

# ESTUDO COMPUTACIONAL DE HIDROCARBONETOS E NANOPARTÍCULAS CONFINADOS EM XISTOS BETUMINOSOS

*Borges, A. C.<sup>1</sup>; Leite, B.L.G.<sup>1</sup>; Blausius, J. P. Bordin, J.R.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Campus Caçapava do Sul, Universidade Federal do Pampa

**RESUMO:** O petróleo é um composto de origem orgânica, mistura complexa de hidrocarbonetos e quantidades variáveis de não hidrocarbonetos. Atualmente, o petróleo é a principal fonte de energia utilizada, e o setor de exploração e produção tem ganhado cada vez mais atenção devido ao aumento da demanda de energia mundial. As altas temperatura e pressões causadas pelo soterramento são responsáveis pelas mudanças químicas dessa matéria orgânica, fazendo com que sobre somente carbono e hidrogênio. Esses compostos orgânicos, denominados hidrocarbonetos, forma o petróleo em forma líquida e gasosa. Os reservatórios de óleo, estão localizados em rochas altamente porosas, ocasionando grande acúmulo de material dentro das porosidades. Óleos de xistos betuminosos, tornam-se inviáveis, por questões ambientais e econômicas, pois ocorrem emissão de gases poluentes e poluição de águas subterrâneas, além disso a quantidade extraída é muito pequena. A baixa difusão de hidrocarbonetos confinados nas rochas porosas, é um empecilho para sua extração, pois torna-se necessário adicionar gases em uma temperatura muito alta e pressão acima da pressão atmosférica para a extração. O processo é caro e a quantidade de óleo extraído é baixa, gerando vários problemas ambientais, como o faturamento do solo. As simulações moleculares, tem sido amplamente utilizada para auxiliar o entendimento de experimentos, guiar os experimentos para fatos de interesse, e mesmo prever resultados experimentais cuja tecnologia ainda não temos. Desta forma, no trabalho realizaremos um estudo teórico sobre a interação de hidrocarbonetos dodecanos e nanopartículas Janus nanoconfinadas em duas placas, tal que o espaçamento entre as placas é o mesmo observado em xistos betuminosos, em torno de 4 a 8 angstroms. Particularmente, nanopartículas do tipo Janus tem se destacado pela grande gama de aplicações tecnológicas. Partículas do tipo Janus caracterizam-se por possuírem duas características em um único coloide. Assim, podemos ter nanopartículas carregadas/neutras, polares/apolares, oleofóbicas/oleofílicas, etc. Pode-se, por exemplo, criar dímeros onde um monômero é hidrofílico e o outro é hidrofóbico, ou oleofílico. Estas nanopartículas Janus diméricas possuem propriedades de auto-montagem, arranjando-se em micelas de forma similar a surfactantes. Ainda, elas podem ser construídas de tal forma a não poluir o meio ambiente. O confinamento da nanopartícula de Janus, com as mesmas dimensões do espaço que encontra-se o óleo em xistos betuminosos, apresenta difusão maior que a prevista, difusão esta associada a estrutura tipo cristal-líquido, com espaçamento entre as linhas que permitiriam uma difusão facilitada aliada ao dodecano. Como resultado a previsão é que ocorra o aumento expressivo da difusão dos hidrocarbonetos. A ideia é que o uso desta técnica reduza os custos, facilite a extração e reduza os impactos ambientais.

**PALAVRAS-CHAVE:** PETRÓLEO, EXTRAÇÃO, DODECANO, PARTÍCULAS DE JANUS.