



ESTUDIO TEÓRICO DEL EFECTO DE LÍQUIDOS IÓNICOS EN LA REDUCCION DE VISCOSIDAD DE CRUDOS PESADO.

Raiza Hernández-Bravo¹, Alma Miranda, José Manuel Domínguez

Instituto Mexicano del Petróleo, Eje Central Lázaro Cárdenas Norte 152, Colonia San Bartolo
Atepehuacan, Gustavo A. Madero. México DF. México.

¹e-mail: raizahernandezbravo@gmail.com

Resumen

Se realizó un estudio teórico sobre el efecto de los líquidos iónicos en la reducción de la viscosidad utilizando la teoría de funcional de la densidad (DFT). Todos los cálculos fueron realizados en el software Material Studio¹, utilizando el funcional de aproximación al gradiente generalizado (GGA) con Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE). La energía de interacción, se calculó a partir de la diferencia de energías totales entre las especies monómerica y los dímeros. Adicionalmente se analizó la naturaleza de las interacciones moleculares predominantes a través del análisis HOMO-LUMO y la metodología del potencial electrostático². Los resultados mostraron que existe una dependencia en el rearrreglo molecular entre el asfalteno y los líquidos iónicos, llevando a considerar a la interacción catión- π ³, y las fuerzas de dispersión de van der Waals y dipolo-dipolo inducido como las predominantes en este estudio específico.

1. Biovia Material Studio 2016 (16.1.0.21) copyright (c) 2015 Dassault Systemes, all rights reserved.
2. Politzer, P., Truhlar, DG. Chemical Applications of atomic and Molecular Electrostatic Potential; Plenum: New York, 1982.
3. Dougherty DA. Science. 1996; 271:163.