / MPa	[C8C1Im][OTF], <i>T</i> / K					[C4C1PYR][DCA], <i>T</i> / K				
	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15	298,15	323,15	348,15	373,15	398,15
0,2	-2,41%	-2,56%	-2,73%	-2,88%	-3,07%	-1,84%	-1,58%	-1,32%	-1,07%	-0,85%
5,0	-2,37%	-2,47%	-2,58%	-2,70%	-2,86%	-1,91%	-1,70%	-1,44%	-1,18%	-0,92%
10,0	-2,32%	-2,38%	-2,47%	-2,56%	-2,68%	-2,02%	-1,73%	-1,47%	-1,18%	-0,91%
20,0	-2,23%	-2,25%	-2,27%	-2,30%	-2,36%	-2,13%	-1,81%	-1,51%	-1,19%	-0,89%
30,0	-2,17%	-2,13%	-2,11%	-2,09%	-2,10%	-2,26%	-1,90%	-1,57%	-1,22%	-0,88%
40,0	-2,14%	-2,06%	-1,99%	-1,92%	-1,87%	-2,40%	-2,01%	-1,65%	-1,26%	-0,90%
50,0	-2,12%	-2,00%	-1,89%	-1,77%	-1,69%	-2,55%	-2,13%	-1,74%	-1,32%	-0,93%
60,0	-2,12%	-1,97%	-1,81%	-1,66%	-1,53%	-2,71%	-2,26%	-1,84%	-1,39%	-0,97%
70,0	-2,13%	-1,95%	-1,77%	-1,58%	-1,40%	-2,89%	-2,40%	-1,96%	-1,48%	-1,03%
80,0	-2,18%	-1,96%	-1,74%	-1,51%	-1,30%	-3,07%	-2,56%	-2,09%	-1,58%	-1,10%
90,0	-2,23%	-1,98%	-1,73%	-1,47%	-1,21%	-3,26%	-2,72%	-2,22%	-1,69%	-1,19%
100,0	-2,29%	-2,01%	-1,73%	-1,44%	-1,16%	-3,27%	-2,90%	-2,37%	-1,81%	-1,28%
	[C2C1Im][C1COO]									
0,2	-4,18%	-3,95%	-3,73%	-3,52%	-3,37%					
5,0	-4,22%	-3,96%	-3,74%	-3,51%	-3,33%					
10,0	-4,27%	-3,99%	-3,75%	-3,51%	-3,30%					
20,0	-4,38%	-4,07%	-3,79%	-3,51%	-3,27%					
30,0	-4,50%	-4,16%	-3,85%	-3,54%	-3,26%					
40,0	-4,64%	-4,26%	-3,92%	-3,58%	-3,26%					
50,0	-4,78%	-4,38%	-4,01%	-3,63%	-3,29%					
60,0	-4,94%	-4,51%	-4,11%	-3,70%	-3,33%					
70,0	-5,11%	-4,66%	-4,23%	-3,79%	-3,38%					
80,0	-5,29%	-4,81%	-4,35%	-3,88%	-3,45%					
90,0	-5,48%	-4,97%	-4,49%	-4,00%	-3,53%					
100,0	-5,69%	-5,15%	-4,64%	-4,12%	-3,63%					

**ANEXO A – SOFTWARE OCTOPUS****OCTOPUS v. 2.0**

OCTOPUS v. 2.0 is an Excel® add-in developed to help students, researchers and engineers in the estimation of physical and chemical properties of organic molecular compounds and ionic liquids. It is freely distributed under the GNU GPL v3 license.

**Download link:**

**<https://github.com/thegibbsproject/octopus>**

Link para download

<https://github.com/thegibbsproject/octopus>

## ANEXO B – DIVISÃO ESTRUTURAL DOS LÍQUIDOS IÔNICOS NO OCTOPUS

Tabela 19 – Estruturação por Evangelista *et al.* (2014)

Acrônimo	Cátion	Ânion	Grupos moleculares
[(C2)3S][NTf <sub>2</sub> ]	x	x	x
[C3C1C1Im][NTf <sub>2</sub> ]	1 [Im]AN-CH <sub>3</sub> ; 1 [Im]AN-CH <sub>2</sub> ; 2 [Im]ACH; 1 [Im]AC-CH <sub>3</sub>	1 CF <sub>3</sub> SO <sub>2</sub> N(-) SO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	1 CH <sub>2</sub> ; 1 CH <sub>3</sub>
[C3C1Pyr][NTf <sub>2</sub> ]	1[Pyr/Pip/Azep]cCH <sub>2</sub> N(+)CH <sub>2</sub> C H <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> c	1 CF <sub>3</sub> SO <sub>2</sub> N(-) SO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	1 CH <sub>3</sub> ; 1 CH <sub>2</sub> (chain); 2 CH <sub>2</sub> (cyclic)
[C <sub>4</sub> C <sub>1</sub> C <sub>1</sub> Im][NTf <sub>2</sub> ]	1 [Im]AN-CH <sub>3</sub> ; 1 [Im]AN-CH <sub>2</sub> ; 2 [Im]ACH; 1 [Im]AC-CH <sub>3</sub>	1 CF <sub>3</sub> SO <sub>2</sub> N(-) SO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	1 CH <sub>3</sub> ; 2 CH <sub>2</sub> (chain)
[C8C1Im][OTF]	1 [Im]AN-CH <sub>2</sub> ; 3 [Im]ACH; 1 [Im]AC-CH <sub>3</sub>	1 CF <sub>3</sub> SO <sub>3</sub> (-)	6 CH <sub>2</sub> (chain); 1 CH <sub>3</sub>
[C4C1PYR][DCA]	1[Pyr/Pip/Azep]cCH <sub>2</sub> N(+)CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> c	1 N(CN) <sub>2</sub> (-)	2 CH <sub>2</sub> (chain); 1 CH <sub>3</sub> ; 2 CH <sub>2</sub> (cy- clic)
[C2C1Im][C1COO]	1 [Im]AN-CH <sub>3</sub> ; 3 [Im]ACH; 1 [Im]AN-CH <sub>2</sub>	1 CH <sub>3</sub> COO(-)	1 CH <sub>3</sub>
[C4C1Im][I]	1 [Im]AN-CH <sub>3</sub> ; 3 [Im]ACH; 1 [Im]AN-CH <sub>2</sub>	1 I(-)	2 CH <sub>2</sub> (chain); 1 CH <sub>3</sub>
[C6C1Im][I]	1 [Im]AN-CH <sub>3</sub> ; 3 [Im]ACH; 1 [Im]AN-CH <sub>2</sub>	1 I(-)	4 CH <sub>2</sub> (chain); 1 CH <sub>3</sub>
[C3C1Im][I]	1 [Im]AN-CH <sub>3</sub> ; 3 [Im]ACH; 1 [Im]AN-CH <sub>2</sub>	1 I(-)	1 CH <sub>2</sub> (chain); 1 CH <sub>3</sub>

Tabela 20 – Estruturação por Gardas e Coutinho *et al.* (2008)

Acrônimo	Cátion	Ânion	Grupos moleculares
[(C2)3S][NTf <sub>2</sub> ]	x	x	x
[C3C1C1Im][NTf <sub>2</sub> ]	1 1,3-dimethylimidazolium (+)	1 [NTf <sub>2</sub> ] <sup>-</sup>	2 CH <sub>2</sub> ; 1 CH <sub>3</sub>
[C3C1Pyr][NTf <sub>2</sub> ]	1 1,1-dimethylpyrrolidinium	1 [NTf <sub>2</sub> ] <sup>-</sup>	2 CH <sub>2</sub>
[C <sub>4</sub> C <sub>1</sub> C <sub>1</sub> Im][NTf <sub>2</sub> ]	1 1,3-dimethylimidazolium (+)	1 [NTf <sub>2</sub> ] <sup>-</sup>	3 CH <sub>2</sub> ; 1 CH <sub>3</sub>
[C8C1Im][OTf]	1 1,3-dimethylimidazolium (+)	1 [CF <sub>3</sub> SO <sub>3</sub> ] <sup>-</sup>	7 CH <sub>2</sub>
[C4C1PYR][DCA]	1 1,1-dimethylpyrrolidinium	1 [N <sub>3</sub> ] <sup>-</sup>	3 CH <sub>2</sub>
[C2C1Im][C1COO]	1 1,3-dimethylimidazolium (+)	1 [C1COO] <sup>-</sup>	1 CH <sub>2</sub>
[C4C1Im][I]	x	x	x
[C6C1Im][I]	x	x	x
[C3C1Im][I]	x	x	x

Tabela 21 – Estruturação por Jacquemin *et al.* (2008)

Acrônimo	Cátion	Ânion	Grupos moleculares
[(C2)3S][NTf <sub>2</sub> ]	x	x	x
[C3C1C1Im][NTf <sub>2</sub> ]	x	x	x
[C3C1Pyr][NTf <sub>2</sub> ]	1 [C3C1Pyrro] <sup>+</sup>	1 [NTf <sub>2</sub> ]	x
[C <sub>4</sub> C <sub>1</sub> C <sub>1</sub> Im][NTf <sub>2</sub> ]	1 [C <sub>4</sub> mmim] <sup>+</sup>	1 [NTf <sub>2</sub> ]	x
[C8C1Im][OTF]	x	x	x
[C4C1PYR][DCA]	x	x	x
[C2C1Im][C1COO]	x	x	x
[C4C1Im][I]	x	x	x
[C6C1Im][I]	x	x	x
[C3C1Im][I]	x	x	x

Tabela 22 – Estruturação por Qiao *et al.* (2010)

Acrônimo	Cátion	Ânion	Grupos moleculares
[(C2)3S][NTf <sub>2</sub> ]	x	x	x
[C3C1C1Im][NTf <sub>2</sub> ]	1 Im; 1 CH <sub>3</sub> (R1); 2 CH <sub>2</sub> (R1); 1 CH <sub>3</sub> (R2); 1 CH <sub>3</sub> (R3)	2 O=S=O; 2 CF <sub>3</sub> ; 1 N<	x
[C3C1Pyr][NTf <sub>2</sub> ]	1 pyr; 2 CH <sub>3</sub> (R1); 2 CH <sub>2</sub> (R1)	2 O=S=O; 2 CF <sub>3</sub> ; 1 N<	x
[C <sub>4</sub> C <sub>1</sub> C <sub>1</sub> Im][NTf <sub>2</sub> ]	1 Im; 1 CH <sub>3</sub> (R1); 3 CH <sub>2</sub> (R1); 1 CH <sub>3</sub> (R2); 1 CH <sub>3</sub> (R3)	2 O=S=O; 2 CF <sub>3</sub> ; 1 N<	x
[C8C1Im][OTf]	1 Im; 1 CH <sub>3</sub> (R1); CH <sub>3</sub> (R2); 7 CH <sub>2</sub> (R1)	1 CF <sub>3</sub> ; 1 O=S=O; 1 -O-	x
[C4C1PYR][DCA]	1 pyr; 2 CH <sub>3</sub> (R1); 3 CH <sub>3</sub> (R1)	2 CN; 1 N<	x
[C2C1Im][C1COO]	1 Im; 1 CH <sub>2</sub> (R1); 1 CH <sub>3</sub> (R1); 1 CH <sub>3</sub> (R2)	1 COO; 1 CH <sub>3</sub>	x
[C4C1Im][I]	x	x	x
[C6C1Im][I]	x	x	x
[C3C1Im][I]	x	x	x

Tabela 23 – Estruturação por Lazzús (2010)

Acrônimo	Cátion	Ânion	Grupos moleculares
[(C2)3S][NTf <sub>2</sub> ]	1 S4; 3 CH <sub>3</sub> ; 3 CH <sub>2</sub>	1 [NTf <sub>2</sub> ]	x
[C3C1C1Im][NTf <sub>2</sub> ]	1 [Im123]; 3 CH <sub>3</sub> ; 2 CH <sub>2</sub>	1 [NTf <sub>2</sub> ]	x
[C3C1Pyr][NTf <sub>2</sub> ]	1 [Pyr11]; 2 CH <sub>3</sub> ; 2 CH <sub>2</sub>	1 [NTf <sub>2</sub> ]	x
[C <sub>4</sub> C <sub>1</sub> C <sub>1</sub> Im][NTf <sub>2</sub> ]	1 [Im123]; 3 CH <sub>3</sub> ; 3 CH <sub>2</sub>	1 [NTf <sub>2</sub> ]	x
[C8C1Im][OTf]	1 [Im123]; 2 CH <sub>3</sub> ; 7 CH <sub>2</sub>	1 [TfO]	x
[C4C1PYR][DCA]	1 [Pyr11]; 2 CH <sub>3</sub> ; 3 CH <sub>2</sub>	1 [DCA]	x
[C2C1Im][C1COO]	1 [Im123]; 1 CH <sub>2</sub> ; 2 CH <sub>3</sub>	1 [AC]	x
[C4C1Im][I]	1 [Im123]; 3 CH <sub>2</sub> ; 2 CH <sub>3</sub>	1 [I]	x
[C6C1Im][I]	1 [Im123]; 5 CH <sub>2</sub> ; 2 CH <sub>3</sub>	1 [I]	x
[C3C1Im][I]	1 [Im123]; 2 CH <sub>2</sub> ; 2 CH <sub>3</sub>	1 [I]	x



Tabela 24 – Estruturação por Paduszynski e Domanska (2012)

Acrônimo	Cátion	Ânion	Grupos moleculares
[(C2)3S][NTf <sub>2</sub> ]	1 S3	1 NTf <sub>2</sub>	3 SCH <sub>2</sub> ; 3 CH <sub>3</sub>
[C3C1C1Im][NTf <sub>2</sub> ]	1 Im123	1 NTf <sub>2</sub>	1 aCH <sub>3</sub> ; 1 aNCH <sub>3</sub> ; 1 aNCH <sub>2</sub> ; 1 CH <sub>2</sub> ; 1 CH <sub>3</sub>
[C3C1Pyr][NTf <sub>2</sub> ]	1 Pyr11	1 NTf <sub>2</sub>	1 cycNCH <sub>2</sub> ; 1 cycNCH <sub>3</sub> ; 1 CH <sub>2</sub> ; 1 CH <sub>3</sub>
[C <sub>4</sub> C <sub>1</sub> C <sub>1</sub> Im][NTf <sub>2</sub> ]	1 Im123	1 NTf <sub>2</sub>	1 aCH <sub>3</sub> ; 1 aNCH <sub>3</sub> ; 1 aNCH <sub>2</sub> ; 2 CH <sub>2</sub> ; 1 CH <sub>3</sub>
[C8C1Im][OTf]	1 Im13	CF <sub>3</sub> SO <sub>3</sub>	6 CH <sub>2</sub> ; 1 CH <sub>3</sub> ; 1 aNCH <sub>3</sub> ; 1 aNCH <sub>2</sub>
[C4C1PYR][DCA]	1 Pyr11	1 DCA	1 CH <sub>3</sub> ; 2 CH <sub>2</sub> ; 1 cyc-NCH <sub>3</sub> ; cycNCH <sub>2</sub>
[C2C1Im][C1COO]	1 Im13	1 CH <sub>3</sub> COO	1 aNCH <sub>3</sub> ; 1 aNCH <sub>2</sub> ; 1 CH <sub>3</sub>
[C4C1Im][I]	1 Im13	1 I	1 aNCH <sub>3</sub> ; 1 aNCH <sub>2</sub> ; 1 CH <sub>3</sub> ; 2 CH <sub>2</sub>
[C6C1Im][I]	1 Im13	1 I	1 aNCH <sub>3</sub> ; 1 aNCH <sub>2</sub> ; 1 CH <sub>3</sub> ; 4 CH <sub>2</sub>
[C3C1Im][I]	1 Im13	1 I	1 aNCH <sub>3</sub> ; 1 aNCH <sub>2</sub> ; 1 CH <sub>3</sub> ; 1 CH <sub>2</sub>

Tabela 25 – Estruturação por Taherifard e Raeissi (2016)

Acrônimo	Cátion	Ânion	Grupos moleculares
[(C2)3S][NTf <sub>2</sub> ]	1 S; 6 C; 15 H	1 N; 4 O; 2 C; 6 F; 2 S	x
[C3C1C1Im][NTf <sub>2</sub> ]	2 N; 8 C; 15 H	1 N; 4 O; 2 C; 6 F; 2 S	1 Rn
[C3C1Pyr][NTf <sub>2</sub> ]	8 C; 1 N; 18 H	1 N; 4 O; 2 C; 6 F; 2 S	1 Rn
[C <sub>4</sub> C <sub>1</sub> C <sub>1</sub> Im][NTf <sub>2</sub> ]	2 N; 9 C; 17 H	1 N; 4 O; 2 C; 6 F; 2 S	1 Rn
[C8C1Im][OTF]	12 C; 23 H; 2 N	1 C; 3 F; 1 S; 3 O	1 Rn
[C4C1PYR][DCA]	9 C; 1 N; 20 H	3 N; 2 C	1 Rn
[C2C1Im][C1COO]	6 C; 2 N; 11 H	2 O; 2 C; 3 H	x
[C4C1Im][I]	2 N; 15 H; 8 C	1 I	1 Rn
[C6C1Im][I]	2 N; 19 H; 10 C	1 I	1 Rn
[C3C1Im][I]	2 N; 13 H; 7 C	1 I	1 Rn