

USO DE NANOPARTÍCULAS JANUS PARA RECUPERAÇÃO AVANÇADA DE ÓLEO E REDUÇÃO DO IMPACTO AMBIENTAL

Bordin, J.R.¹

¹Universidade Federal do Pampa

RESUMO: Vivemos em uma sociedade completamente dependente do petróleo. Assim, é natural a busca por novas tecnologias na recuperação avançada de óleo. Da mesma forma, o petróleo é um agente poluidor de águas e solos, e busca-se formas na redução do impacto ambiental da produção e extração de óleo. Esta dupla preocupação torna-se evidente no fraturamento hidráulico. Nesta técnica, uma quantidade significativa do fluido de fraturamento é perdido para dentro da matriz, diminuindo a recuperação de hidrocarbonetos e poluindo o meio. Nos últimos anos, surfactantes e biosurfactantes vem sendo estudados e aplicados para estes dois fins. Surfactantes caracterizam-se por um comportamento anfifílico: eles possuem uma cabeça hidrofílica, para a qual é energeticamente favorável ficar em contato com a água, e uma cauda de hidrocarbonetos hidrofóbica, que não possui afinidade com a água. Esta característica leva os surfactantes a possuírem propriedades de auto-montagem, formando micelas quando em solução aquosa, e também faz com que as caudas liguem-se às moléculas do petróleo, que são essencialmente hidrocarbonetos com diferentes tamanhos, e a superfícies apolares. Recentemente, os avanços na produção de materiais possibilitou a construção de novas partículas a nível atômico e molecular, com tamanho na ordem de nanômetros ($1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$) e diferentes características físico-químicas. O controle é tal que pode-se criar nanopartículas com uma variedade enorme de características e aplicações. Dentre estas, as nanopartículas Janus se destacam. Estas partículas caracterizam-se por possuírem duas propriedades físicas ou químicas diferentes. Assim, podem ter uma parte carregada eletricamente e outra neutra, ou uma parte hidrofóbica e outra hidrofílica. Particularmente, Janus dumbbells são nanopartículas na forma de alteres, onde um monômero é hidrofílico e outro é hidrofóbico, que possuem propriedades idênticas aos surfactantes. Contudo, controlando as propriedades químicas e a anisotropia dos Janus dumbbells, é possível obter um comportamento específico, melhorando uma característica desejada. Com isto, o uso de nanopartículas Janus surge como uma promissora alternativa aos surfactantes e suas aplicações para recuperação avançada de óleo e redução do impacto ambiental. Nesta situação, a modelagem molecular aparece como uma forte ferramenta para o estudo das propriedades de nanopartículas Janus e hidrocarbonetos. Simulações de Dinâmica Molecular dão indicações de quais são as características físico-químicas das nanopartículas que irão produzir o efeito desejado para recuperação ou remediação de poluição. Desta forma, neste trabalho realizamos simulações extensivas para compreender como as propriedades químicas, como a intensidade da hidrofobicidade, e físicas, como a anisotropia, da nanopartícula afetam as características da solução de Janus dumbbells e hidrocarbonetos. Nossos resultados indicam qual nanopartícula é mais indicada para aumentar ou diminuir a difusividade do hidrocarboneto, dependendo da aplicação desejada. Também, mostramos qual nanopartícula é mais indicada para fazer com que o hidrocarboneto se desligue de uma superfície, como óleo em rochas porosas, e vá para a solução aquosa. Estes resultados são indicadores para a produção de novas nanopartículas e novas nanotecnologias para melhorar a performance da indústria do petróleo.

PALAVRAS-CHAVE: nanotecnologia, recuperação avançada de óleo, redução de impacto ambiental, modelagem molecular