SIMULAÇÃO POR DINÂMICA MOLECULAR DO CITRATO NA PRESENÇA DE ÍONS CÁLCIO

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

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

INTRODUÇÃO

No poço de petróleo, a mistura entre a água injetada e a água de produção pode ocasionar uma supersaturação no sistema e, consequentemente, as incrustações orgânicas e inorgânicas. As incrustações inorgânicas ocorrem pela presença de sais inorgânicos de baixa solubilidade em água. O carbonato de cálcio (CaCO_3) constitui o principal composto causador de incrustação. Suas moléculas não são solvatadas pela água e acabam interagindo entre si de forma a se precipitar. O acúmulo desses sais inorgânicos nas tubulações gera prejuízos à indústria petrolífera, uma vez que “sua deposição na tubulação pode comprometer (ou interromper) o escoamento do óleo” (REIS et al, 2011). Sendo assim, o presente trabalho tem por objetivo pesquisar tem o objetivo pesquisar através de um estudo teórico por simulações de dinâmica molecular a capacidade do ácido cítrico como substância inibidora do processo de incrustação carbonáticas.

METODOLOGIA

O processo de simulação (figura 1) do íon citrato em ambiente aquoso na presença de íons cálcio. 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 (Restrained Electrostatic Potencial - potencial eletrostático contido) obtidas pelo *software* AmberTools, versão 12.

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 um caixa cúbica de volume 28 nm^3 a 300 K. Foram adicionadas 907 moléculas de água, 3 íons Ca^{2+} , e 3 íons Cl^- para contrabalancear as cargas. Inicialmente os íons Ca^{2+} foram posicionados a 3 angstroms de distância dos oxigênios das carboxilas. Durante a simulação os íons sofreram a atração dos carboxilatos da molécula. A figura 2 mostra a conformação de menor energia obtida.

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

CONCLUSÃO

Portanto, a partir do estudo teórico exposto, conclui-se que a molécula de ácido cítrico pode ser utilizada como inibidora do processo de formação do carbonato de cálcio e, consequentemente, do processo de incrustação em ambientes que apresentem altas concentrações de tais íons.

REFERÊNCIAS

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.