

Da Assessoria de Comunicação do Instituto de Física da USP:

***Contribuições de simulações moleculares e nanotecnologia para recuperação melhorada de petróleo e transição energética com uso limitado de carbono***

Por Prof. Caetano R. Miranda (DFMT – IFUSP)

Entre os grandes desafios e problemas enfrentados hoje na área de Energia, em particular pela indústria do setor petrolífero, estão a recuperação melhorada do óleo e a exploração de fontes alternativas aos combustíveis fósseis. Uma tendência clara é a transição energética com o uso limitado de fontes de energia a base de carbono. Os avanços recentes em materiais nanoestruturados abriram uma ampla gama de novos materiais multifuncionais com um potencial promissor para o desenvolvimento de tecnologias energéticas mais eficientes para a exploração de combustíveis fósseis, bem como energias renováveis dentro do contexto de ciclo de carbono neutro (sem emissão de CO<sub>2</sub>).

O grupo Sampa (Simulação Aplicada a Materiais: Propriedades Atomísticas) do Instituto de Física da USP vem desenvolvendo projetos em parcerias com empresas do setor de Petróleo e Gás e agências de fomento para o desenvolvimento de tecnologias para transição energética com uso limitado de carbono utilizando simulações moleculares e nanotecnologia. Os projetos caminham na direção de otimizar processos de extração de petróleo de maneira amigável ao meio-ambiente, propor nanoestruturas para catálise de etanol e desenvolvimento dos chamados combustíveis solares, matérias primas de maior valor agregado obtidas a partir do CO<sub>2</sub> utilizando processos fotocatalíticos (com energia solar).

1) Água “Esperta”

Com a escassez de novas reservas, aumento da demanda e variações nos preços de derivados do petróleo, os processos de recuperação melhorada de petróleo tornaram-se não apenas necessários, mas economicamente viáveis. Esses processos visam revitalizar reservatórios maduros, aumentando a produção e estendendo assim seus ciclos de vida.

Com os recentes avanços tecnológicos e computacionais, tornou-se possível prover uma caracterização mais precisa dos reservatórios, permitindo a proposição de cenários e agilizando o processo de decisões no planejamento e desenvolvimento dos

reservatórios para maximização da recuperação do petróleo. Entretanto, os chamados simuladores de reservatórios têm sua capacidade limitada, não apenas pelos modelos empregados, mas também pela confiabilidade e acurácia dos dados de entrada. No caso dos modelos, estes têm que descrever a complexidade de fenômenos físico-químicos que ocorrem durante o processo de injeção, acoplando as equações de fluxo de multicomponentes com as propriedades termodinâmicas dos sistemas envolvidos. Essas são muitas vezes desconhecidas ou não válidas na condição do reservatório.

Usualmente, fluídos (salmoura, CO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>) são injetados com uma alternativa para aumentar a eficiência de extração do óleo em rochas, alterando dessa forma a permeabilidade e a pressão do óleo nas rochas. Recentemente, observou-se, a partir de diversos trabalhos experimentais e de modelagem, que a injeção de água de baixa salinidade leva a uma melhoria nos processos de EOR. Um dos grandes atrativos desse processo é o fato de ser uma tecnologia ambientalmente amigável e utilizar insumos in-situ.

Entretanto, para uma aplicação otimizada, é necessário conhecer os mecanismos moleculares de seu funcionamento para a proposição da composição salina ótima para injeção. Nesse sentido, o Projeto “Simulações moleculares em multiescala com aplicações em recuperação melhorada de petróleo: baixa salinidade em carbonatos.” com financiamento da Petrobras, visa utilizar simulações moleculares, para podemos obter diretamente informações sobre os mecanismos relacionados a melhora na extração por injeção de água de baixa salinidade, quantificarmos parâmetros relacionados às propriedades físico-químicas das interfaces, dissolução e precipitação das rochas que compõem o Pré-Sal, bem como efeitos de confinamento e das geometrias dos poros. O conhecimento desses parâmetros a nível molecular, otimizam as escolhas das formulações dos fluidos a serem injetados. A integração das propriedades obtidas via simulações moleculares, podem diminuir as incertezas em simuladores de reservatórios (em escala de centenas de metros e quilômetros), melhorando o poder de predição e conseqüentemente maior embasamento para as decisões a serem tomadas pelos engenheiros de petróleo.

## 2) Catálise de etanol

Outra linha de pesquisa é o desenvolvimento de nanoestruturas para catálise de etanol a serem utilizadas como combustível nas chamadas células a combustível, que

tem uma eficiência na conversão de energia muito maior que motores a combustão interna (queima do etanol). Nesse sentido, a partir dos chamados cálculos de primeiros princípios estamos projetando nanopartículas metálicas do tipo core-shell que possam catalisar a quebra das ligações na molécula do etanol de forma mais eficiente utilizando materiais mais abundantes e com custo reduzido. Nossos estudos mostraram que nanopartículas a base de Ouro e Platina induzem um alongamento da ligação C-O, que pode ser explorada para melhorar a reação de oxidação do etanol.

### 3) Combustíveis solares

Também estamos desenvolvendo nanoestruturas que permitam a conversão do CO<sub>2</sub> em outras matérias-primas com maior valor agregado (como metanol, ácido fórmico, etc). Para isso, é necessário entender a seletividade dessas nanoestruturas para cada um dos produtos e desenvolver nanoestruturas que possam otimizar esses processos.

CONTATO:

Prof. Dr. Caetano Rodrigues de Miranda

Telefone: (11) 3091-7009

E-mail: [cmiranda@if.usp.br](mailto:cmiranda@if.usp.br)