SIMULAÇÃO POR DINÂMICA MOLECULAR DO ÍONS CITRATO EM AMBIENTE PROPÍCIO A FORMAÇÃO DE INCRUSTAÇÕES CARBONÁTICAS

BARRETO, E. L. M. (IFRN); ALVES, L. S. (IFRN); SENA, C. P. S. (IFRN).

Palavras Chave: Carbonato de cálcio, dinâmica molecular, ácido cítrico.

INTRODUÇÃO

Incrustações inorgânicas podem ser definidas como a deposição de sais de baixa solubilidade nas paredes de poços, tubulações e em tanques. Na indústria petrolífera, a ocorrência destas formações representa prejuízos financeiros, desencadeando, dentre outras coisas, o comprometimento da qualidade e do escoamento do óleo pelas tubulações. O principal agente incrustante é o carbonato de cálcio (CaCO_3), e sua formação, ocorre principalmente pela mistura de águas incompatíveis, como é o caso da água de produção e a água de injeção, durante os processos de recuperação do petróleo, quando os íons Ca^{2+} presentes no sistema reagem com o bicarbonato (HCO_3^-) (REIS et al, 2011). Sendo assim, o presente trabalho apresenta resultados preliminares de uma pesquisa que visa realizar um estudo teórico através de simulações por dinâmica molecular (DM), com o objetivo de analisar a atuação do íon citrato como inibidor de incrustações inorgânicas.

METODOLOGIA

O processo de simulação (figura 1) do íon citrato em ambiente aquoso onde íons cálcio, sódio e cloro estão presentes em concentrações baseadas em análise química de água de produção de um poço de petróleo (FROTA, 2009). A molécula de citrato foi construída através do *software* Avogadro e otimizada usando a função de base HF/6-31g(d). As cargas atômicas foram derivadas pelo método RESP.

Figura 1 – Fluxograma do processo de simulação por dinâmica molecular.

RESULTADOS E DISCUSSÕES

A dinâmica de produção foi realizada sobre um ensemble NVT, utilizando o *software* GROMACS com campo de força AMBER. O íon citrato foi simulado por 25 ns em uma caixa cúbica de volume 28 nm^3 a 300 K. Foram adicionadas 846 moléculas de água, 16 íons Ca^{2+} , 15 íons Na^+ e 43 íons Cl^- para contrabalancear as cargas. A figura 2 mostra a conformação de menor energia obtida pela simulação, onde pode-se observar que o íon citrato atraiu para suas carboxilas 4 íons Ca^{2+} .

Figura 2 – Conformação de menor energia obtida pelo íon citrato simulado por 25 ns na presença de íons Ca^{2+} .

CONCLUSÃO

A partir deste estudo chega-se à conclusão de que a molécula de citrato pode ser usada na captura de íons cálcio, para inibição da formação de carbonato de cálcio em ambientes que apresentem altas concentrações de Ca^{2+} . Ressalta-se a importância da análise posterior da interação entre a molécula e os contra-íons.

REFERÊNCIAS

- FROTA, T. M. P. **Incrustação em um poço produtor de petróleo e gás natural: um estudo de caso.** [s.l.] UFRN, 2009.
- REIS, M. L. P. et al. Deposição mineral em superfícies: problemas e oportunidades na indústria de petróleo. *Revista Virtual de Química*, Niterói, v. 3, n. 1, p 2-13, mar. 2011.