

# Relações de escala na simulação da dissolução de calcita

Trabalho #09

Apresentação Oral

theismiu@gmail.com

- Ismael Segundo da Silva Carrasco, Universidade Federal Fluminense - UFF, Doutorado concluído (professor, pós-doc, etc), Física

**Autores:** I. S. S. Carrasco - Universidade Federal Fluminense - UFF

F. D. A. Aarão Reis - Universidade Federal Fluminense - UFF

A compreensão da interação rocha-água é importante na descrição do intemperismo de rochas e evolução dos solos, tendo importante aplicação na prospecção de jazidas minerais ou petrolíferas. No entanto, medidas precisas das taxas de dissolução de minerais são normalmente difíceis de se obter. Efeitos de transporte dos reagentes e produtos dificultam o acesso a essas taxas. Isso motivou diversos pesquisadores a procurar por noções intuitivas em simulações numéricas. Contudo, a capacidade dos computadores atuais restringe as simulações a amostras que são ordens de grandeza menores que grãos interessantes para aplicações. Neste trabalho tentamos contornar essa limitação através de análises de escala. Utilizamos o método de Monte Carlo cinético para simular dissoluções termicamente ativadas de grãos com diferentes tamanhos  $L$ . Nessa modelagem as partículas do grão são removidas com taxa  $\nu\epsilon^n$ , onde  $n$  representa o número de ligações,  $\nu$  a frequência efetiva de vibração da água,  $\epsilon = e^{-E_b/kT}$  com  $E_b$  representando a energia de cada ligação e  $kT$  a energia térmica. Os parâmetros  $\nu$  e  $\epsilon$  foram fixados através de uma calibração que envolveu a comparação da velocidade de propagação dos degraus nas simulações com velocidades experimentais da literatura. Analisando os resultados para diferentes tamanhos, conseguimos obter relações de escala que colapsam a taxa de dissolução para diferentes tamanhos de sistema. Além disso, conseguimos identificar a existência de um crossover no regime de dissolução. Para  $L\epsilon \ll 1$ , temos uma dissolução dominada pelo arredondamento dos grãos. Já para  $L\epsilon \gg 1$ , temos uma dissolução dominada pela retração de degraus nas faces. Realizando uma análise de escala nas taxas obtidas para  $L\epsilon \gg 1$ , conseguimos extrapolar para a temperatura ambiente, onde a taxa obtida concorda muito bem dados experimentais. Esse trabalho foi realizado com apoio financeiro da FAPERJ.

**Comentários adicionais**