

ESTUDO DO EFEITO SINÉRGICO ENTRE O LUBRIFICANTE MONOOLEATO DE GLICERILA E A CARBOXIMETILCELULOSE NA REDUÇÃO DO COEFICIENTE DE ATRITO DE FLUIDOS DE PERFURAÇÃO DE BASE AQUOSA ATRAVÉS DE CÁLCULOS TEÓRICOS

Aline Carvalho Baruqui¹, Regina Sandra Veiga Nascimento¹, Marco Antonio Chaer Nascimento¹
Bolsista PRH-PB 01, alinebaruqui@gmail.com, ¹Instituto de Química, UFRJ

R E S U M O

MOTIVAÇÃO: Uma das funções mais importantes dos fluidos de perfuração é ser lubrificante, reduzindo o aquecimento e desgaste da broca ocasionado pelo atrito desta com as paredes do poço. A lubrificidade se torna particularmente relevante em perfurações envolvendo um alto ganho de ângulo ou grandes profundidades, nas quais o efeito do atrito é mais pronunciado. Nesses casos geralmente são utilizados fluidos à base de óleo, altamente lubrificantes. Entretanto, por razões ambientais e econômicas vem-se investindo cada vez mais no desenvolvimento de fluidos de perfuração de base aquosa que possam ser utilizados em todas as fases da perfuração de um poço. O desafio, portanto, é desenvolver fluidos à base de água que apresentem coeficientes de atrito semelhantes ou menores que os dos fluidos à base de óleo. Resultados experimentais preliminares encontrados pelo Grupo mostram que existe um efeito sinérgico entre o aditivo lubrificante, monooleato de glicerila, e a carboximetilcelulose, polissacarídeo utilizado em fluidos como modificador reológico, resultando em coeficientes de atrito extremamente baixos.

OBJETIVO: O trabalho tem como objetivo desenvolver estudos teóricos sobre o sistema formado pelo polissacarídeo carboximetilcelulose e o lubrificantes monooleato de glicerila, visando contribuir para uma melhor compreensão dos mecanismos envolvidos no efeito sinérgico encontrado experimentalmente.

APLICAÇÃO NA INDÚSTRIA DO PETRÓLEO: O entendimento do efeito aditivo entre o monooleato de glicerila e a carboximetilcelulose possibilitará um melhor aproveitamento do mesmo, e poderá servir de modelo para a interação entre outros polissacarídeos e lubrificantes, permitindo o desenvolvimento de sistemas lubrificantes ótimos, que sejam capazes de tornar a capacidade de lubrificação de fluidos à base aquosa comparável ou melhor do que a apresentada por fluidos de base óleo.

RESULTADOS OBTIDOS: Foram realizados cálculos de otimização da geometria e das frequências do monooleato de glicerila, assim como, de dímeros e tetrâmeros da carboximetilcelulose com diferentes graus de substituição. Para tal foi utilizado o programa Jaguar, cálculos DFT com os funcionais B3LYP e M06-2X e a base 6-31g**. Posteriormente executaram-se cálculos de dinâmica molecular entre o monooleato e dímeros da carboximetil celulose. O programa utilizado foi o polygraf, e as dinâmicas adiabáticas, sem solvente, com campo de força Dreiding. A partir dos resultados da interação que forneceram menores energias realizaram-se novos cálculos de geometria e frequência com o objetivo de obter parâmetros para construção de um campo de força a ser usado nos cálculos de dinâmica envolvendo o monooleato, a carboximetilcelulose e a superfície metálica.