

LA QUÍMICA DEL PETRÓLEO: DIVULGANDO DOS ESTUDIOS FUNDAMENTALES

Autor: Edgardo Jonathan Suárez-Domínguez

Resumen

Este artículo divulga la importancia del petróleo en la época actual así como el transporte en tubo. Se analizan dos estudios relevantes: el primero investiga la influencia de átomos de azufre y oxígeno como elementos que componen moléculas en las mezclas de hidrocarburos, destacando cómo estos elementos, a pesar de estar en concentraciones bajas (menos del 1% en algunos casos), alteran significativamente las propiedades termodinámicas y de transporte del petróleo como la viscosidad y energía necesaria para moverlo. Esto permite optimizar su manejo, inhibiendo la deposición de asfaltenos (que nunca es deseable en el transporte en ducto), reduciendo costos operativos en la industria. El segundo estudio se centra en la precipitación de asfaltenos y parafinas en el petróleo crudo, un fenómeno que puede obstruir las tuberías. Utili-

zando métodos de química computacional y termodinámica estadística, se identifican condiciones que favorecen esta precipitación y se proponen estrategias para mitigarla, como ajustar la temperatura y presión del transporte. Al considerar ambos estudios, se evidencia un enfoque holístico en la química de los hidrocarburos, sugiriendo que pequeñas modificaciones en la composición (en el orden de partes por millón o ppm) pueden tener efectos significativos en el sistema en su conjunto. Estos hallazgos ofrecen perspectivas valiosas para mejorar la eficiencia y sostenibilidad en la industria del petróleo, sugiriendo un futuro prometedor para la investigación y la aplicación de innovaciones en este campo.

Palabras clave: hidrocarburos e interacción molecular, sostenibilidad, termodinámica y eficiencia en crudo.



1. El petróleo

El petróleo se ha consolidado como uno de los recursos más importantes y ampliamente utilizados en el mundo actual, desempeñando un papel altamente relevante en el funcionamiento de las economías modernas. Este fluido oscuro, que se extrae del subsuelo a través de diversas técnicas de perforación, se originó hace millones de años a partir de residuos orgánicos que, bajo condiciones específicas de presión y temperatura, se transformaron en hidrocarburos. Hoy en día, el petróleo es la base de una amplia gama de productos que utilizamos diariamente, abarcando desde combustibles esenciales como la gasolina y el diésel, que alimentan nuestros vehículos y maquinarias, hasta plásticos y productos químicos que forman parte integral de numerosos objetos y materiales en nuestra vida cotidiana.

La versatilidad y abundancia del petróleo, lo convierten en un recurso indispensable en múltiples industrias, desde la automotriz hasta la farmacéutica, impactando significativamente en nuestro estilo de vida y en la economía global (Ortuño Arzata, 2021). Sin embargo, su naturaleza compleja y sus propiedades cambian de manera significativa según la composición de su mezcla. Este artículo revisa dos estudios relevantes que analizan aspectos críticos de la química de los hidrocarburos: la influencia de átomos de azufre y oxígeno en sus propiedades (Perez-Sanchez et al., 2024) y el comportamiento de asfaltenos y parafinas en el petróleo crudo (Suarez-Dominguez et al., 2024).

1.1. Propiedades Moleculares y Efectos de Impurezas: La Influencia del Azufre y el Oxígeno

El primer artículo, titulado "Influence of the Presence of Sulfur and Oxygen Atoms on Molecular, Thermodynamic and Transport Properties in Hydrocarbon Mixtures" (Perez-Sanchez et al., 2024), se adentra en la compleja interacción que existe entre la composición química de las mezclas de hidrocarburos y la presencia de átomos de azufre y oxígeno.

La Figura 1 muestra las moléculas principales con sus componentes de petróleo, en donde se visualizan en color gris las de carbono, en blanco las de hidrógeno y en amarillo y rojo las de azufre y oxígeno, respectivamente.

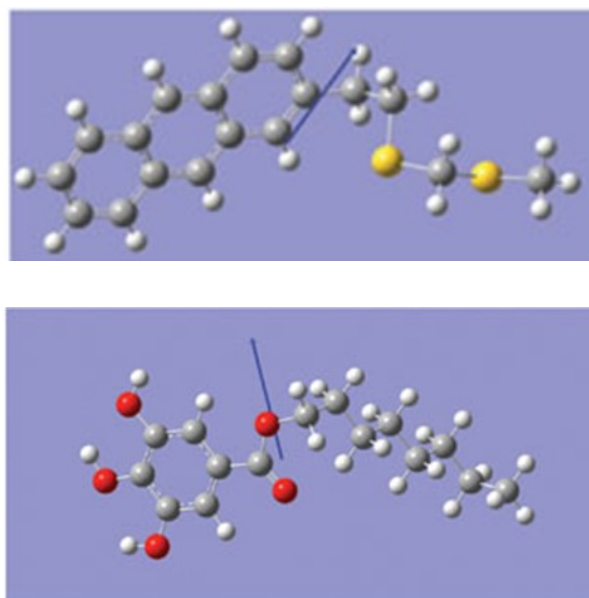


Figura 1.- Moléculas principales de crudo. Fuente: Pérez-Sánchez et al. 2024

Aunque estos átomos se encuentran en concentraciones relativamente bajas, en el orden de las 500ppm, su impacto en las pro-

propiedades físicas y químicas de las mezclas es nada menos que significativo. En particular, afectan la energía necesaria para mantener los componentes de la mezcla en suspensión, esto es, que continúe como un líquido, lo que resulta fundamental para asegurar un transporte eficiente del petróleo. En este artículo se explica cómo, utilizando recursos computacionales, es posible desarrollar diversos cálculos entre los componentes, permitiendo analizar su comportamiento bajo diferentes condiciones.

Las moléculas o componentes principales de los petróleos (Fracción ligera, media y pesada así como moléculas desde 6 hasta más de 32 carbonos) se expresan como un conjunto de proyecciones espaciales que representan las formas más probables de estas moléculas. Esto permite realizar diversos cálculos de energía que son indispensables para entender cómo el petróleo se comporta en condiciones específicas de operación (si fluye más rápido o no).

1.2. Interacciones Moleculares e Implicaciones Industriales

Las moléculas de hidrocarburos, compuestas principalmente de carbono e hidrógeno, pueden ver alterado su comportamiento químico y físico con la adición de otros elementos, como el azufre y el oxígeno. Investigaciones recientes han demostrado que estos elementos pueden formar enlaces con las estructuras carbono-hidrógeno, esto es, la molécula similar con el átomo añadido como parte de

su composición, modificando las fuerzas intermoleculares que mantienen las mezclas en equilibrio (Aziz et al., 2024).

Esta interacción es de suma importancia, ya que al ajustar la concentración de ciertos átomos, es posible optimizar el proceso de transporte del petróleo por la modificación de dichas fuerzas moleculares de los componentes a partir de la inclusión del átomo de azufre u oxígeno que se muestra en la Figura 1. Esto no solo permite que el petróleo fluya más fácilmente, sino que también contribuye a la reducción de los costos asociados a su bombeo pero siendo necesaria la implementación posterior del retiro de azufre, así como una comparativa costo-beneficio.

Los costos operativos en la industria del petróleo son, en gran medida, determinados por la energía eléctrica requerida para los equipos requeridos para mover el líquido en tubería, así como la energía asociada al calentamiento (Ortuño Arzata, 2021). Si se presentan precipitaciones de ciertos componentes, esto puede resultar en una reducción del diámetro interior de las tuberías (por incrustación en la pared interior del ducto), incrementando la resistencia al flujo y, por lo tanto, los costos. Además, la energía necesaria para calentar el petróleo y mantener su viscosidad se incrementa considerablemente si se produce una disminución en la temperatura, complicando aún más el proceso de transporte. Al entender cómo la presencia de ciertos átomos dentro de las moléculas influye en las propiedades moleculares, los ingenieros y científicos



pueden desarrollar fórmulas de combustibles que sean más eficientes y sostenibles, contribuyendo a minimizar el impacto ambiental. Sin embargo, el artículo no llega a realizar un análisis de costo beneficio, o de impacto ambiente, pero puede intuirse que es necesaria la consideración de la separación de estos átomos en otras fases como las asfálticos, o el tratamiento posterior de separación, asociado a la producción y transporte de combustibles, alineándose con los objetivos globales de sostenibilidad. De esta manera en este artículo se presenta una forma de estudiar lo que conocemos como la termodinámica aplicada a petróleo.

2. Precipitación de Asfaltenos y Parafinas en el Petróleo

2.1. El Comportamiento de Asfaltenos y Parafinas

El segundo artículo, titulado "Study of the Precipitation Trend of Asphaltenes and Waxes in Crude Oil Using Computational Chemistry and Statistical Thermodynamics Methods" (Suarez-Dominguez et al., 2024), se enfoca en un fenómeno crítico en el manejo del petróleo: la precipitación de asfaltenos y parafinas. Estos componentes, que son más pesados y complejos que otros hidrocarburos, tienden a aglomerarse y obstruir las tuberías, lo que presenta un desafío considerable para la industria del petróleo principalmente en las zonas de México donde existe una mayor proporción de petróleo con este tipo de moléculas componentes. En el Noreste de México, por

ejemplo, existe petróleo de muy alta viscosidad, y lo que corresponden a una relación de densidad conocida como gravedad específica API, siendo de valores muy bajos los de mayor viscosidad.

2.2. Métodos Computacionales y Estrategias de Mitigación

El estudio utiliza avanzados métodos de química computacional (mediante el método MMH -Multiple Minimum Hypersurfaces-) y termodinámica estadística, como la obtención del valor de la energía electrónica mediante el programa MOPAC (método semiempírico AM1). Los valores de la energía libre de asociación correspondiente a cada configuración y la selección de la asociación de menor energía fueron determinadas mediante el programa ENERGY2016.

Para analizar las condiciones que favorecen la precipitación de estos componentes indeseados. A través de la simulación de diferentes condiciones termodinámicas (como la energía libre superficial proporcional a la tensión interfacial), los investigadores pueden prever cuándo y cómo se producirá la precipitación, lo que les permite diseñar estrategias efectivas para mitigar este problema. Este enfoque no solo ahorra tiempo y recursos valiosos, sino que también optimiza el manejo del petróleo crudo en la industria. Entre las estrategias documentadas se encuentran la modificación de la temperatura y la presión durante el transporte del petróleo, así como la adición de aditivos químicos a partir de componentes

derivados de ácidos grasos, que pueden ayudar a mantener los asfaltenos y parafina, que son moléculas de alto peso molecular, en suspensión (Sun et al., 2023).

Estas soluciones son fundamentales para mejorar tanto la calidad como la manejabilidad del petróleo crudo, asegurando que se mantenga en condiciones óptimas durante su transporte (moverlo a través de una tubería de un lugar a otro).

3. La Sinergia de Ambos Estudios

Al considerar ambos estudios en conjunto, se expone un marco que enriquece nuestra comprensión teórica de la química de los hidrocarburos y proporciona aplicaciones prácticas relevantes para la industria. La interacción entre las propiedades moleculares alteradas (energía libre de asociación o el par potencial molecular) por la presencia de azufre y oxígeno y el comportamiento de los asfaltenos y parafinas crea un sistema químico (de interacción de moléculas modificadas) presente en el transporte y la utilización eficiente del petróleo. La integración de modelos computacionales y simulaciones avanzadas en ambos estudios representa un avance significativo en la investigación de la ingeniería del petróleo (Tang et al., 2023). Esto permite a científicos e ingenieros entender con mayor precisión cómo interactúan los diferentes componentes del petróleo, como las señaladas en los dos artículos a partir de los efectos en sus propiedades termodinámicas, y les brinda herramientas para optimizar procesos y reducir

costos operativos, especialmente relevante en un contexto global donde la eficiencia y la sustentabilidad o la reducción de energía de procesos son más importantes que nunca.

4. Futuro de la Investigación y Aplicaciones Prácticas

La combinación de estos estudios resalta la urgente necesidad de seguir explorando las complejidades de los hidrocarburos. A pesar de los avances significativos, persisten muchas preguntas por responder. Por ejemplo, la influencia de otros elementos o compuestos, como los asociados a fases más comunes como la gasolina o el Diesel, y las propiedades del petróleo merece una investigación más profunda (Yusuf et al., 2024). Además, la búsqueda de combustibles más limpios y sostenibles, considerando los procesos con azufre en cadenas que no intervengan en los combustibles de uso común, se convierte en un imperativo ante los desafíos ambientales actuales. Las aplicaciones prácticas de estos estudios son extremadamente variadas. Desde la optimización de los procesos de extracción y transporte hasta el desarrollo de nuevos aditivos químicos que pueden mejorar la calidad del petróleo crudo, las oportunidades son vastas y diversas (Mazaheri et al., 2024). La implementación de estas estrategias no solo puede aumentar la eficiencia económica de la industria, sino que también contribuir a un futuro más sostenible en el sector energético.

5. Importancia de conocer las implicaciones prácticas del petróleo

Conocer las implicaciones prácticas del petróleo es relevante, porque el petróleo se usa en muchas cosas que usamos todos los días, como gasolina para los coches, plásticos para juguetes y productos que nos ayudan en casa. Por otro lado, ayuda a reconocer la necesidad de continuar investigando sobre el petróleo, aunque nos encontremos en la búsqueda e implementación de alternativas sustentables para la generación de productos y energía.

Entender cómo funciona el petróleo y cómo se puede mejorar su transporte ayuda a que no se desperdicie y a que sea más fácil de usar. También, si encontramos formas de que el petróleo sea más limpio y seguro para el planeta, ayudamos a cuidar el medio ambiente. Así, podemos tener energía para jugar y vivir, sin dañar nuestro mundo.

Conclusión

Los estudios examinados proporcionan una perspectiva sobre la química de los hidrocarburos y sus implicaciones prácticas en la industria del petróleo. En el primer artículo se explica cómo los átomos de azufre y oxígeno influyen en las propiedades moleculares de las mezclas con hidrocarburos, abordándose de manera divulgativa en este papel, destacando que se abre una nueva vía hacia innovaciones que pueden optimizar significativamente la eficiencia y la sostenibilidad de los

procesos industriales.

Además, comprender el comportamiento de los asfaltenos y asfaltenos en el petróleo crudo es trascendental, ya que estos componentes no solo afectan el flujo y la manejabilidad del petróleo. Sin embargo hace falta determinar exactamente el impacto considerable en los costos operativos y en la calidad del producto final. La capacidad de anticipar y mitigar la precipitación de estos compuestos a través de métodos computacionales y ajustes en las condiciones de transporte es una herramienta valiosa para los ingenieros y científicos del sector.

Asimismo, la integración de enfoques teóricos y prácticos, junto con el uso de tecnologías avanzadas de simulación, representa un paso importante hacia el desarrollo de soluciones más eficientes. La combinación de estos esfuerzos no solo puede resultar en una mayor eficacia económica para la industria del petróleo, sino que también contribuye a un enfoque más responsable y sostenible ante los desafíos ambientales que enfrentamos actualmente.

Glosario

Aditivo: Una sustancia que se añade a otra para mejorar sus propiedades o funciones, como en el caso del petróleo, se añaden líquidos para que no se separen sus componentes, o se mantengan en movimiento cuando se bombean por una tubería.

Asfalteno: Compuestos pesados y complejos que se encuentran en el petróleo y que pueden causar obstrucciones en las tuberías. Moléculas grandes.

Azufre: Un elemento químico que, en pequeñas cantidades, puede afectar las propiedades del petróleo y otros hidrocarburos.

Computacional: Relacionado con el uso de computadoras para realizar cálculos o simulaciones.

Densidad: La cantidad de masa que tiene un objeto por su volumen; en el caso del petróleo, influye en su flotabilidad y manejo. En la industria también se le conoce como gravedad específica o grados API.

Hidrocarburo: Un tipo de molécula que está formada solo por átomos de carbono e hidrógeno; es el principal componente del petróleo.

Industria: Conjunto de actividades económicas que producen bienes o servicios; en este caso, la industria del petróleo.

Mezcla: La combinación de dos o más sustancias diferentes que pueden interactuar entre sí.

Obstrucción: Cuando algo bloquea el paso o el flujo de un líquido, como el petróleo en una tubería.

Parafina: Un tipo de hidrocarburo que es sólido a temperatura ambiente y puede acumularse en el petróleo, causando problemas en su transporte. A diferencia de los asfaltenos se conforman por moléculas, normalmente alargadas, de alto peso molecular.

Perforación: El proceso de hacer un agujero en la tierra para extraer petróleo o gas.

Petróleo: Un líquido oscuro que se extrae del suelo, compuesto principalmente de hidrocarburos, y que se usa para hacer combustibles y otros productos.

Simulación: Un modelo que imita o reproduce un proceso real, usado para entender cómo funcionará en la práctica.

Sinergia: Interacción o cooperación entre dos o más elementos que produce un efecto total mayor que la suma de sus efectos individuales. En el contexto de la industria del petróleo, la sinergia puede referirse a la colaboración entre diferentes procesos, tecnologías o sustancias que optimizan la extracción, el procesamiento o el transporte del petróleo, mejorando así la eficiencia y reduciendo costos. También se conoce como sinergia el trabajo en conjunto de dos o más personas para lograr un mismo fin.

Termodinámica: Una rama de la física que estudia el calor y la energía, y cómo se transforman en diferentes situaciones.

Viscosidad: Una medida de qué tan espeso o pegajoso es un líquido; los líquidos más viscosos fluyen más lentamente.

Referencias

Aziz, Z. S., Jazaa, S. H., Dageem, H. N., Banoon, S. R., Balboul, B. A., & Abdelzاهر, M. A. (2024). Bacterial biodegradation of oil-contaminated soil for pollutant abatement contributing to achieve sustainable development goals: A comprehensive review. *Results in Engineering*, 102083.

Mazaheri, A. R., Nasiri, M., Javadi, A., & Amiri, E. (2024). Stabilization of crude oil-contaminated Bushehr carbonate sand: physical and chemical study. *Bulletin of Engineering Geology and the Environment*, 83(9), 373.

Ortuño Arzata, S. (2021). El mundo del petróleo. Fondo de Cultura Económica: España 100pp.

- Perez-Sanchez, J. F., del Carmen Galindo-Lopez, R., Suarez Dominguez, E. J., Rodriguez-Rodriguez, J. R., Perez-Badell, Y., & Izquierdo Kulich, E. F. (2024). Influence of the Presence of Sulfur and Oxygen Atoms on Molecular, Thermodynamic and Transport Properties in Hydrocarbon Mixtures. *Current Analytical Chemistry*, 20(5), 335-344.
- Suarez-Dominguez, E. J., Perez-Sanchez, J. F., Herrera-Pilotzi, H., Rodriguez-Rodriguez, R., Perez-Badell, Y., Montero-Cabrera, L. A., & Izquierdo-Kulich, E. F. (2024). Study of the precipitation trend of asphaltenes and waxes in crude oil using computational chemistry and statistical thermodynamics methods. *Results in Engineering*, 21, 101672.
- Sun, D., Wang, Y., Gao, J., Liu, S., & Liu, X. (2023). Insights into the relation of crude oil components and surfactants to the stability of oily wastewater emulsions: Influence of asphaltenes, colloids, and nonionic surfactants. *Separation and Purification Technology*, 307, 122804.
- Tang, Y., Fu, Z., Raos, G., Ma, F., Zhao, P., & Hou, Y. (2023). Molecular dynamics simulation of adhesion at the asphalt-aggregate interface: a review. *Surfaces and Interfaces*, 103706.
- Yusuf, M., Ridha, S., & Kamyab, H. (2024). Recent progress in NP-Based Enhanced oil Recovery: Insights from molecular studies. *Journal of Molecular Liquids*, 124104.

Autor:

Edgardo Jonathan Suárez-Domínguez

Universidad Autónoma de Tamaulipas

*Jefe de investigación de la Facultad de Arquitectura,
Diseño y Urbanismo (FADU-UAT)*

edgardo.suarez@docentes.uat.edu.mx