

ESTRUTURA MOLECULAR FUNDAMENTAL DE CLATRATOS DE HIDRATOS DE GÁS

RIBEIRO, MATEUS¹; RONNE, LEONARDO¹; VERNOCI, BRUNO¹; BATTISTI, NATAN¹; SCHUTZ, TAMARA²; NOVAES, LUIS EDUARDO SILVEIRA DA MOTA³

¹Graduando em Engenharia de Petróleo - Universidade Federal de Pelotas – UFPel – vernochi_7@hotmail.com; ²Graduando em Engenharia Geológica - Universidade Federal de Pelotas – UFPel; ³Orientador e professor do curso de Engenharia de Petróleo - Universidade Federal de Pelotas – UFPel – luis.eduardo.novaes@gmail.com

1. INTRODUÇÃO

A demanda do mercado energético global faz com que o homem busque cada vez mais recursos para a geração de energia, buscando novos campos e desenvolvendo novas tecnologias para o seu desenvolvimento. Os hidrocarbonetos desempenham um papel fundamental nesse meio um vez que o petróleo é a fonte energética primordial para a sociedade porém devido a massiva exploração desse recurso, diversas reservas já entraram em declínio produtivo e então os hidratos de gás e suas aplicações nesse setor podem desempenhar um importante papel

2. METODOLOGIA

A elaboração deste trabalho será baseada em bibliografias, em dados de pesquisas realizadas na exploração dos hidratos de gás e em discussões com técnicos na área, assim podendo ter uma análise concreta sobre a estrutura fundamental do hidrato de gás

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

O hidrato de gás que é um composto cristalino de água e gás leve, devido as suas condições de formação as moléculas de água formam uma cápsula, denominado de *clatrato*, que aprisiona moléculas de gás, como metano, etano, propano e dióxido de carbono (Sloan et aliae., 2007). As condições de formação são encontradas principalmente nas margens continentais, em sedimentos marinhos aonde a lâmina d'água chega entre 100m à 500m de profundidade, acredita-se que 98% das reservas estão concentradas em sedimentos marinhos e os outros 2% em regiões árticas (Birchwood et al., 2010). Hidratos de gás usualmente formam duas estruturas cristalográficas cúbicas estrutura (Tipo) I estrutura (Tipo) II e raramente, uma terceira estrutura hexagonal (Tipo H).

A célula unitária do Tipo I consiste de 46 moléculas de água, formando dois tipos de gaiolas pequenas e grandes. Há duas pequenas na célula unitária contra seis das grandes. A pequena tem a forma de um dodecaedro pentagonal (5) e a grande a forma de um tetradecaedro, especificamente trapezaedro truncado hexagonal (56²), constituindo juntas uma estrutura de Weaire-Phelan. Os gases que mais comumente formam hidratos Tipo I são CO₂ no clatrato de dióxido de carbono e CH₄ no clatrato de metano.

A célula unitária do Tipo II consiste de 136 moléculas de água, formando também dois tipos de gaiolas - pequenas e grandes. Neste caso as pequenas são

dezesesseis contra oito das grandes. A pequena tem a mesma forma pentagonal dodecaédrica da anterior (5), mas a grande é um hexadecaedro (56). O Tipo II é formado por gases como O₂ e N₂.

A célula do Tipo H consiste de 34 moléculas de água, formando três tipos de gaiolas - duas pequenas diferentes e uma grande. Neste caso, a célula unitária consiste de três pequenas do tipo 5, doze pequenas do tipo 456 e uma grande do tipo 56. A formação do Tipo H requer a cooperação entre dois gases (um de molécula grande e outro pequena) para se manter estável. A grande cavidade do Tipo H que permite a presença de grandes moléculas (por ex. butano, hidrocarbonetos), dada a existência de outros gases ajudar a preencher e sustentar os espaços restantes.

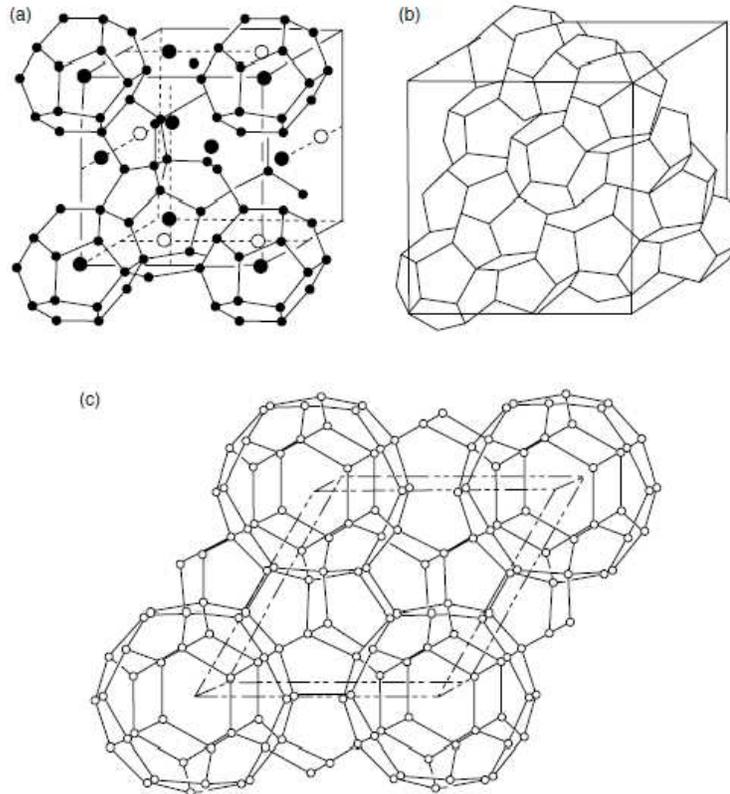


Figura 1.0 retículo cristalino dos hidratos de gás – (a) Tipo I; (b) Tipo II; (c) Tipo H, J. Chem Phys. American Institute of Physics

4. CONCLUSÕES

O estudo da estrutura fundamental do hidrato de gás é de extrema importância para qualificar e avaliar as condições de exploração desse material já que a estrutura molecular implica diretamente na estabilidade do gás aprisionado. Os métodos exploratórios serão bem específicos de acordo com o tipo do clatrato de cada campo exploratório.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. SLOAN, E. D., KOH, C. A., **Clathrate Hydrates of Natural Gases**, Taylor & Francis/CRC Press. Boca Raton. 2008. 3v. Cap. 1, p. 1-46.
2. ELLEN, Thomas (November 2004). **Clathrates: little known components of the global carbon cycle**. Wesleyan University. Página visitada em 7 julho 2013. Disponível em <http://ethomas.web.wesleyan.edu/ees123/clathrate.htm>
- 3 von Stackelberg, M. & Müller, H. M. (1954) *Zeitschrift für Elektrochemie* **58**, 1, 16, 83
- 4 Ripmeester, J. A., Tse, J. S, Ratcliffe, C. I., and Powell, B. M. (1987): "**A New Clathrate Hydrate Structure**", *Nature*, 325, 135.