



## Estudio Teórico-Experimental de Estabilización de Emulsiones Salmuera en Aceite Crudo por Asfaltenos

José-Manuel Martínez-Magadán<sup>1</sup>, Enrique Soto-Castruita<sup>1,2</sup>, Rodolfo Cisneros-Dévora<sup>1,2</sup>, Ana-Graciela Servín-Nájera<sup>1</sup>, Luis-Silvestre Zamudio-Rivera<sup>1</sup>, Ricardo Cerón-Camacho<sup>1,2</sup>, Jorge-Francisco Ramírez-Pérez<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Instituto Mexicano del Petróleo, Eje Central Lázaro Cárdenas, Norte 152, Col. San Bartolo Atepehuacán, CDMX, 07730; México; <sup>2</sup>CONACYT-Instituto Mexicano del Petróleo, Eje Central Lázaro Cárdenas Norte 152, Col. San Bartolo Atepehuacán, CDMX, 07730; México  
e-mail: mmartine@imp.mx

En el caso de daño a la formación del yacimiento de petróleo debido a las emulsiones salmuera en aceite crudo, el grado de severidad del daño depende de la estructura química de los componentes polares presentes en el petróleo y de la composición química de la salmuera que contiene el yacimiento<sup>1</sup>. Los asfaltenos son los componentes del aceite que dan mayor estabilidad a estas emulsiones, mientras que en las salmueras son los iones divalentes<sup>2,3</sup>. Con el fin de determinar cómo afecta la estructura química de los asfaltenos y el cloruro de calcio a la estabilidad de emulsiones salmuera en aceite crudo se realizó un estudio teórico, considerando tres modelos moleculares representativos de asfaltenos<sup>4,5,6</sup>. Asimismo, se determinaron las propiedades reológicas de varias muestras de emulsiones. Las energías de interacción de los sistemas representativos de la estabilización de la emulsión en kcal/mol  $-92.91 < -82.89 < -14.74$ , disminuyen en tanto menor es el número de heteroátomos en la estructura de los asfaltenos. Los cálculos de la estructura electrónica se realizan mediante el funcional de la densidad LDA(VWN), con calidad gruesa, se utiliza la aproximación OBS para la energía de dispersión. Se utilizan ECP (Effective Core Potentials) para el tratamiento de los electrones internos, y un conjunto de funciones base DN (Double Numeric) para los electrones de valencia. El medio ambiente acuoso se simula con la constante dieléctrica del agua, 78.54, a través del modelo de solvatación COSMO (Conductor-like Screening Model).

### Referencias

- <sup>1</sup> Proyecto IMP-D.61029. "Diseño y síntesis de nuevos prototipos de productos químicos multifuncionales con propiedades dispersantes de asfaltenos, modificadoras de la mojabilidad y desemulsificantes".
- <sup>2</sup> Yang, F. *et.al.* Asphaltene Subfractions Responsible for Stabilizing Water-in-Crude Oil Emulsions. Part 1: Interfacial Behaviors; *Energy Fuels*, **2014**, 28(11), 6897-6904.
- <sup>3</sup> Yang, F. *et.al.* Asphaltene Subfractions Responsible for Stabilizing Water-in-Crude Oil Emulsions. Part 2: Dynamics Simulations; *Energy Fuels*, **2015**, 29(8), 4783-4794.
- <sup>4</sup> Dutta-Majumdar, R. *et.al.* Solid-State <sup>1</sup>H and <sup>13</sup>C Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy of Athabasca Oil Sands Asphaltene: Evidence for Interlocking  $\pi$ -Stacked Nanoaggregates with Intercalated Alkyl Side Chains; *Energy Fuels*, **2015**, 29, 2790-2800.
- <sup>5</sup> Sedghi, M. *et.al.* Effect of Asphaltene Structure on Association and Aggregation Using Molecular Dynamics; *J. Phys. Chem. B*; **2013**, 117, 5765-5776.
- <sup>6</sup> Cisneros-Dévora, R. *et.al.* Molecular modeling, synthesis and characterization of branched germinal zwitterionic liquids for enhanced oil recovery; *Arabian J. Chem.*, **2016** <http://dx.doi.org/10.1016/j.arabjc.2016.05.011>.