

SIDNEY GONÇALO
(Organizador)

Fósseis Moleculares e Aplicações em
GEOQUÍMICA
ORGÂNICA

Atena
Editora
Ano 2021

SIDNEY GONÇALO
(Organizador)

Fósseis Moleculares e Aplicações em
GEOQUÍMICA
ORGÂNICA

Atena
Editora
Ano 2021

Editora chefe

Profª Drª Antonella Carvalho de Oliveira

Editora executiva

Natalia Oliveira

Assistente editorial

Flávia Roberta Barão

Bibliotecária

Janaina Ramos

Projeto gráfico

Camila Alves de Cremo

Daphynny Pamplona

Gabriel Motomu Teshima

Luiza Alves Batista

Natália Sandrini de Azevedo

Imagens da capa

iStock

Edição de arte

Luiza Alves Batista

2021 by Atena Editora

Copyright © Atena Editora

Copyright do texto © 2021 Os autores

Copyright da edição © 2021 Atena Editora

Direitos para esta edição cedidos à Atena Editora pelos autores.

Open access publication by Atena Editora



Todo o conteúdo deste livro está licenciado sob uma Licença de Atribuição Creative Commons. Atribuição-Não-Comercial-Não-Derivativos 4.0 Internacional (CC BY-NC-ND 4.0).

O conteúdo dos artigos e seus dados em sua forma, correção e confiabilidade são de responsabilidade exclusiva dos autores, inclusive não representam necessariamente a posição oficial da Atena Editora. Permitido o *download* da obra e o compartilhamento desde que sejam atribuídos créditos aos autores, mas sem a possibilidade de alterá-la de nenhuma forma ou utilizá-la para fins comerciais.

Todos os manuscritos foram previamente submetidos à avaliação cega pelos pares, membros do Conselho Editorial desta Editora, tendo sido aprovados para a publicação com base em critérios de neutralidade e imparcialidade acadêmica.

A Atena Editora é comprometida em garantir a integridade editorial em todas as etapas do processo de publicação, evitando plágio, dados ou resultados fraudulentos e impedindo que interesses financeiros comprometam os padrões éticos da publicação. Situações suspeitas de má conduta científica serão investigadas sob o mais alto padrão de rigor acadêmico e ético.

Conselho Editorial**Ciências Exatas e da Terra e Engenharias**

Prof. Dr. Adélio Alcino Sampaio Castro Machado – Universidade do Porto

Profª Drª Ana Grasielle Dionísio Corrêa – Universidade Presbiteriana Mackenzie

Prof. Dr. Carlos Eduardo Sanches de Andrade – Universidade Federal de Goiás

Profª Drª Carmen Lúcia Voigt – Universidade Norte do Paraná

Prof. Dr. Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás

Prof. Dr. Douglas Gonçalves da Silva – Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia

Prof. Dr. Eloi Rufato Junior – Universidade Tecnológica Federal do Paraná



Profª Drª Érica de Melo Azevedo – Instituto Federal do Rio de Janeiro
Prof. Dr. Fabrício Menezes Ramos – Instituto Federal do Pará
Profª Dra. Jéssica Verger Nardeli – Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho
Prof. Dr. Juliano Carlo Rufino de Freitas – Universidade Federal de Campina Grande
Profª Drª Luciana do Nascimento Mendes – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio Grande do Norte
Prof. Dr. Marcelo Marques – Universidade Estadual de Maringá
Prof. Dr. Marco Aurélio Kistemann Junior – Universidade Federal de Juiz de Fora
Profª Drª Neiva Maria de Almeida – Universidade Federal da Paraíba
Profª Drª Natiéli Piovesan – Instituto Federal do Rio Grande do Norte
Profª Drª Priscila Tessmer Scaglioni – Universidade Federal de Pelotas
Prof. Dr. Sidney Gonçalo de Lima – Universidade Federal do Piauí
Prof. Dr. Takeshy Tachizawa – Faculdade de Campo Limpo Paulista



Fósseis moleculares e aplicações em geoquímica orgânica

Diagramação: Daphynny Pamplona
Correção: Mariane Aparecida Freitas
Indexação: Amanda Kelly da Costa Veiga
Revisão: Os autores
Organizador: Sidney Gonçalves de Lima

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

F752 Fósseis moleculares e aplicações em geoquímica orgânica /
Organizador Sidney Gonçalves de Lima. – Ponta Grossa -
PR: Atena, 2021.

Formato: PDF

Requisitos de sistema: Adobe Acrobat Reader

Modo de acesso: World Wide Web

Inclui bibliografia

ISBN 978-65-5983-815-8

DOI: <https://doi.org/10.22533/at.ed.158220601>

1. Fósseis moleculares. 2. Geoquímica orgânica. I.
Lima, Sidney Gonçalves de (Organizador). II. Título.

CDD 561

Elaborado por Bibliotecária Janaina Ramos – CRB-8/9166

Atena Editora

Ponta Grossa – Paraná – Brasil

Telefone: +55 (42) 3323-5493

www.atenaeditora.com.br

contato@atenaeditora.com.br



Atena
Editora
Ano 2021

DECLARAÇÃO DOS AUTORES

Os autores desta obra: 1. Atestam não possuir qualquer interesse comercial que constitua um conflito de interesses em relação ao artigo científico publicado; 2. Declaram que participaram ativamente da construção dos respectivos manuscritos, preferencialmente na: a) Concepção do estudo, e/ou aquisição de dados, e/ou análise e interpretação de dados; b) Elaboração do artigo ou revisão com vistas a tornar o material intelectualmente relevante; c) Aprovação final do manuscrito para submissão.; 3. Certificam que os artigos científicos publicados estão completamente isentos de dados e/ou resultados fraudulentos; 4. Confirmam a citação e a referência correta de todos os dados e de interpretações de dados de outras pesquisas; 5. Reconhecem terem informado todas as fontes de financiamento recebidas para a consecução da pesquisa; 6. Autorizam a edição da obra, que incluem os registros de ficha catalográfica, ISBN, DOI e demais indexadores, projeto visual e criação de capa, diagramação de miolo, assim como lançamento e divulgação da mesma conforme critérios da Atena Editora.



DECLARAÇÃO DA EDITORA

A Atena Editora declara, para os devidos fins de direito, que: 1. A presente publicação constitui apenas transferência temporária dos direitos autorais, direito sobre a publicação, inclusive não constitui responsabilidade solidária na criação dos manuscritos publicados, nos termos previstos na Lei sobre direitos autorais (Lei 9610/98), no art. 184 do Código Penal e no art. 927 do Código Civil; 2. Autoriza e incentiva os autores a assinarem contratos com repositórios institucionais, com fins exclusivos de divulgação da obra, desde que com o devido reconhecimento de autoria e edição e sem qualquer finalidade comercial; 3. Todos os e-book são *open access*, *desta forma* não os comercializa em seu site, sites parceiros, plataformas de *e-commerce*, ou qualquer outro meio virtual ou físico, portanto, está isenta de repasses de direitos autorais aos autores; 4. Todos os membros do conselho editorial são doutores e vinculados a instituições de ensino superior públicas, conforme recomendação da CAPES para obtenção do Qualis livro; 5. Não cede, comercializa ou autoriza a utilização dos nomes e e-mails dos autores, bem como nenhum outro dado dos mesmos, para qualquer finalidade que não o escopo da divulgação desta obra.



APRESENTAÇÃO

Fósseis Moleculares ou biomarcadores em amostras geológicas, são produtos derivados de precursores bioquímicos (biopolímeros) por processos diagenéticos (processos redox), os quais tem sido aplicado a estudos ambientais, análise forense e, em especial, na avaliação de sistemas petrolíferos. Tais compostos são alvos da Geoquímica Orgânica, tornando-se uma das ferramentas indispensável na exploração do petróleo, graças ao avanço, também, de técnicas cromatográficas de separação e análise.

O desenvolvimento de um estudo sistemático da composição orgânica dos sedimentos e petróleo experimentou um grande incremento nas últimas décadas. O desenvolvimento de novas técnicas analíticas instrumentais de CG-EM e CG/EM/EM compõem o fator determinante. São instrumentos que propiciam a caracterização molecular em microquantidades de misturas orgânicas altamente complexas, possibilitando contornar problemas de co-eluição e obter informações mais confiáveis sobre a identidade e quantidade dos biomarcadores.

Na presente edição denominada “**Fósseis Moleculares e Aplicações em Geoquímica Orgânica**”, apresenta-se alguns estudos teóricos e práticos, desenvolvidos em diferentes instituições de ensino e pesquisa, com óleos e rochas de Bacias Sedimentares Brasileiras.

Apresenta-se uma série de 14 artigos, referentes à análise de óleos e matéria orgânica de sedimentos, com diferentes abordagens, metodologias. Há, por exemplo, trabalhos de revisão sobre biomarcadores e suas aplicações, cálculos teórico-computacionais para prever a estrutura de asfaltenos, análise de hidrocarbonetos poliaromáticos em sedimentos recentes e, ainda, alguns estudos, correlacionando biomarcadores ao paleo-ambiente deposicional, a origem da matéria orgânica (marinha, lacustre), a fonte, a biodegradação e/ou a maturidade de amostras geológicas.

Sidney Gonçalo de Lima

SUMÁRIO

CAPÍTULO 1..... 1

ANÁLISE DE BIOMARCADORES EM ROCHAS CRETÁCEAS DA BACIA DE SÃO LUIS


Andrenilton Ferreira Silva
Artur Leal Carvalho Barros
Anita Jocelyne Marsaioli
Sidney Gonçalo de Lima

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.1582206011>

CAPÍTULO 2..... 14

ANÁLISE DE BIOMARCADORES NEUTROS EM SEDIMENTO DA FORMAÇÃO SERRA ALTA - PERMIANO (BACIA DO PARANÁ)


Lorena Tuane Gomes de Almeida
Ailton da Silva Brito
Sidney Gonçalo de Lima

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.1582206012>

CAPÍTULO 3..... 27

ANÁLISE DE HIDROCARBONETOS SATURADOS E CAROTENOIDES AROMÁTICOS EM AMOSTRA DE FOLHELHO DAS CAMADAS BATATEIRA, BACIA DO ARARIPE


Artur Leal de Carvalho Barros
Andrenilton Ferreira Silva
Gustavo Rodrigues de Sousa Junior
André Luiz Durante Spigolon
Sidney Gonçalo de Lima

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.1582206013>

CAPÍTULO 4..... 42

APLICAÇÃO DOS CROMANS NA AVALIAÇÃO DA SALINIDADE E INFLUXO DE ÁGUA DOCE EM FOLHELHOS DA FORMAÇÃO IRATI, BACIA DO PARANÁ

Laercio Lopes Martins
Caroline Adolphsson do Nascimento
Georgiana Feitosa da Cruz
Hélio Jorge Portugal Severiano Ribeiro
Eliane Soares de Souza
Hans-Martin Schulz

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.1582206014>

CAPÍTULO 5..... 59

AVALIAÇÃO DA ORIGEM E EVOLUÇÃO TÉRMICA DA MATÉRIA ORGÂNICA REGISTRADA EM FÁCIES DA FORMAÇÃO IRATI AFETADAS POR INTRUSÕES ÍGNEAS (REGISTRO PERMIANO DA PORÇÃO NORTE DA BACIA DO PARANÁ), UTILIZANDO-SE BIOMARCADORES

Lucas Pinto Heckert Bastos
Danielle da Costa Cavalcante
Celma Jorge de Menezes


Carmen Lucia Ferreira Alferes
Debora Bonfim Neves da Silva
Andressa Oishi
René Rodrigues
Egberto Pereira

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.1582206015>

CAPÍTULO 6..... 77

BIOMARCADORES PRESERVADOS EM CARBONATOS NEOPROTEROZOICOS REGISTRADOS NA FAZENDA ARRECIFE (FORMAÇÃO SALITRE) – BAHIA

Érika Gaspar Martins
Danielle da Costa Cavalcante
Debora Bonfim Neves da Silva
Egberto Pereira

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.1582206016>

CAPÍTULO 7..... 94

CARACTERIZAÇÃO DE COMPONENTES ÁCIDOS EM PETRÓLEOS BIODEGRADADOS: COMPARATIVO ENTRE EXTRAÇÃO EM FASE SÓLIDA (SPE) E CROMATOGRAFIA EM COLUNA DE EXTRAÇÃO CONTÍNUA


Georgiana Feitosa da Cruz
Lívia Carvalho Santos
Laercio Lopes Martins
Luana Pontes Gouveia
Alexsandro Araujo da Silva

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.1582206017>

CAPÍTULO 8..... 111

COMPOSTOS POLARES EM PETRÓLEO APLICADOS A PROCESSOS GEOCROMATOGRÁFICOS

Paulo Cesar Muniz de Lacerda Miranda
Christian Rocque Souto Maior
Sidney Gonçalo de Lima
Gustavo Rodrigues de Sousa Júnior

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.1582206018>

CAPÍTULO 9..... 123

DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DOS INTERVALOS *OIL SHALE* PERMIANOS DA BACIA DO PARANÁ

Ailton da Silva Brito
Lorena Tuane Gomes de Almeida
Sidney Gonçalo de Lima


 <https://doi.org/10.22533/at.ed.1582206019>

CAPÍTULO 10..... 133

ESTUDO *IN SILICO* DE ESTRUTURAS ASFALTÊNICAS UTILIZANDO DINÂMICA

MOLECULAR E TEORIA DO FUNCIONAL DA DENSIDADE


Moisés Pereira de Araujo
Alexandre Araujo de Souza
Sidney Gonçalo de Lima

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.15822060110>

CAPÍTULO 11 146

OCORRÊNCIA E DISTRIBUIÇÃO DE HIDROCARBONETOS AROMÁTICOS EM ROCHAS SEDIMENTARES DA FORMAÇÃO CODÓ – CRETÁCEO (BACIA DO PARNAÍBA)


Edymilaís da Silva Sousa
Chribstian Dário Silva de Melo
Sidney Gonçalo de Lima

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.15822060111>

CAPÍTULO 12..... 161

OTIMIZAÇÃO DAS CONDIÇÕES EXPERIMENTAIS PARA SEPARAÇÃO DE COMPONENTES DE PETRÓLEOS BRASILEIROS POR CROMATOGRAFIA LÍQUIDA UTILIZANDO PLANEJAMENTO FATORIAL


Georgiana Feitosa da Cruz
Jhonny Costa Carvalho
Lívia Carvalho Santos
Laercio Lopes Martins

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.15822060112>

CAPÍTULO 13..... 180

CONTAMINANTES ORGÂNICOS PERSISTENTES EM SEDIMENTOS DO RIO PARNAÍBA, TERESINA – BRASIL


Analine Daiany Costa Andrade
Artur Leal de Carvalho Barros
Michel Ricardo de Barros Chaves
Sidney Gonçalo de Lima

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.15822060113>

CAPÍTULO 14..... 194

PRESERVAÇÃO DE GEOPOLÍMEROS NO REGISTRO ESTRATIGRÁFICO E SUAS IMPLICAÇÕES PALEOAMBIENTAIS

Ailton da Silva Brito

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.15822060114>

SOBRE O ORGANIZADOR..... 210

ÍNDICE REMISSIVO..... 211

CAPÍTULO 10

ESTUDO *IN SILICO* DE ESTRUTURAS ASFALTÊNICAS UTILIZANDO DINÂMICA MOLECULAR E TEORIA DO FUNCIONAL DA DENSIDADE

Data de aceite: 01/01/2022

Moisés Pereira de Araujo

Programa de Pós-Graduação em Química - PPGQ, Centro de Ciências da Natureza - CCN, Universidade Federal do Piauí - UFPI, Teresina - Piauí, Brasil
<http://lattes.cnpq.br/5474259952676436>

Alexandre Araujo de Souza

Programa de Pós-Graduação em Química - PPGQ, Centro de Ciências da Natureza - CCN, Universidade Federal do Piauí - UFPI, Teresina - Piauí, Brasil
<http://lattes.cnpq.br/6947695654944752>

Sidney Gonçalo de Lima

Programa de Pós-Graduação em Química - PPGQ, Centro de Ciências da Natureza - CCN, Universidade Federal do Piauí - UFPI, Teresina - Piauí, Brasil
<http://lattes.cnpq.br/1655930426274093>

RESUMO: No presente trabalho, foram realizados cálculos teórico-computacionais baseados em dinâmica molecular e na teoria do funcional da densidade (DFT) para prever a estrutura de asfaltenos encontrados em bacias brasileiras. Foram obtidas as estruturas de dímeros de asfaltenos, revelando as regiões onde podem ser ocluídas moléculas de biomarcadores geológicos.

PALAVRAS-CHAVE: Asfalteno. Biomarcador Geológico. DFT. Química Computacional.

IN SILICO STUDY OF ASPHALTENIC STRUCTURES USING MOLECULAR DYNAMICS AND DENSITY FUNCTIONAL THEORY

ABSTRACT: In the present work, theoretical-computational calculations based on molecular dynamics and density functional theory (DFT) were performed to predict the structure of asphaltenes found in Brazilian basins. Asphaltenes dimer structures were obtained, revealing the regions where molecules of geological biomarkers can be occluded.

KEYWORDS: Asphaltene. Computational Chemistry. DFT. Geological Biomarker.

1 | INTRODUÇÃO

O petróleo, é um composto formado de uma mistura complexa de hidrocarbonetos alifáticos, aromáticos e naftalênicos além de outros compostos que possuem heteroátomos como enxofre, oxigênio e nitrogênio, podendo também estar presentes organometálicos complexados como níquel e vanádio dependendo das condições geradoras desse petróleo (DA CRUZ; MARSAIOLI, 2012).

Os estudos de parâmetros geoquímicos são considerados uma ferramenta bastante importante na caracterização qualitativa e quantitativa de rochas e óleos brutos (petróleos), bem como no estudo detalhado de suas correspondentes bacias formadoras. Esses parâmetros dispõem de informações que

auxiliam no entendimento de diversos processos tais como: deposição de matéria orgânica, o período de formação e o organismo precursor, bem como informações de migração, biodegradação e grau de maturidade térmica (REYES et al., 2015).

Dentre os processos de alterações secundárias que ocorrem com óleos, o mais relevante é a biodegradação, onde há interferência direta das condições geológicas e geoquímicas que colaboraram para o crescimento de micro-organismos. Estes utilizam os hidrocarbonetos depositados como fonte de energia metabólica, gerando produtos de alto interesse geoquímico chamados biomarcadores (LARTER et al., 2003; LOPES et al., 1995).

Estudar a composição dos óleos brutos nem sempre é uma tarefa simples e completamente elucidativa, tendo em vista, que os meios de fracionamento nem sempre são completos e alguns não conseguem particionar completamente as diferentes frações constituintes (saturada, aromática e polar). Por isso, é necessária uma quantidade mais ampla de estudos e testes para poder concluir a análise dos óleos, tais como: perfil de hidrocarbonetos, correlação óleo-óleo e óleo-rocha, ambientes deposicionais, matéria orgânica depositada e nível de evolução térmica são bastante utilizados. Esses teste podem ser comprometidos, de acordo com os diferentes níveis de biodegradação (DA CRUZ; MARSAIOLI, 2012).

Dentre os constituintes da fração pesada de petróleo, estão os asfaltenos. O termo é utilizado para designar moléculas com alta massa molecular, sua alta complexidade levou aos mesmo a serem caracterizados por sua solubilidade em diversos solventes como: *n*-alcanos de baixa massa molecular, hexano, pentano, heptano, tolueno ou benzeno (STALKER et al., 1998; ACEVEDO et al., 2007).

Em geral, os asfaltenos são conhecidos por serem formados por unidades poliaromáticas condensadas justamente com cadeia alifática, devido a sua capacidade de formar aglomerados os asfaltenos podem se organizar na forma de gaiolas e proteger outros compostos de efeitos de degradação externas, preservando assim sua estrutura inicial, esses compostos são chamados de biomarcadores ocluídos e são importantíssimos para caracterização cronológica e química do óleo ou da amostra rochosa (FONTES, 1973).

Muitos dos processos geoquímicos que são importantes e relevantes na formação dos asfaltenos ocorrem em ambientes geológicos, em condições termoquímicas extremas, que são inviáveis de se reproduzir. Com isso, fazem-se necessárias simulações computacionais que possam ajudar a entender melhor os fenômenos termoquímicos, e com isso compreender melhor a formação e a organização estrutural desses asfaltenos.

1.1 Asfaltenos e sua Estrutura

A definição de asfalteno é bem complexo e admite a presença de espécies de características bem distintas entre si. A definição mais aplicada para o conceito de asfalteno é que eles são um componente macromolecular, heteroatômico, capaz de auto associação, mesmo em baixas concentrações (PETERS et al., 2005).

Atualmente a classificação dos asfaltenos é baseada na sua solubilidade em uma classe específica de solventes. Via de regra, a fração asfáltica é classificada como aquela insolúvel em hidrocarbonetos de baixo ponto de ebulição, mas solúvel em solventes como tetracloreto de carbono e benzeno. Posteriormente, os asfaltenos foram definidos como uma fração insolúvel em *n*-heptano, mas solúvel em solventes como tolueno. “A definição mais apropriada é que os asfaltenos são solúveis em hidrocarbonetos aromáticos, tais como: tolueno, benzeno e insolúveis em hidrocarbonetos alifáticos como *n*-pentano, *n*-hexano e *n*-heptano, nos quais as resinas são solúveis” (BUCH et. al., 2003).

Dada a complexidade físico-química, os asfaltenos são altamente estáveis e resistentes aos processos degradativos. É assim que o estudo dos asfaltenos permite conhecer às características geoquímicas de um óleo biodegradado ou imaturo e utilizar as informações obtidas para determinar os parâmetros geoquímicos associados a categorias de matéria orgânica que o originou o, o nível de maturidade, o paleoambiente, entre outros. No que se refere às aplicações industriais, ao analisar uma amostra asfáltica ou de óleo biodegradado, é possível fazer correlações óleo/óleo, óleo/rocha fonte, gerar ferramentas tecnológicas que favoreçam o processamento, tratamento e disposição final das substâncias asfálticas (GONZALEZ et al., 2007; ORTEGA et al., 2007; QUINTERO et al., 2007; PINEDA-FLORES et al., 2002).

1.2 Propriedades Físicas dos Asfaltenos

O modelo mais aplicado para descrever o comportamento físico-químico dos asfaltenos em um determinado óleo cru está embasado nos modelos termodinâmicos dos coloides. Neste modelo, os asfaltenos estão imersos nos maltenos como agregados rígidos micelares, que se mantêm em suspensão por ação das resinas que geram uma película na superfície dos conglomerados. As forças de atração-repulsão tipo eletrostática van der Waals, geradas na interface malteno-asfaleno, são as responsáveis de manter os asfaltenos suspensos na fase maltênica (SÁNCHEZ, 2011; OSPINO-CARO, 2009; QUINTERO et al., 2007; DELGADO, 2006).

A macroestrutura de uma molécula de asfaleno possui a capacidade preservar determinados componentes químicos devido ao impedimento de expor esses compostos a ações externas de degradação química. Com isso, a determinação de desses compostos em óleos está diretamente ligada à caracterização de biomarcadores ocluídos, com composições originais da matéria orgânica (DA SILVA et al., 2008). Uma estrutura hipotética de asfaleno é apresentada na Figura 1.

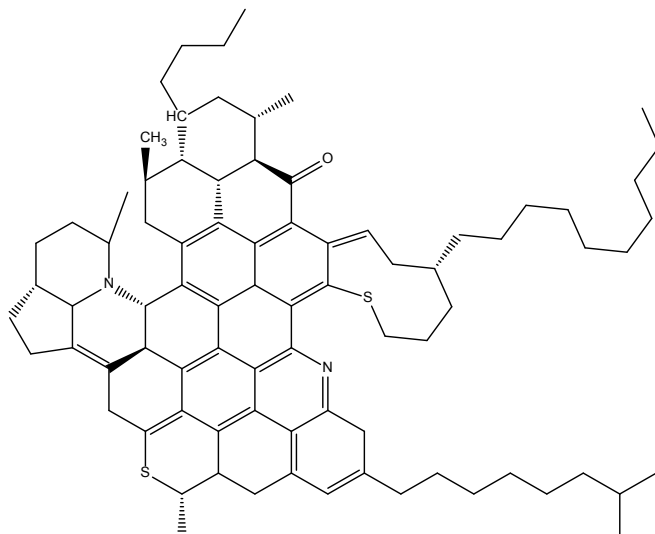


Figura 1. Estrutura hipotética de asfalto. Adaptado de (DA SILVA; AZEVEDO, 2006).

1.3 Análise teórico-computacional da estrutura asfáltica

A estrutura de asfaltenos ainda não está completamente elucidada, tendo em vista o seu alto grau de complexidade e diferentes formas de agregação. As diversas disposições tridimensionais são oriundas das características coloidais dos asfaltenos que se auto agregam, formando um complexo de menor energia para incorporar os biomarcadores geológicos, protegendo-os da ação de agentes externos que os degradam. Esse processo acontece em etapas definidas como: formação de nanocristais por empilhamento π - π de núcleos poliaromáticos, seguido de auto agregação dos nanocristais e expandido para nanoagregados coloidais. Pode-se estimar a sua estrutura e seu nível de agregação através de ferramentas teóricas e cálculos computacionais mecânico-quânticos (DFT) e de dinâmica molecular (BOEK et al., 2009; WANG et al., 2017). Esses métodos conseguem otimizar as estruturas em suas formas mais termodinamicamente favoráveis. Sendo assim, é possível observar características tais como energia total do sistema, volume molecular e grau de aglomeração das moléculas (BIAN et al., 2019).

Os resultados referente as estruturas dos asfaltenos foram obtidos através da compilação de cálculos teóricos utilizando mecânica quântica, mais especificamente o método da teoria do funcional de densidade(DFT) e também utilizando-se da dinâmica molecular para prever o comportamento deles em condições extremas observando suas etapas de auto- agregação. Esse método baseia-se na aproximação de Bohr-Oppenheimer, caracterizando-se por considerar os átomos ligados entre si por funções de energia potencial (EKRAMIPOOYA et al., 2021).Essas duas técnicas, tanto DFT como Dinâmica Molecular são as mais utilizadas para estudar esse fenômeno molecular de auto agregação de anéis

aromáticos, podendo-se entender de maneira mais detalhada os fatores que condicionam a formação desses agregados tais como, presença de heteroátomos, ligações de hidrogênio, interação eletrostática, sobreposição de orbitais moleculares e campos de força (PETERS et al., 2014).

Os últimos estudos envolvendo os asfaltenos mostraram diversos fatores que interferem no perfil de agregação dos asfaltenos e formação dessas resinas, tais como, transferências de cargas, interações de Coulomb, forças de van der Waals, repulsão de cargas, ligações de hidrogênio, e interações entre elétrons π - π (BOEK; YAKOVLEV; HEADEN, 2009). Todos esses termos são úteis para descrever e entender melhor as propriedades moleculares, fazendo a conexão entre os efeitos de nível atômico com a dinâmica molecular, no entanto, algumas estruturas possuem um alto grau de complexidade, limitando assim o estudo dessas propriedades sem alguns modelos de aproximação ou termodinâmica estatística.

2 | METODOLOGIA

Os cálculos DFT foram executados com auxílio do pacote computacional *Gaussian 09* (Gaussian 09, 2016), em ambiente *Linux*. Os resultados foram visualizados com os programas *GaussView 6.0* e *ChemDraw 16.0*, em ambiente *Windows 10*. A estrutura molecular de monômero de asfalto utilizada nos cálculos foi aquela sugerida para amostras de óleos brasileiros (DA SILVA et al., 2006). A otimização da geometria molecular do monômero foi realizada por DFT, e DFT-D para o cálculo da energia do complexo formado pelos monômeros, esse fator de dispersão é importante pois ele descreve os efeitos gerados pelo sistema complexo de núcleos poliaromáticos, em adição ao método utilizou-se o funcional híbrido B3LYP-D3 e conjunto de base 6-31G(d). Após a obtenção da estrutura otimizada do monômero, a interação entre os dois (dímero) e três (trímero) fragmentos foi simulada por meio de Dinâmica Molecular Clássica, através do programa *Chem3D 16.0*, nas condições de temperatura e pressão de 300 K e 200 atm, respectivamente, em ciclos com intervalos de tempo fixos de 2.0 fs, totalizando 600 ciclos. A energia de ligação, E_{bind} do agregado foi calculado de acordo com a Equação 1:

$$E_{bind} = E_{complex} - (E_{frag1} + E_{frag2}) \quad (1)$$

Onde E_{frag1} e E_{frag2} correspondem às energias de cada um dos fragmentos de monômero e $E_{complex}$ refere-se a energia do dímero.

3 | RESULTADOS E DISCUSSÃO

Segundo Silva(2006), existe uma molécula protótipo de asfalto que apresenta

ser o tipo de estrutura encontrada em bacias brasileiras(apud REYES et al., 2015). Esse modelo foi utilizado para ser levada ao programa para os devidos cálculos de otimização e posteriores estudos teóricos Na Figura 2 é mostrada a representação tridimensional da molécula de asfalto utilizando as ferramentas de desenho do próprio software e também sua distribuição espacial buscando minimizar as energias de repulsão e torções entre as ligações. Foi realizado primeiramente um ajuste fino para diminuir a demanda computacional para a otimização. Após essa etapa, realizou-se o cálculo da molécula com parâmetros de base e métodos já definidos. Esse ajuste é importante uma vez que os cálculos posteriores são realizados a partir desse modelo tridimensional. A energia final obtida para essa estrutura foi de 895,0721 kcal/mol. Esse valor corresponde ao sistema otimizado, mantendo o equilíbrio entre todas as suas forças intermoleculares.



Figura 2. Modelo tridimensional do asfalto.

A estrutura tridimensional obtida após a otimização do asfalto, foi utilizada para fazer as simulações dos dímeros, de modo a se observar a disposição espacial desse sistema, obtendo assim o modelo 3D com energia de 850,0423 kcal/mol. Este valor corresponde a uma energia inferior ao monômero, sugerindo uma tendência dessas moléculas de formar agregados moleculares. Posteriormente foi renderizado as regiões referentes as superfícies de potencial eletrostático observando-se assim que estruturas asfálticas aglomeram-se em dímeros e essa organização estrutural dispõe de espaços livres com capacidade de ocluir e adsorver moléculas pequenas. Essas moléculas ficam protegidas de ações externas e assim livres de ações químicas e biológicas que possam degradá-las. As respectivas regiões são indicadas por esferas que representam moléculas que podem ser ocluídas (esfera preta) e adsorvidas (esfera azul). Neste caso, é observável que existe uma disponibilidade maior de áreas de adsorção por conta da organização estrutural que dispõe de mais espaços na extremidade., reforçando a tendência dessas moléculas de formarem essas estruturas em forma de gaiola para comportar e proteger essa classe de biomarcadores ocluídos.

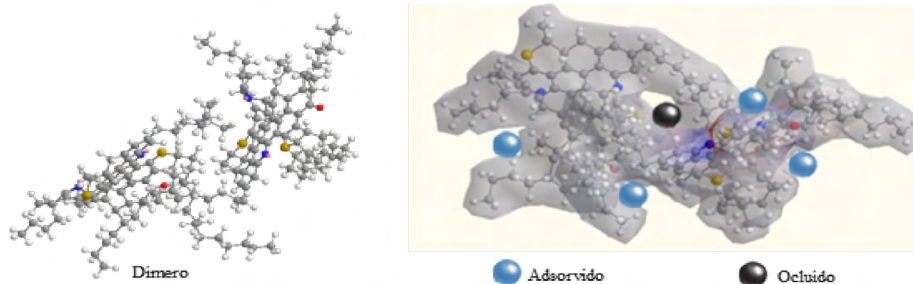


Figura 3. Modelo tridimensional do dímero de asfalto.

Quando se acrescenta um monômero, observou-se um comportamento diferente do esperado. A estrutura não interage de maneira concomitante a formar um polímero estável com 3 fragmentos mas uma das unidades fica isolada (monômero) do dímero que se formou, não havendo assim um ajuste entre as 3 moléculas essa repulsão de uma das partes foi comprovada através do alto energético que foi para 979,5211 kcal/mol na energia total do sistema, mostrando assim sendo menos estável que a organização anterior o que pode estar associada à repulsão eletrônica que ocorre entre as moléculas, as interações entre as cadeias carbônicas, os elétrons π da estrutura já bem comportada não permite a aproximação de uma terceira molécula repelindo-a. Essa repulsão desestabiliza o sistema e causa um aumento da energia total, pode-se observar também que a presença de mais uma molécula de asfalto não alterou a organização estrutural do dímero, reforçando que esse perfil de aglomeração continua sendo o mais energeticamente favorável para essa classe de compostos.

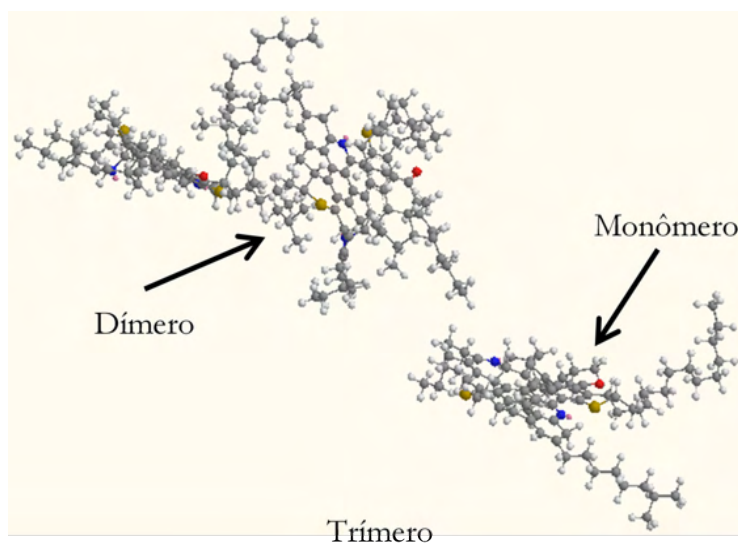


Figura 4. Modelo tridimensional do trímero de asfalto.

Quando se passou a analisar quatro unidades monoméricas, os ciclos de cálculo não convergiram e conseqüentemente erro. Sabendo-se que duas unidades monoméricas se agregam para formar um dímero, otimizou-se a interação de duas unidades diméricas e assim uma composição denominada dímero foi observada. Comportando-se assim, as duas estruturas aparentemente estáveis e bem-comportadas espacialmente, o valor total do sistema não apresentou uma variação tão grande de energia sendo o valor final 846,5478 kcal/mol, nesse estado as moléculas encontram-se termodinamicamente mais estáveis e com regiões de espaços intermoleculares bem definidos e suas interações mantidas através de forças de Van der Waals, interação dipolo-dipolo e estabilização quanto à repulsão da nuvem eletrônica.

Observado a Figura 5 é possível perceber as regiões com maior possibilidade de oclusão e adsorção das estruturas de biomarcadores a partir de estruturas ditas como dímeros. Quando as estruturas se organizam em forma de dímeros de asfaltenos, eles mantem uma estabilidade que favorece a agregação de diversas moléculas que são mantidas por interações eletrostáticas e é possível constatar que nesse modelo de organização, existe a disponibilidade de um número maior de regiões oclusivas e pontos terminais para adsorção.

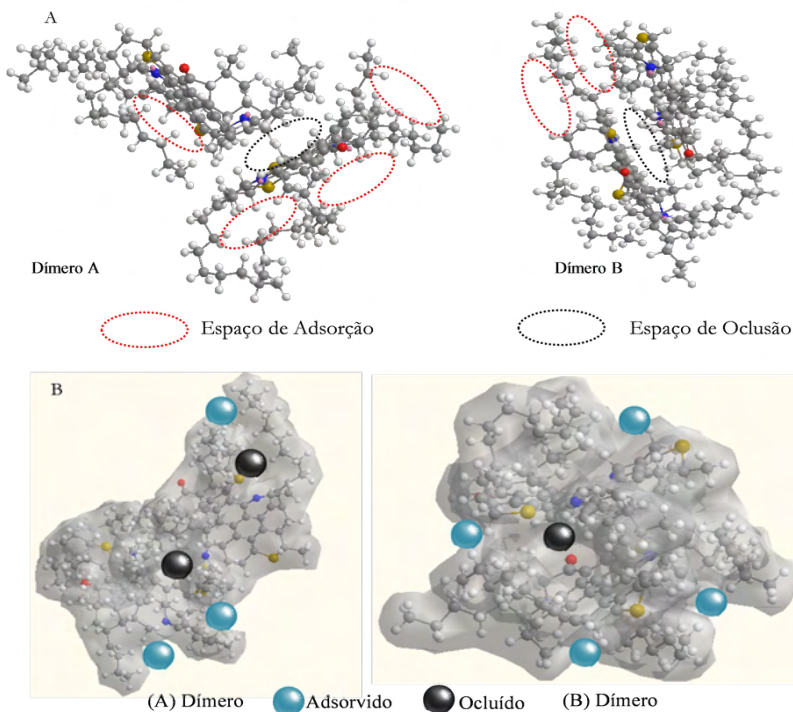


Figura 5. Área de possível oclusão e adsorção nas estruturas de dímeros que formam o dímero. (A). Os mapas de superfície dos dímeros de asfaltenos foram gerados e de forma isolada foram ajustados para melhor se identificar as regiões de oclusão (esferas pretas) e adsorção (esferas azuis).

Outro fator importante é que cada aglomerado mantém uma região em sim ampla, capaz de comportar bem moléculas relativamente grandes (Figura 6). A média de distância entre as regiões livres dos asfaltenos é na ordem de 4,86 Å, o que é um valor significativo comparando-se com a dimensão de comprimento de n-alcenos, isoprenóides e demais compostos de relevância geoquímica. Em termos de dimensão espacial, essa estrutura espacial alcança a ordem de 227,49 Å³, ou seja, uma molécula grande e altamente compactada, o que dá indícios de característica micelar, que são condizentes com o modelo coloidal proposta para a formação e distribuição de asfaltenos.

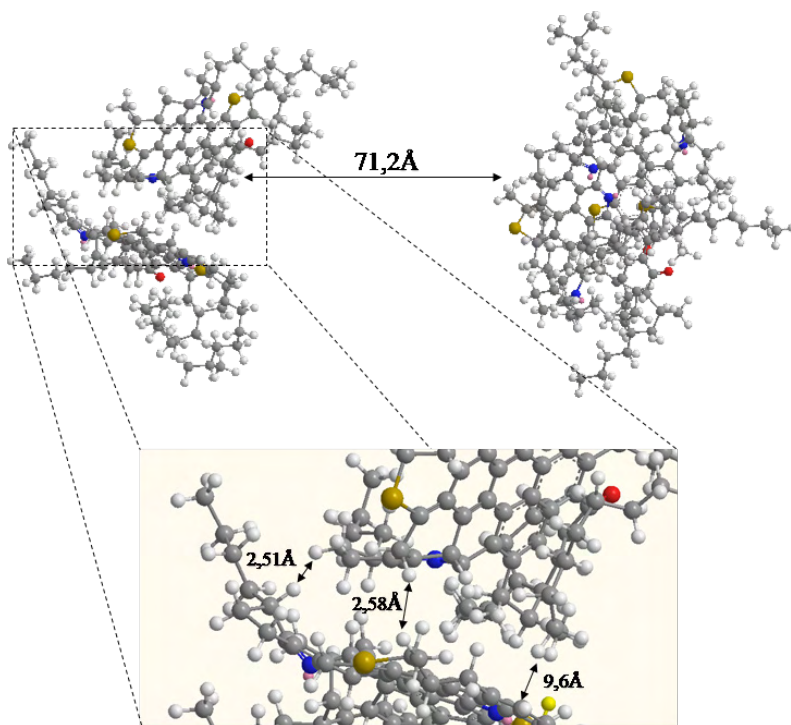


Figura 6. Dimensionamento das distâncias entre os dímeros de asfalto.

A partir da análise das energias dos sistemas estudados até aqui, é possível estimar uma tendência de aglomeração entre as estruturas que leva a sugerir que o modelo base para auto agregação das moléculas é em pares (dímero), uma vez que eles têm uma tendência energética mais baixa que as demais organizações moleculares, onde a energia do complexo em que tem pares de dímeros (Di-dímero) mostrou-se energeticamente mais favorável que a estrutura de apenas um par de dímeros. A fim de comparação, os dados de energia do sistema e volume molar estão descritos na Tabela 1.

Formas de Agregação	Energia(kcal/mol)	Volume molar(A°)
Monômero	895,0721	78,25
Dímero	850,0423	83,58
Trímero	979,5211	110,265
Di-Dímero	846,5478	227,49

Tabela 1. Valores de energia do sistema e volume molar referente a cada forma de agregação.

Observa-se através dos cálculos um padrão de agregação dessas estruturas de formarem pares de asfaltenos, provavelmente esse a célula unitária da grandes agregados asfaltênicos, ou seja, ao invés da cadeia ser formada através de monômeros, esse agregado é formado através de pares, com isso eles minimizam os efeitos de repulsão eletrônica entre as cadeias carbônicas, esse modelo de dímero também confere uma maior capacidade e espaços “vazios” com capacidade de ocluir estruturas chamadas de biomarcadores, tais como, hopanos, esteranos que tem um importante papel na caracterização geológica das rochas.

4 | CONCLUSÃO

A partir de uma proposta estrutural já descrita na literatura para amostras de asfalto oriunda de bacias brasileiras, o estudo de modelagem molecular e otimização teórica, foi possível entender a interação intermolecular, mostrando que a aglomeração mais favorável para a estrutura asfaltênica é através da formação de dímeros, esse possivelmente é o modelo principal e etapa crítica no comportamento coloidal desses compostos, pois é através desse ponto de partida que as macromoléculas começam a agregar, adsorvendo ou absorvendo as demais estruturas geoquímicas protegendo-as de efeitos externos físicos ou biológicos, graças a isso é possível fazer uma comparação geológica entre os biomarcadores contidos nessas “gaiolas” carbônicas com os seus precursores biológicos. Através dos dados conseguidos pelos outputs dos cálculos Entender esse processo é importante também para entender as etapas de formação desses compostos tão importantes e presentes em marcações geoquímicas, e de que forma a sua interação com biomarcadores acontece. Pode-se concluir previamente que existe uma predisposição para uma formação em pares, pois esse perfil além de apresentar termodinamicamente mais estável ainda é o que consegue comportar melhor os biomarcadores ocluídos, estudos posteriores utilizando bases mais refinadas de cálculos podem fornecer parâmetros mais detalhados sobre o processo de oclusão e formação geológica desses compostos.

REFERÊNCIAS

- ACEVEDO, S.; CASTRO, A.; NEGRIN, J. G.; FERNÁNDEZ, A.; ESCOBAR, G.; PISCITELLI, V.; DELOLME, F.; DESSALCES, G. Relations between asphaltene structures and their physical and chemical properties: The rosary-type structure. **Energy and Fuels**, v. 21, n. 4, p. 2165-2175, 2007. Disponível em: <<https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ef070089v>>. Acesso em: 19 out. 2021, 13:30:00.
- BIAN, H.; KAN, A.; YAO, Z.; DUAN, Z.; ZHANG, H.; ZHANG, S.; ZHU, L.; XIA, D. Impact of Functional Group Methylation on the Disaggregation Trend of Asphaltene: A Combined Experimental and Theoretical Study. **Journal of Physical Chemistry C**, v. 123, n. 49, p. 29543–29555, 2019. Disponível em: <<https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jpcc.9b07695>>. Acesso em: 19 out. 2021, 13:30:30.
- BOEK, E. S.; YAKOVLEV, D. S.; HEADEN, T. F. Quantitative molecular representation of asphaltenes and molecular dynamics simulation of their aggregation. **Energy and Fuels**, v. 23, n. 3, p. 1209–1219, 2009. Disponível em: <<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ef800876b>>. Acesso em: 19 out. 2021, 13:31:00.
- BUCH, L.; GROENZIN, H.; BUENROSTRO-GONZALEZ, E.; ANDERSEN, S. I.; LIRA-GALEANA, C.; MULLINS, O. C. Molecular size of asphaltene fractions obtained from residuum hydrotreatment. **Fuel**, v. 82, n. 9, p. 1075-1084, 2003. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/S0016-2361\(03\)00006-1](https://doi.org/10.1016/S0016-2361(03)00006-1)>. Acesso em: 19 out. 2021, 13:31:30.
- DA CRUZ, G. F.; MARSAIOLI, A. J. Processos naturais de biodegradação do petróleo em reservatórios. **Química Nova**, v. 35, n. 8, p. 1628–1634, 2012. Disponível em: <<https://doi.org/10.1590/S0100-40422012000800024>>. Acesso em: 19 out. 2021, 13:32:00.
- DA SILVA, D. B.; AZEVEDO, D. A. **TC-023 - Estudo e Caracterização de Asfaltenos de Petróleos Brasileiros**. Resumo. 29ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, Águas de Lindóia, 2006. Disponível em: <<http://sec.sbq.org.br/cdrom/29ra/listaresumo.htm>>. Acesso em: 19 out. 2021, 13:33:00.
- DA SILVA, D. B.; DA SILVA, T. F.; AZEVEDO, D. A. **T1197-1 - Comparação de biomarcadores “livres” versus ocluídos em asfaltenos de óleos brasileiros**. Resumo. 31ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, Águas de Lindóia, 2008. Disponível em: <<http://sec.sbq.org.br/cdrom/31ra/resumos/T1197-1.pdf>>. Acesso em: 19 out. 2021, 13:33:30.
- DELGADO, J.G. Asfaltenos: composición, agregación, precipitación. Mérida, Venezuela: Laboratorio de formulación, interfases reología y procesos. Universidad de los Andes. Facultad de Ingeniería. Escuela de Ingeniería Química, 2006. (Cuaderno FIRP S369-A).
- EKRAMIPOOYA, A.; MIRZAEI-VALDI, F.; FARISABADI, A.; GHOLAMI, M. R. Effect of the heteroatom presence in different positions of the model asphaltene structure on the self-aggregation: MD and DFT study. **Journal of Molecular Liquids**, v.334, n.15, p.116109, 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.molliq.2021.116109>>. Acesso em: 19 out. 2021, 13:34:00.
- FONTES, R. A. **Estudo qualitativo e quantitativo de biomarcadores ácidos e hidrocarbonetos presentes em óleos da Bacia Potiguar**. 1973. 304p. Tese (Doutorado em Ciências) – Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 1973. Disponível em: <<http://repositorio.unicamp.br/jspui/handle/REPOSIP/248513>>. Acesso em: 19 out. 2021, 13:35:00.

Gaussian 09, Revision A.02, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, X. Li, M. Caricato, A. Marenich, J. Bloino, B. G. Janesko, R. Gomperts, B. Mennucci, H. P. Hratchian, J. V. Ortiz, A. F. Izmaylov, J. L. Sonnenberg, D. Williams-Young, F. Ding, F. Lipparini, F. Egidi, J. Goings, B. Peng, A. Petrone, T. Henderson, D. Ranasinghe, V. G. Zakrzewski, J. Gao, N. Rega, G. Zheng, W. Liang, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, K. Throssell, J. A. Montgomery, Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J. Heyd, E. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, T. Keith, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, J. M. Millam, M. Klene, C. Adamo, R. Cammi, J. W. Ochterski, R. L. Martin, K. Morokuma, O. Farkas, J. B. Foresman, and D. J. Fox, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2016.

GONZALEZ, C.; ESCOBAR, G.; LÓPEZ, L.; LO MÓNACO, S.; LO MÓNACO, G.; LUQUE, S.; ROJAS, C.; GARCÍA, J.A.; RODRÍGUEZ, N.; LUGO, P.; GANN, A. **Pesos moleculares de asfaltenos de crudos y bitúmenes como indicadores de origen y madurez**. Texto Completo. 7p. Conferência: IX Congreso Geológico Venezolano, Caracas, 2007. Disponível em: <https://www.researchgate.net/publication/311715469_Pesos_Moleculares_de_Asfaltenos_de_Crudos_y_Bitumenes_como_Indicadores_de_Origen_y_Madurez>. Acesso em: 19 out. 2021, 13:36:00.

LARTER, S.; HUANG, H.; ADAMS, J.; BENNETT, B.; JOKANOLA, O.; OLDENBURG, T.; JONES, M.; HEAD, I.; RIEDIGER, C.; FOWLER, M. The controls on the composition of biodegraded oils in the deep subsurface: Part II—Geological controls on subsurface biodegradation fluxes and constraints on reservoir-fluid property prediction. **AAPG Bulletin** v.90, n.6, p.921-938 (2003). Disponível em: <<https://doi.org/10.1306/01270605130>>. Acesso em: 19 out. 2021, 13:37:00.

LOPES, J. A. D. **Estudo de Biomarcadores em Óleos do Campo Fazenda Belém, Bacia Potiguar: identificação de 3-alquil e 3-carboxialquil esteranos, constituintes de uma nova classe de biomarcadores**. 1995. 199f. Tese (Doutorado em Ciências) – Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 1995. Disponível em: <<http://repositorio.unicamp.br/jspui/handle/REPOSIP/250365>>. Acesso em: 19 out. 2021, 13:38:00.

MARTÍN-MARTÍNEZ, F. J.; FINI, E. H.; BUEHLER, M. J. Molecular asphaltene models based on Clar sextet theory. **RSC Advances**, v.5, n.1, p. 753-759, 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1039/C4RA05694A>>. Acesso em: 19 out. 2021, 13:39:00.

ORTEGA, N.; BORGES, B.; URBINA de NAVARRO, C.; CONDE, M.. Estudio morfológico de asfaltenos venezolanos extraídos del crudo Zuata y Morichal. **Acta Microscopica**, v. 16, n. 1-2 (Supp.2), 2007.

OSPINO-CARO, T.G. Aspectos generales del daño de formación por depositación de asfaltenos en yacimientos de petróleo. 2009. Graduação. Universidad Nacional de Colombia, Facultad de Minas. Escuela de procesos y energía. Ingeniería de petróleos. Medellín, Colombia, 2009.

PETERS, K. E. *et al.* Stereochemistry, elution order and molecular modeling of four diaerogostanes in petroleum. **Organic Geochemistry**, v.76, p.1-8, 2014. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.orggeochem.2014.07.008>>. Acesso em: 19 out. 2021, 13:40:00.

PETERS, K. E.; WALTERS, C. C.; MOLDOWAN, J. M. **The Biomarker Guide: Biomarkers and Isotopes in the Environment and Human History**. v.1, 2.ed., Cambridge University Press, Cambridge, 2005. ISBN 0 521 78158 2.

PINEDA-FLORES G., BOLL-ARGÜELLO, G.; MESTA-HOWARD, A.M. Biodegracación de asfaltenos por un consorcio microbiano aislado del petróleo crudo "Maya". **Revista Internacional Contaminación Ambiental**. v. 18, n. 2, p. 67-73, 2002.

QUINTERO, L. C. N.; SEIDL, P. R.; TASIC, L.; LEAL, K. Z.; MENEZES, S. M. C.; NUNES, E. C. A. Caracterização de subfrações de asfaltenos de resíduos de vácuo obtidas usando misturas heptano-tolueno (heptol). In: CONGRESSO BRASILEIRO DE PESQUISA E DESENVOLVIMENTO EM PETRÓLEO E GÁS, 4. Anais... Campinas, SP: ABPG, 2007.

REYES, C. et al. Geochemistry of Petroleum: Asphaltenes As a Source of Geochemistry Information. **Cadernos De Geociências**, v. 12, n. 1–2, p. 84–101, 2015.

SÁNCHEZ, M. R.. **Avaliação do uso de biomarcadores ocluídos como uma ferramenta no estudo geoquímico de óleos colombianos biodegradados**. 2011. 205 f. Dissertação (Mestrado em Química) - Universidade Federal do Rio de Janeiro. Rio de Janeiro, 2011. Disponível em: <<http://objdig.ufrj.br/13/dissert/765206.pdf>>. Acesso em: 19 out. 2021, 13:41:00.

STALKER, L.; Stephen, R. L.; Farrimond, P. Biomarker binding into kerogens: evidence from hydrous pyrolysis using heavy water (D₂O). **Organic Geochemistry**, v. 28, n. 3-4, p. 239-253, 1998. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/S0146-6380\(97\)00103-4](https://doi.org/10.1016/S0146-6380(97)00103-4)>. Acesso em: 19 out. 2021, 13:42:00.

WANG, H. et al. Revealing the Intermolecular Interactions of Asphaltene Dimers by Quantum Chemical Calculations. **Energy & Fuels**, v. 31, n. 3, p. 2488–2495, 2017. Disponível em: <<https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.energyfuels.6b02738>>. Acesso em: 19 out. 2021, 13:43:00.

ÍNDICE REMISSIVO

A

Acidez total 93, 95, 96, 97, 100

Ácidos naftênicos 93, 94, 95, 96, 107, 116

Alquildibenzotiofenos 145, 150

Alquilfenantrenos 145, 148, 149, 150

Análise SARA 161, 166

Asfalteno 132, 133, 134, 135, 136, 137, 138, 140, 141, 163, 166, 168

B

Bacia de São Luís 1, 2, 6, 11, 12

Bacia do Paraná 4, 5, 14, 15, 16, 17, 18, 23, 24, 25, 26, 42, 46, 47, 48, 56, 57, 59, 60, 61, 62, 63, 64, 72, 73, 74, 75, 122, 123, 125, 130, 198, 199

Biodegradação 3, 7, 15, 93, 94, 96, 97, 99, 101, 103, 104, 107, 108, 112, 113, 115, 119, 133, 142, 150, 152, 162, 164, 167, 168, 169, 177, 183, 204, 206, 209

Biomarcadores 2, 3, 4, 5, 1, 2, 3, 14, 15, 16, 19, 21, 23, 28, 38, 49, 59, 60, 61, 66, 73, 76, 77, 79, 80, 87, 88, 89, 95, 108, 111, 115, 118, 122, 126, 127, 132, 133, 134, 135, 137, 139, 141, 142, 143, 144, 146, 148, 152, 159, 160, 162, 193, 197, 199, 200, 201, 203, 204, 206, 209

Biomarcadores aromáticos 159

Biomarcadores saturados 28, 49, 59, 61, 76

C

Camadas batateiras 27, 28, 29, 30, 38

Carotenoides aromáticos 4, 27, 28, 38, 39, 145, 153, 155

Contaminação ambiental 179

Cretáceo 6, 1, 6, 12, 40, 64, 117, 120, 122, 145, 195

Cromatografia líquida 6, 48, 66, 80, 160, 161, 162, 163, 166, 171

D

DFT 132, 135, 136, 142

Dibenzotiofenos 111, 145, 150, 151

E

Extração em fase sólida 5, 93, 96, 98

F

Folhelho rico em carbono orgânico 193

Folhelhos betuminosos 17, 36, 40, 42, 43, 46, 47, 48, 49, 51, 52, 53, 54, 55, 123, 198
Formação codó 6, 1, 2, 3, 6, 11, 12, 40, 145, 146, 147, 149, 152, 153, 154, 155, 156
Formação Irati 4, 14, 15, 17, 18, 24, 42, 43, 46, 47, 48, 49, 51, 52, 53, 54, 55, 59, 60, 62, 63, 64, 73, 74, 75, 122, 123, 124, 125, 126, 128, 129, 130, 131, 198, 199
Formação serra alta 4, 14, 15, 17, 18, 20, 21, 22, 26, 124

G

Geocromatografia 110
Geoquímica orgânica 3, 1, 14, 20, 27, 39, 42, 55, 59, 60, 66, 74, 76, 79, 122, 126, 130, 148, 160, 179, 189, 200, 203, 209

H

Hidrocarbonetos alifáticos 81, 132, 134, 179, 180, 181, 182, 186, 188
Hidrocarbonetos policíclicos aromáticos 179, 180, 181, 187
Hopenos 27, 38

I

Interpretações paleoambientais 193, 199, 200

M

Matéria orgânica 3, 4, 1, 2, 3, 5, 6, 7, 10, 11, 14, 15, 19, 20, 21, 22, 23, 25, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 38, 39, 46, 47, 48, 59, 60, 61, 62, 64, 65, 66, 67, 68, 69, 70, 71, 77, 79, 80, 81, 84, 85, 87, 88, 104, 110, 112, 113, 114, 115, 116, 117, 122, 124, 126, 128, 129, 130, 133, 134, 145, 146, 147, 148, 150, 162, 164, 180, 182, 183, 184, 185, 193, 194, 195, 196, 197, 198, 199, 200, 201, 202, 203, 204, 206
Migração secundária 110, 111, 112, 113, 114, 115, 116, 119
MTTC 42, 43, 44, 45, 49, 50, 51, 53

P

Paleoambiente deposicional 14, 23, 27, 28, 36, 42, 43, 45, 46, 52, 53, 55, 104, 145, 147, 150, 151, 155, 209
Paleosalinidade 42, 43, 45, 46, 50, 51, 52, 55
Permiano inferior 17, 24, 47, 62, 122
Petróleo 3, 5, 12, 15, 16, 18, 23, 26, 41, 42, 43, 55, 56, 59, 75, 93, 94, 95, 96, 98, 99, 100, 101, 104, 107, 109, 110, 111, 112, 120, 125, 130, 132, 133, 142, 143, 144, 147, 151, 154, 157, 160, 161, 162, 163, 165, 168, 176, 177, 184, 188, 194, 195, 196, 198, 199, 200, 203, 204, 205, 209
Planejamento fatorial 6, 160, 161, 163, 166, 167, 169, 170, 171, 172, 173, 175, 178

Q

Química computacional 132

R

Rio Parnaíba 6, 179, 180, 181, 184, 186, 187, 188, 189, 190, 191, 192

Rochas geradoras 13, 22, 28, 46, 57, 59, 61, 122, 147, 150, 151, 193, 195, 199, 200, 202, 203, 204, 209


S


SMFI 110, 111, 113, 114, 115


Fósseis Moleculares e Aplicações em

GEOQUÍMICA ORGÂNICA

www.atenaeditora.com.br 

contato@atenaeditora.com.br 

@atenaeditora 


www.facebook.com/atenaeditora.com.br 


 **Atena**
Editora


Ano 2021

Fósseis Moleculares e Aplicações em
**GEOQUÍMICA
ORGÂNICA**

www.atenaeditora.com.br 

contato@atenaeditora.com.br 

[@atenaeditora](https://www.instagram.com/atenaeditora) 

www.facebook.com/atenaeditora.com.br 

 **Atena**
Editora

Ano 2021