

**Título .....**: MODELANDO ASFALTENOS À PARTIR DE DADOS ANALÍTICOS.

**Autores .....**: R.C. Silva, P.R. Seidl<sup>1</sup>, <sup>1</sup> J.F. Dias,<sup>2</sup> S.M. de Menezes,<sup>3</sup> M.A.G. Teixeira<sup>3</sup>

**Instituições .:** <sup>1</sup>Departamento de Processos Orgânicos, Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 21949-900, Rio de Janeiro, RJ, Brasil

<sup>2</sup>Departamento de Engenharia Química/IME, 22290-180, Rio de Janeiro, RJ, Brasil

<sup>3</sup>PETROBRAS/CENPES, 21949-900, Rio de Janeiro, RJ, Brasil

e-mail: ronaldorcs@zipmail.com.br

A crescente necessidade de se processar de maneira cada vez mais eficiente petróleo com características mais pesadas, ou seja, com maior número de componentes com alta massa molecular, principalmente os asfaltenos e as resinas, tem levado ao estudo de certas frações pesadas que estão presentes no petróleo. Petróleos com estas características, particularmente o de origem brasileira, exigem grandes esforços nas etapas de pré-tratamento, para eliminar certos contaminantes, e nas de conversão de frações pesadas em leves, que são mais nobres e de maior interesse econômico. Neste sentido os asfaltenos merecem especial atenção, demandando a necessidade de se elucidar sua estrutura molecular, já que seu comportamento durante os processos térmicos e catalíticos é função de sua estrutura. Os principais problemas causados pelos asfaltenos estão relacionados a sua capacidade de flocular e precipitar levando a redução e bloqueio de fluxo nos dutos, envenenamento e desativação de catalisadores, formação de coque, entre outros. Observa-se também um baixo rendimento causados por estes compostos nas unidades de destilação à vácuo e desasfaltação.

Os asfaltenos são, por definição, solúveis em aromáticos e insolúveis em hidrocarbonetos alifáticos, possuindo massa molecular entre  $10^3$  a  $10^4$  g/gmol. São considerados uma mistura complexa contendo um ou mais sistemas de anéis policondensados aromáticos ligados a cadeias alifáticas e naftênicas. São geralmente encontrados em sua estrutura heteroátomos tais como, nitrogênio, enxofre e oxigênio, em diferentes posições e funcionalidades e em nível de traços, metais como níquel e vanádio.

Este trabalho tem como objetivo gerar os parâmetros moleculares necessários para se modelar a estrutura de asfaltenos, à partir das técnicas analíticas de caracterização. Assim obtendo-se uma representação tridimensional dos asfaltenos ou de seus fragmentos poderia se prever seu comportamento físico-químico e reacional. Desta maneira serão possíveis inferências sobre otimizações e desenvolvimento de processos de refino que minimizem problemas operacionais e maximizem desempenho. Para alcançar este objetivo foi estabelecida uma caracterização de asfaltenos que permita o desenvolvimento de sua estrutura tridimensional. Os asfaltenos foram então obtidos utilizando o método IP143/96, a partir de amostras de resíduo de destilação à vácuo (RV). As seguintes técnicas analíticas foram utilizadas neste trabalho na caracterização dos asfaltenos: ressonância magnética nuclear (RMN de  $^1\text{H}$  e  $^{13}\text{C}$ ), a análise elementar, a osmometria de pressão de vapor (VPO), a cromatografia de permeação em gel (GPC), a espectroscopia do infravermelho com transformada de Fourier (FT-IV).

Alguns resultados obtidos na caracterização dos asfaltenos estão representados a seguir.

Tabela 1: Parâmetros Moleculares Médios de Asfaltenos de Diferentes Origens.

| Parâmetros Moleculares                    | Asfaltenos do Petróleo |      |      |
|---|------------------------|------|------|
|   | A                      | B    | C    |
| % Carbonos Aromáticos                     | 58.8                   | 64.1 | 60.8 |
| % Carbonos Saturados                      | 41.2                   | 35.9 | 39.2 |
| % Carbonos Aromáticos, ligados a alquilas | 10.4                   | 27.2 | 10.4 |
| % Carbonos Aromáticos, H                  | 15.4                   | 16.3 | 12.5 |
| % Hidrogênios Aromáticos                  | 10.9                   | 12.0 | 9.0  |
| % Hidrogênio $\alpha$                     | 17.7                   | 12.7 | 16.4 |
| % Hidrogênio $\beta$                      | 52.9                   | 58.6 | 57.3 |
| % Hidrogênio $\gamma$                     | 18.2                   | 16.6 | 18.7 |
| % Hidrogênio Saturado                     | 88.7                   | 88.0 | 91.0 |
| Massa Molecular (GPC- g/gmol)             | 1719                   | 1815 | 962  |