



ESTUDIO DE ESTABILIDAD DE MODELOS DE ASFALTENOS CON DISPERSANTES A BASE DE LÍQUIDOS IÓNICOS.

Ana Cristina Ramírez-Gallardo, ¹ Isidoro García-Cruz.¹

¹Gerencia de Refinación e Hidrocarburos, Dirección de Investigación en Transformación de Hidrocarburos. Instituto Mexicano del Petróleo. Eje Central Lázaro Cárdenas 152 Norte, San Bartolo Atepehuacan, Gustavo A. Madero, 07730 Ciudad de México.
cristinaramz@yahoo.com.mx

Los asfaltenos son una fracción pesada del petróleo, soluble en tolueno e insoluble en heptano. Estos compuestos están constituidos principalmente por anillos aromáticos ligados con cadenas alquílicas, ciclo alcanos y compuestos heterocíclicos que contienen N, S y O.^{1,2} Para mejorar el flujo del aceite se buscan opciones de disolución de los asfaltenos con diferentes dispersantes, entre ellos los líquidos iónicos (LI), con lo que se inhibe la formación de agregados asfálticos. Los líquidos iónicos han sido considerados como una nueva clase de disolventes que permiten hacer más verdes o ecológicos los procesos debido a sus propiedades físicas y químicas.

En este trabajo se estudia la estructura electrónica de algunos modelos de asfaltenos y su interacción con líquidos iónicos, optimizando todos los sistemas químicos, mediante cálculos teóricos utilizando el código computacional DMol³ del Materials Studio.³ Para la optimización de los sistemas se utilizó el funcional GGA, PW91, considerando todos los electrones y funciones de base doblemente polarizadas (DNP). La geometría molecular de los modelos de asfaltenos, después de la optimización presenta una estructura plana. Los resultados muestran que los modelos de asfaltenos son muy reactivos, de acuerdo al gap electrónico HOMO-LUMO que presenta, con lo que se favorece la interacción con los líquidos iónicos que ayuda a dispersarlos.

Referencias:

1. Bruno Schuler, Gerhard Meyer, Diego Peña, Oliver C. Mullins, Leo Gross. *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, 137, 9870
2. M. Siskin, S. R. Kelemen, C. P. Eppig, L. D. Brown, M. Aferworki. *Energy Fuels* **2006**, 20, 1227.
3. BIOVIA Materials Studio de Dassault Systèmes **2016**, San Diego, USA.