

LIVRO DE RESUMOS



DÉCIMA PRIMEIRA SEMANA DA
GRADUAÇÃO E PÓS-GRADUAÇÃO DO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS - USP

2021



Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos

XI Semana Integrada do Instituto de
Física de São Carlos

Livro de Resumos

São Carlos
2021

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

SIFSC 11

Coordenadores

Prof. Dr. Vanderlei Salvador Bagnato

Diretor do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Luiz Vitor de Souza Filho

Presidente da Comissão de Pós Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Luís Gustavo Marcassa

Presidente da Comissão de Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Comissão Organizadora

Arthur Deponte Zutião

Artur Barbedo

Beatriz Kimie de Souza Ito

Beatriz Souza Castro

Carolina Salgado do Nascimento

Edgard Macena Cabral

Fernando Camargo Soares

Gabriel dos Reis Trindade

Gabriel dos Santos Araujo Pinto

Gabriel Henrique Armando Jorge

Giovanna Costa Villefort

Inara Yasmin Donda Acosta

Humberto Ribeiro de Souza

João Hiroyuki de Melo Inagaki

Kelly Naomi Matsui

Leonardo da Cruz Rea

Letícia Cerqueira Vasconcelos

Natália Carvalho Santos

Nickolas Pietro Donato Cerioni

Vinícius Pereira Pinto

Normalização e revisão – SBI/IFSC

Ana Mara Marques da Cunha Prado

Maria Cristina Cavarette Dziabas

Maria Neusa de Aguiar Azevedo

Sabrina di Salvo Mastrantonio

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Informação do IFSC

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos
(11: 06 set. - 10 set. : 2021: São Carlos, SP.)
Livro de resumos da XI Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos/ Organizado por João H. Melo Inagaki [et al.].
São Carlos: IFSC, 2021.

412 p.

Texto em português.

1. Física. I. Inagaki, João H. de Melo, org. II. Título

ISBN 978-65-993449-3-0

CDD 530

PG145

Caracterização da superfície da calcita através de espectroscopia vibracional não-linear

PALMA, N. B.¹; MIRANDA, P. B.¹

nicolau.filho@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

As propriedades ópticas e químicas da calcita (CaCO_3) fazem com que esse mineral seja amplamente utilizado em diversas áreas como dispositivos ópticos, agricultura, construção civil, indústria farmacêutica, indústria petrolífera, entre outros. (1) Em diversas dessas aplicações a informação de como os íons Ca^{+2} e CO_3^{2-} estão organizadas na superfície e como interagem com outras moléculas ou íons desempenha um papel fundamental. Por exemplo, reservatórios de petróleo do pré-sal contêm predominantemente minerais carbonáticos, para os quais a calcita pode ser utilizada como mineral modelo. O entendimento da interação desses minerais com íons da água do mar e com moléculas orgânicas pode contribuir para o aumento da recuperação de petróleo. A espectroscopia vibracional por geração de soma de frequências (SFG) pode trazer informações sobre a natureza química por meio do espectro vibracional e sobre o ordenamento médio das moléculas em uma única monocamada. (2) Esta técnica permite uma investigação direta das moléculas em meios com quebra da simetria de inversão, que ocorre naturalmente em interfaces entre dois meios isotrópicos como gases, líquidos e um grande número de sólidos. Primeiramente realizamos um estudo detalhado da anisotropia e dependência com a polarização do espectro SFG da superfície da Calcita. Foram observadas três vibrações principais na faixa dos estiramentos dos grupos carbonato da superfície, cuja atribuição foi realizada com a ajuda de cálculos por DFT do espectro vibracional da superfície da calcita: o estiramento simétrico em 1069 cm^{-1} , o estiramento assimétrico das ligações CO que interagem com o cristal, e o estiramento CO da ligação que aponta para fora da superfície. A modelagem dos resultados obtidos permite obter informações importantes sobre a estrutura molecular da superfície da calcita, como a orientação dos íons de carbonato na superfície, e servirão de referência para o entendimento de resultados futuros de interação de calcita com água, íons e petróleo. Em seguida foram realizados experimentos de limpeza da superfície com o uso de água com baixa concentração salina em superfícies de calcita modificadas por ácido esteárico, óleo condensado e "óleo morto". Estratégias similares já foram relatadas com solventes orgânicos ao invés do uso de água com baixa salinidade (LSWI). (3) Através de nossos experimentos descobrimos que nem a limpeza com água do mar diluída e nem com água pura foram capazes de remover por completo (até a última monocamada) o óleo adsorvido na calcita. Isso explica o modesto efeito da LSWI e os baixos valores de recuperação total de petróleo (30%) para os reservatórios do pré-sal. Estas informações importantes servirão para estudos posteriores que investigarão como obter uma solução capaz de remover completamente o óleo e desse modo aumentar a recuperação de petróleo.

Palavras-chave: Caracterização. SFG. Petróleo

Referências:

1 DUFRESNE, W. J. B. *et al.* Raman spectroscopy of the eight natural carbonate minerals of calcite structure. **Journal of Raman Spectroscopy**, v. 49, n. 12, p. 1999-2007, 2018. 2 SHEN, Y. R. Surfaces probed by nonlinear optics. **Surface Science**, v. 299-300, p. 551-562, 1994. DOI: 10.1016/0039-6028(94)90681-5. 3 YANG, Z. *et al.* Binary solvents with ethanol for effective bitumen

displacement at solvent/mineral interfaces". **Energy Fuels**, v. 29, n. 7, p. 4222-4226, 2015.