

1. La composición química del petróleo

DOI: [cc.443.01](https://doi.org/10.44321/1944-6444.2019.01.0001)

RICARDO CERÓN CAMACHO*

Resumen

Muchos de nosotros hemos escuchado palabras complicadas, demasiado técnicas o con un lenguaje muy científico y especializado, y nunca nos detenemos a pensar qué significan o si acaso tienen que ver con nuestra vida cotidiana. Sin embargo, muchas de esas palabras tienen un gran impacto en nuestro día a día. Dos de esas palabras son “química” y “petróleo”.

Puesto que estas dos palabras definirán el rumbo de este libro, se comenzará por definir o interpretar de manera de manera clara cada una, de tal manera que las personas que lean este libro sean capaces de entender su significado, o bien, que aquel público que no sea especializado también lo entienda.

Palabras clave: *química, petróleo, enlace químico, carbono, hidrocarburo.*

Introducción

Definiendo la química

Si buscamos la definición de química en libros especializados, encontraremos descripciones bastante complejas. Podemos comenzar por lo más sencillo. En el diccionario, la química se define como la “ciencia que estudia la estructura, propiedades y transformaciones de los cuerpos a partir de su composición” (ASALE Y RAE, s. f.).

* Doctor en Ciencias, profesor-Investigador en el Instituto Mexicano del Petróleo, México.
ORCID: 0000-0003-2757-4963; Scopus: 12760894900; correo electrónico: rceron@imp.mx

Sin embargo, esta definición no siempre facilita la comprensión de lo que estudia realmente la química. De manera más práctica, antes de definirla conviene precisar qué entendemos por sustancias o materia: es decir, todo aquello que nos rodea en el mundo físico, como el aire, el agua, un helado, un refresco, la madera, el hielo o el gas helio en los globos. Es decir, todo lo que existe en el universo, ya sea un sólido, líquido o un gas. A eso le llamaremos sustancia (Hein, 1999).

Ahora, cada sustancia está hecha de algo y absolutamente todas las sustancias que existen (hasta nosotros mismos) estamos hechos de átomos y moléculas. Estos átomos (de una forma práctica) podemos interpretarlos como pequeñas esferas con ciertas características bien definidas; es decir, es la unidad fundamental de todas las sustancias que existen y hay diferentes tipos de átomos. Cuando agrupamos átomos del mismo tipo, se les conoce como elementos (o sustancias puras) y cuando agrupamos de diferentes tipos les llamamos compuestos (o sustancias complejas) (Huheey *et al.*, 1997). Por otra parte, cuando agrupamos átomos, se forman sustancias más complejas llamadas moléculas. Por ejemplo, para formar agua es necesario unir átomos que provienen del hidrógeno y del oxígeno gaseosos. Cada uno de estos gases está formado por átomos y, si los mezclamos de alguna manera, se produce una sustancia, como el agua, que comprende la unión de dos átomos de hidrógeno con un átomo de oxígeno. De ahí la fórmula H_2O de la molécula del agua.

Ahora sabemos que los átomos se unen para formar moléculas y, además, si unimos moléculas, esto da lugar a todas las sustancias que hay (y las nuevas por descubrir), como el vidrio, las pinturas, el plástico, los combustibles, la ropa, etcétera.

Ahora que ya sabemos de qué están hechas las cosas o sustancias que hay en el universo y la naturaleza, hay que entender cómo se unen esos átomos y moléculas. Dicho en otras palabras, cómo fabricamos nuevas sustancias o cómo transformamos las ya existentes. Para ello, debemos entender que las fuerzas que unen a los átomos y las moléculas son los enlaces químicos (Huheey *et al.*, 1997). Justo en este punto es conveniente definir la química.

Dejando de lado la definición del diccionario, podemos definir la química como la ciencia que se encarga de estudiar la transformación de las sustancias

a través de la ruptura de enlaces para formar nuevos enlaces químicos, lo cual forma sustancias nuevas. A ese proceso de romper y formar nuevos enlaces químicos le llamaremos reactividad (Huheey *et al.*, 1997).

Definiendo el petróleo

El otro concepto relevante para esta obra es el petróleo. Su importancia es tal que, sin la industria petrolera, la economía nacional y de muchos países que basan su economía en el petróleo colapsaría. Y es que su importancia radica en que produce combustibles, y materiales que son la materia prima de muchas industrias, como la farmacéutica, alimentos, plástico, fertilizantes, juguetes, pegamentos, pinturas y otras industrias que dependen del petróleo. Debido a esto, es complicado abandonar su uso (Martínez Palou y Cerón Camacho, 2023).

Ahora que ya sabemos que el petróleo es la fuente principal de muchas industrias (sobre todo la energética), es momento de contestar la pregunta ¿Qué es el petróleo? De forma sucinta, podemos decir que el petróleo es una mezcla compleja de muchas sustancias que tienen átomos de hidrógeno y carbono (de ahí viene el término hidrocarburos). Además, llega a tener otras sustancias ricas en metales pesados, azufre, oxígeno y nitrógeno, a los cuales se les denomina contaminantes.

Existen muchas teorías acerca de cómo se formó el petróleo en las profundidades de la tierra; sin embargo, una de las más aceptadas es aquella que menciona que toda la materia orgánica (plantas y animales incluidos) que existió hace miles de millones de años quedó sepultada de alguna forma en los sedimentos de suelo. Con el paso de los años, estos sedimentos se convirtieron en rocas; algunas de estas rocas tienen la característica de ser porosas y ahí se almacenó la materia orgánica. Adicionalmente, se formaron otro tipo de rocas sin poros que funcionaron como un sello de la roca porosa. Esto permitió que la materia orgánica quedara “encerrada” o “atrapada” en una especie de contenedor de rocas porosas y una pared impermeable (Biblioteca Visual del Petróleo, 2015).

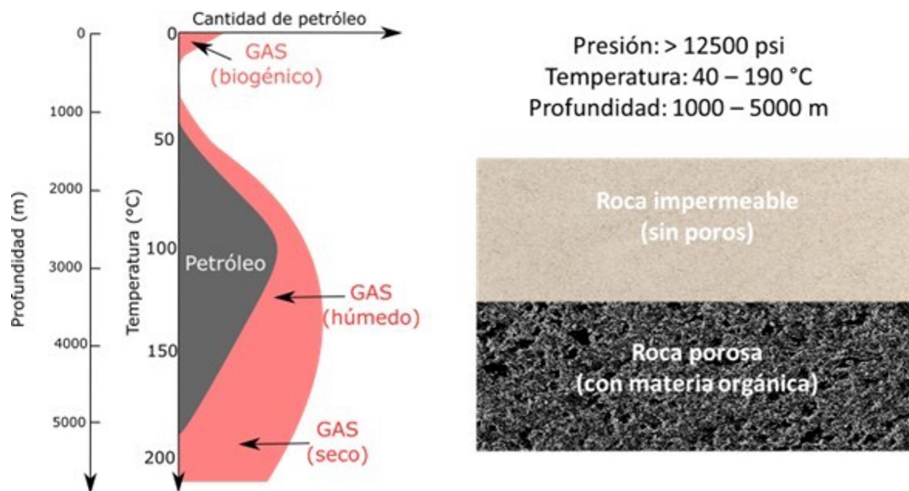
A este sistema rocoso formado por roca porosa con materia orgánica y rodeado de roca impermeable (sin poros) se le conoce como sistema petrolero. Cuando el sistema petrolero es expuesto a condiciones extremas,

características del manto terrestre, en el tiempo preciso o sincrónico, ocurre un proceso de descomposición que es catalizada por las mismas rocas. Dicho proceso ocurre a presiones mayores a 12 500 psi, temperaturas que oscilan entre 40–190 °C y profundidades que van desde los 100–1 500 metros. Si todos estos factores se sincronizan en tiempo y espacio, ocurrirá la formación de petróleo (Miller, 2006). Si alguno de estos elementos falta, no se produce petróleo. Y ésta es la explicación de porqué no hay petróleo en cualquier parte del mundo.

Hasta este punto hemos visto que el petróleo es un proceso de descomposición y justo en esta parte es donde interviene la química. Todas las sustancias orgánicas (o materia orgánica) de origen animal o vegetal están formadas por carbono (C), hidrógeno (H), oxígeno (O), nitrógeno (N), azufre (S) y fósforo (P), las cuales se conocen como CHONSP; además de otras sustancias inorgánicas como el calcio (Ca), magnesio (Mg), hierro (Fe) y sodio (Na) (Balasubramanian, 2016).

La materia orgánica, compuesta principalmente por grandes cantidades de carbono e hidrógeno, forma estructuras como las células, los aminoácidos y las proteínas en los seres vivos, así como otras sustancias como la celulosa y el almidón presentes en la vegetación. Esta materia es posteriormente descompuesta. Es decir, se rompen los enlaces químicos que unen esas sustancias originales y luego los fragmentos de dichas sustancias se agrupan entre sí, formando nuevos enlaces químicos que originan las nuevas sustancias, diferentes a las originales. Es decir, hubo una transformación de las sustancias originales en unas nuevas sustancias, y esto es lo que se conoce como una reacción química. Como en toda reacción química, se ponen en contacto dos sustancias iniciales (también conocidas como reactivos), con características bien definidas, y luego de someterlas a ciertas condiciones de temperatura, presión, tiempo, agitación, etc., se transforman en sustancias nuevas, las cuales se denominan productos. Entonces, la descomposición de dicha materia orgánica en las rocas es una serie de reacciones químicas que dan lugar a la formación del petróleo y el gas (figura 1.1).

Figura 1.1. Gráfico de la formación de hidrocarburos, gas o petróleo en función de la temperatura y la profundidad (izquierda). Visualización de rocas porosas y sin poros (derecha)



Fuente: elaboración propia.

Familias de compuestos químicos en el petróleo

Como acabamos de ver, la reacción de descomposición de la materia orgánica en rocas porosas rodeadas de una roca impermeable a ciertas condiciones de temperatura y presión dan lugar a la formación, no sólo del petróleo, sino también a la formación de gas. El gas es la parte más ligera del petróleo y existen dos tipos: el gas natural, formado principalmente por metano (CH_4) y el gas LP (licuado de petróleo), formado por una mezcla de metano (CH_4), etano (CH_3CH_3), propano ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3$) y butano ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$). Estos gases son los hidrocarburos más elementales y, al ser gases, se les conoce como volátiles (Miller, 2006).

Es importante mencionar que las sustancias que componen el petróleo tienen como base principal el carbono y el hidrógeno, junto con algunos átomos (en menor cantidad) de otros elementos considerados contaminantes (O, S, N y metales). Sin embargo, es muy importante recalcar los siguientes factores que afectan la composición del petróleo (Speight, 2017):

El petróleo nunca tiene la misma composición.

El petróleo puede ser de colores.

El petróleo puede presentar propiedades diferentes.

Esto depende del tipo de roca y la materia orgánica sepultada en el subsuelo, lo cual cambia drásticamente de una región a otra. Así, su composición siempre es distinta, provocando que tenga propiedades diferentes como la densidad e incluso el color, ya que puede variar de colores desde el rojo, amarillo, café, ámbar, grisáceo y el típico negro (figura 1.2). Estas diferencias hacen que su explotación, transporte, almacenamiento, refinación e incluso su precio sea diferente y variable de una región a otra (Martínez Palou y Cerón Camacho, 2023).

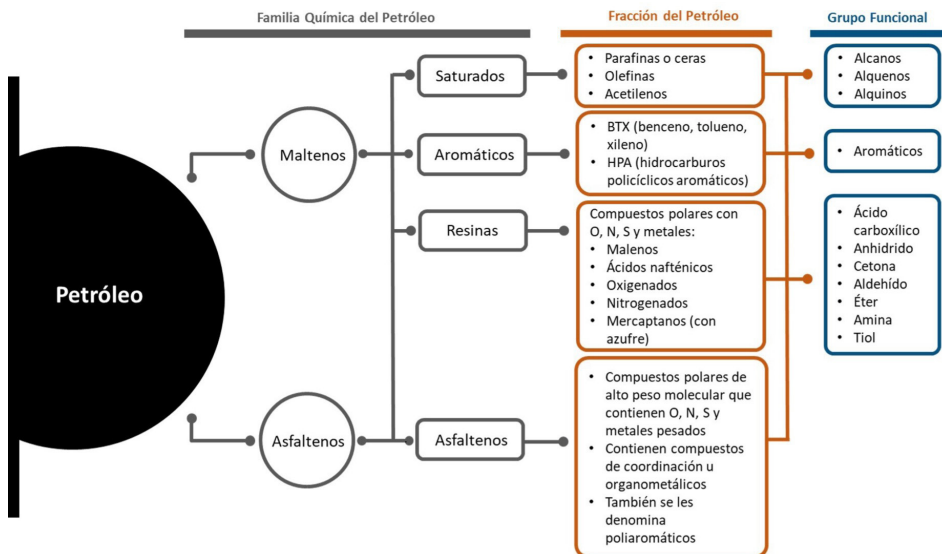
Figura 1.2. Muestras de petróleo de diversos orígenes. Note que a veces hay petróleo rojizo, café, amarillo y el típico negro. Esto depende de la composición química



Fuente: fotografía propia.

Por estas razones, y para tener una mejor perspectiva y conocimiento acerca del tema, la química del petróleo y su composición se suele estudiar en diferentes familias de sustancias o productos químicos. De manera general, podemos clasificar las familias químicas del petróleo y hacer una correlación con los grupos funcionales que conocemos en química orgánica (figura 1.3).

Figura 1.3. Familias químicas, fracciones y grupos funcionales dentro del petróleo



Fuente: elaboración propia.

Alcanos o parafinas (ceras)

Los alcanos son compuestos químicos basados únicamente en cadenas de grupos hidrocarbonados, es decir, sólo contienen enlaces carbono-carbono (C-C) simples y de carácter covalente, además de enlaces carbono-hidrógeno (C-H). Se les denomina saturados porque cada átomo de carbono se enlaza a cuatro otros átomos, ya sean de carbono o de hidrógeno, formando una geometría tetraédrica alrededor de cada carbono (también conocida como hibridación sp^3). Esta disposición geométrica confiere a la molécula una forma tridimensional con ángulos de enlace de aproximadamente 109° . La fórmula general para alcanos de cadena larga (o lineales) es C_nH_{2n+2} , donde n es el número de átomos de carbono (McMurry, 2012).

En la industria petrolera los alcanos también son conocidos como parafinas o ceras. Se les denomina así por su poca afinidad con otros químicos, es decir, por su poca reactividad, de ahí el término “parafina”, que proviene del latín *parum affinis*, “poca afinidad”. Por otra parte, también se

les llama “ceras” debido a sus propiedades físicas que se asemejan mucho a las ceras naturales, las cuales también son hidrocarburos de cadena larga (Miller, 2006).

Desde el punto de vista químico, los alcanos pueden clasificarse en tres tipos principales, según la disposición de sus átomos de carbono:

- Alcanos lineales (n-alcanos): los átomos de carbono están conectados en una secuencia continua de enlaces C–C sin ramificaciones. Ejemplos: metano (CH_4), etano (C_2H_6), propano (C_3H_8), butano (C_4H_{10}).
- Alcanos ramificados: la cadena principal de carbono tiene una o más cadenas laterales de carbono (grupos alquilo) unidas a ella. Ejemplos: isobutano (2-metilpropano), isopentano (2-metilbutano). Las ramificaciones aumentan la complejidad y el número de isómeros posibles.
- Cicloalcanos: los enlaces C–C forman uno o más ciclos, de los cuales, los más comunes y estables son los anillos de cinco y seis miembros. Si bien no son los únicos ciclos que se forman, también pueden existir anillos de tres o cuatro miembros (que son inestables o muy reactivos) y también pueden existir otros ciclos de siete, ocho o más (aunque son menos frecuentes). A menudo estos se estudian junto con los alcanos debido a sus propiedades químicas similares, pues comparten la característica de ser saturados. Ejemplos: ciclopropano, ciclohexano.

Alquenos u olefinas

Los alquenos son hidrocarburos semejantes a los alcanos, con la diferencia de que poseen al menos un enlace doble carbono-carbono ($\text{C}=\text{C}$). Esta característica estructural no sólo les confiere una reactividad notablemente mayor, sino que también es la razón fundamental por la que la industria petrolera les ha asignado su propia denominación: olefinas.

Químicamente, los alquenos son hidrocarburos insaturados con la fórmula general C_nH_{2n} para los alquenos de cadena abierta con un sólo doble enlace. La presencia del doble enlace implica que cada carbono involucrado tiene una hibridación sp^2 , resultando en una geometría plana trigonal con ángulos de enlace cercanos a los 120° (Wade y Simek, 2017). Este enlace doble contiene menos hidrógenos respecto un alcano, y por eso se les llama

insaturaciones. Además, el enlace $C=C$ es el responsable de la mayor reactividad de los alquenos en comparación con los alcanos. El enlace $C=C$ es una región de alta densidad electrónica, lo que lo convierte en un sitio ideal para el ataque de sustancias electrófilas (deficientes de densidad electrónica), dando lugar a reacciones de adición características (Wade, s. f.).

En el contexto de la industria petrolera, el término olefinas es la denominación común para referirse a los alquenos. Este nombre tiene raíces históricas. Deriva del latín *oleum*, que significa aceite y *faciens*, que significa hacer, por lo que el término hace referencia a la capacidad de los alquenos de reaccionar con halógenos (Cl_2 , Br_2 , I_2) para formar compuestos aceitosos. Si bien los alcanos son los componentes mayoritarios del petróleo crudo directamente extraído, los alquenos suelen encontrarse en cantidades poco significativas en el crudo virgen. Su presencia, más bien, es el resultado directo de procesos de refinación como el craqueo (cracking) térmico y catalítico (Miller, 2006).

Alquinos o acetilenos

Los alquinos son hidrocarburos que se distinguen por la presencia de al menos un enlace triple de carbono-carbono, $C\equiv C$. Esta característica estructural no sólo les confiere una reactividad excepcional, sino que también es la razón por la que en la industria petrolera y química se les conoce comúnmente como acetilenos, tomando el nombre del miembro más simple y representativo de esta clase: el etino, o como es más conocido, el acetileno, cuya fórmula es $HC\equiv CH$ (Wade y Simek, 2017).

Químicamente, los alquinos son hidrocarburos insaturados cuya fórmula general es C_nH_{2n-2} para aquellos con un sólo triple enlace de cadena abierta. Los átomos de carbono que forman el triple enlace tienen una hibridación sp , lo que resulta en una geometría lineal con un ángulo de enlace de alrededor de 180° . Este enlace triple hace que los alquinos sean muy reactivos y sean particularmente susceptibles a reacciones de adición con electrófilos (McMurry, 2012).

En la industria petrolera y petroquímica, el término acetilenos se utiliza para referirse a los alquinos en general, siendo el acetileno (etino) el alquino de mayor relevancia industrial. A diferencia de los alcanos y los alquenos, los

alquinos no se encuentran en cantidades significativas en el petróleo crudo extraído directamente. Su presencia en la industria es principalmente el resultado de procesos de síntesis química a partir de otras fuentes de hidrocarburos, o como subproductos específicos de ciertos procesos de craqueo a muy alta temperatura, como el craqueo con vapor, donde se busca maximizar la producción de etileno y propileno (Speight, 2020).

Particularmente el acetileno se produce mediante el craqueo térmico de hidrocarburos como el metano (gas natural) a temperaturas extremadamente altas (más de 1 200 °C), o a partir de carburo de calcio y agua. Es un gas incoloro, altamente inflamable, y conocido por sus aplicaciones en la soldadura y el corte de metales (oxiacetilénica) debido a la altísima temperatura de su llama.

Más allá de su uso como combustible en soldadura, el acetileno es una materia prima petroquímica crucial. Históricamente, fue la base para la síntesis de una amplia gama de productos orgánicos, incluyendo el cloruro de vinilo (precursor del policloruro de vinilo, PVC), el acetaldehído, el ácido acético y diversas macromoléculas. Aunque en la actualidad muchas de estas rutas de síntesis han sido superadas por procesos más económicos basados en etileno y propileno, el acetileno sigue siendo vital para la fabricación de otros productos químicos (Speight, 2020).

Aromáticos

El término “aromático” proviene de la fragancia característica que presentaban los primeros compuestos de este tipo que fueron descubiertos. Los hidrocarburos aromáticos son una clase de hidrocarburos que tiene semejanzas con los alcanos cíclicos y los alquenos. Es decir, cuando se tiene un alqueno conjugado (enlace doble $C=C$ con un enlace sencillo $C-C$) y este se cicla, se da una estructura ciclada conjugada, el ejemplo típico es el benceno (McMurry, 2012). Su verdadera importancia radica en una estructura molecular única que les confiere una estabilidad excepcional y propiedades químicas distintivas, haciéndolos componentes valiosos en la composición del petróleo crudo y como precursores de una vasta gama de productos industriales, particularmente como disolventes.

La característica definitoria de un compuesto aromático es la presencia de uno o más anillos de benceno o estructuras similares que exhiben aromaticidad. El benceno (C_6H_6) es el miembro más simple y emblemático. Su estructura es un anillo hexagonal plano de seis átomos de carbono, donde cada carbono está unido a un átomo de hidrógeno y comparte electrones de forma deslocalizada alrededor del anillo. Esta deslocalización, explicada por la regla de Hückel (un anillo plano y cíclico con $4n+2$ electrones π), confiere al benceno y a sus derivados una estabilidad termodinámica mucho mayor de lo que cabría esperar de un compuesto con dobles enlaces conjugados. A diferencia de los alquenos, los aromáticos no suelen someterse a reacciones de adición fácilmente; en su lugar, prefieren reacciones de sustitución electrófila aromática, donde se mantiene la integridad del anillo y, por ende, su aromaticidad (Wade y Simek, 2017).

En la industria petrolera, los hidrocarburos aromáticos son componentes naturales del petróleo crudo, aunque su proporción varía significativamente según el origen del yacimiento. Los crudos más pesados y de menor calidad suelen tener una mayor proporción de aromáticos complejos y poliaromáticos, mientras que los crudos ligeros son más ricos en alcanos y naftenos. La presencia de aromáticos en el crudo influye en sus propiedades físicas, como la densidad y la viscosidad, y puede presentar desafíos en el procesamiento debido a su tendencia a formar coque a altas temperaturas (Speight, 2017). Sin embargo, el verdadero valor de los aromáticos para la industria petrolera reside en su producción controlada y su subsecuente transformación. Los procesos de reformado catalítico son la piedra angular de la producción de aromáticos en la refinería. Aquí, las naftas (una fracción de petróleo que contiene alcanos y naftenos de 6 a 12 carbonos) se someten a altas temperaturas y presiones en presencia de catalizadores metálicos (a menudo platino y renio). Bajo estas condiciones, los alcanos se ciclizan y deshidrogenan, y los naftenos se deshidrogenan directamente para formar benceno, tolueno y xilenos (a la mezcla de los tres disolventes se le conoce como BTX). Estos tres compuestos, conocidos colectivamente como el “tren de aromáticos”, son de inmenso valor (Hein, 1999).

El BTX se extrae de la corriente de reformado y se purifica para su uso como materia prima petroquímica. El benceno es esencial para la producción de estireno (poliestireno), fenol (resinas), ciclohexano (nailon) y

anilina. Además de su rol como materias primas, los aromáticos también son componentes clave en la formulación de gasolinas de alto octanaje. Su estructura anular le confiere una excelente resistencia a la autoignición (golpeteo del motor), lo que mejora la eficiencia y el rendimiento de los motores de combustión interna. Por lo tanto, los procesos de reformado no sólo producen valiosas materias primas petroquímicas, sino que también contribuyen directamente a la calidad del combustible (Miller, 2006).

Ácidos nafténicos

En la industria petrolera, no todos los componentes del crudo son hidrocarburos deseables. Los ácidos nafténicos son un grupo de compuestos orgánicos ácidos que, aunque minoritarios, poseen una gran importancia, ya que a menudo representan un problema. Pertenecen a la categoría de los ácidos orgánicos y se caracterizan por poseer una o más estructuras cíclicas (nafténicas) saturadas unidas a una cadena lateral que contiene un grupo carboxilo ($-\text{COOH}$). Su fórmula general suele ser RCOOH , donde R representa un grupo cicloparafínico o alquil-cicloparafínico (Speight, 2020).

La presencia de ácidos nafténicos en el petróleo crudo es variable, pero se estima que está presente en casi todos los crudos, con concentraciones que van desde niveles traza hasta el 4-8% en peso en algunos pesados (Speight, 2020). El principal desafío asociado a los ácidos nafténicos en la industria petrolera es su corrosividad. A temperaturas elevadas (generalmente por encima de los $200\text{ }^{\circ}\text{C}$), que son comunes en las unidades de destilación atmosférica y al vacío, los ácidos nafténicos se vuelven altamente corrosivos para los equipos metálicos, especialmente aquellos fabricados con acero al carbono y aceros de baja aleación. Estos reaccionan con el metal para formar sales metálicas solubles en aceite, dañando tuberías, intercambiadores de calor, columnas de destilación y hornos. Ésta corrosión nafténica (NAC, por sus siglas en inglés) es un problema costoso que requiere materiales de construcción más resistentes (como aceros inoxidable de alta aleación), la inyección de inhibidores de corrosión o el uso de aditivos neutralizantes (Speight, 2014).

Además de la corrosión, los ácidos nafténicos pueden causar otros problemas operativos. Contribuyen a la formación de emulsiones estables

de agua en aceite, dificultando la separación del agua de producción y afectando la calidad del crudo. También pueden aumentar la tendencia a la formación de espumas en las unidades de refinación y contribuir al envenenamiento de catalizadores en procesos posteriores como la hidrodesulfuración (Miller, 2006).

Los ácidos nafténicos representan un desafío costoso en términos de corrosión y operaciones de refinación. Su singularidad química también los convierte en precursores de productos especializados, transformando un problema en una fuente de valor añadido. La investigación continua se centra en la mitigación efectiva de la corrosión y en el desarrollo de métodos más eficientes para su extracción y valorización, buscando maximizar el provecho de cada gota de petróleo.

Tioles o mercaptanos

Los tioles, también conocidos como mercaptanos, son compuestos orgánicos que contienen un grupo funcional sulfhidrilo ($-SH$), es decir, un átomo de azufre unido a uno de hidrógeno. Son análogos sulfurados de los alcoholes. En el petróleo, se encuentran de forma natural, formándose durante la descomposición y reducción de materia orgánica en ambientes marinos, que es un proceso clave en la generación del crudo (Miller, 2006).

La presencia de mercaptanos en el petróleo crudo y sus derivados es un tema de gran relevancia en la industria, principalmente por sus características distintivas y los desafíos que representan. Una de sus propiedades más notorias es su olor penetrante y desagradable, incluso en concentraciones muy bajas, similar al huevo podrido. Esta particularidad, aunque molesta, es aprovechada industrialmente para dar olor al gas doméstico y poder detectar fugas.

En la refinación del petróleo, los mercaptanos son considerados impurezas indeseables. Su presencia puede causar corrosión en los equipos de procesamiento y deteriorar la calidad de los productos finales, afectando el octanaje de las gasolinas o las especificaciones de otros combustibles. Por esta razón, existen los procesos de hidrodesulfuración (HDS).

Además, los tioles se emplean en la síntesis química para la producción de plásticos, pesticidas, aditivos en combustibles de aviación, lubricantes, productos farmacéuticos, colorantes y detergentes. También se utilizan como modificadores de polimerización y en la extracción de metales. Su versatilidad y reactividad, a pesar de su reputación por el olor, los hacen valiosos en diversas ramas de la industria química (Speight, 2017).

Nitrogenados y oxigenados

El petróleo también contiene una fracción significativa de compuestos que incluyen heteroátomos, como nitrógeno y oxígeno. Estos derivados, aunque en menor proporción, son cruciales por su impacto en el procesamiento del petróleo y la calidad de los productos finales.

Los derivados nitrogenados en el petróleo suelen representar entre 0.1% y 2% en peso. Se presentan en diversas formas, incluyendo compuestos heterocíclicos como pirrol, piridina, quinolina, indol y carbazol, que son los más abundantes y estables. También pueden encontrarse, en menor medida, compuestos no heterocíclicos como aminas alifáticas y nitrilos. La presencia de nitrógeno es problemática en la refinación, ya que muchos de estos compuestos son venenos catalíticos, es decir, desactivan los catalizadores utilizados en procesos clave, como el craqueo catalítico. Por lo tanto, aquí cobra relevancia el proceso para remover el nitrógeno en la parte de refinación: la hidrogenación (Miller, 2006).

Por su parte, los derivados oxigenados en el petróleo crudo suelen estar presentes en proporciones que varían del 0.1% al 1.5% en peso. Estos compuestos incluyen una amplia gama de estructuras químicas. Los más comunes son los ácidos carboxílicos, especialmente los ácidos nafténicos (ácidos orgánicos de cadena cíclica), que pueden causar una severa corrosión en equipos de refinación a altas temperaturas. Otros compuestos oxigenados importantes son los fenoles, éteres, alcoholes, aldehídos y cetonas. Aunque en menor medida, la presencia de oxígeno puede influir en la estabilidad oxidativa del combustible, contribuyendo a la formación de gomas y sedimentos. En algunos casos, se añaden intencionalmente compuestos oxigenados como éteres (por ejemplo, MTBE) o alcoholes (etanol) a las gasolinas para

mejorar el octanaje y reducir las emisiones contaminantes, actuando como “oxigenantes” (Speight, 2020).

La eliminación de estos derivados oxigenados es un desafío importante en la industria petrolera. De aquí que también exista el proceso de hidrogenación (HDO), que es esencial para reducir su contenido y garantizar la calidad y el rendimiento de los productos refinados, minimizando, al mismo tiempo, los problemas de corrosión y el envenenamiento de catalizadores.

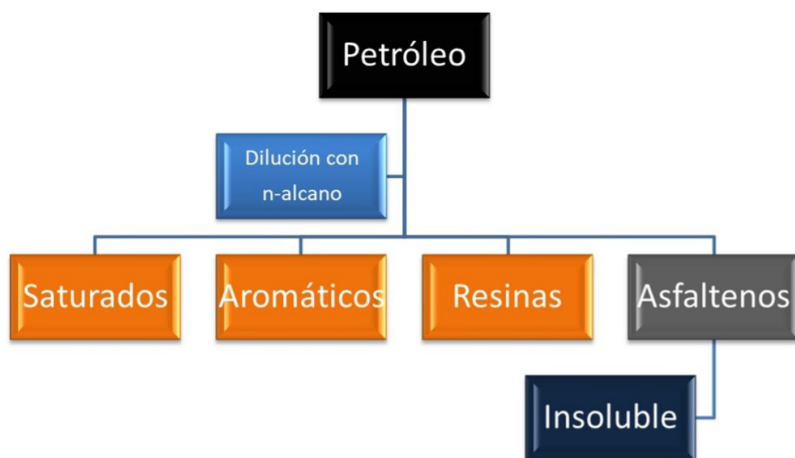
SARA

El acrónimo SARA es un descriptivo de la composición del petróleo y se refiere a los saturados, aromáticos, resinas y asfaltenos. Es un análisis empleado en la industria petrolera para caracterizar la composición de los crudos y predecir su comportamiento durante la producción, transporte y refinación (Biblioteca Visual del Petróleo, 2015; Martínez Palou y Cerón Camacho, 2023; Miller, 2006).

- 1) Saturados (S): son hidrocarburos tipo alcanos (cadenas abiertas o cíclicas) que no contienen dobles ni triples enlaces carbono-carbono. Son los componentes menos polares y más ligeros, con baja densidad y viscosidad. Su predominio en un crudo indica una buena calidad y viscosidad baja.
- 2) Aromáticos (A): compuestos que contienen anillos bencénicos. Son más polares que los saturados, aunque contribuyen al poder calorífico. Aquí entran los aromáticos que revisamos anteriormente.
- 3) Resinas (R): son moléculas más grandes, polares y, a veces, de carácter polimérico, con heteroátomos (nitrógeno, oxígeno, azufre) y metales. Actúan como dispersantes para los asfaltenos, manteniéndolos en solución. Su presencia es crucial para la estabilidad de los crudos pesados.
- 4) Asfaltenos (A): son la fracción más pesada y polar del petróleo. Son macromoléculas complejas que contienen altos porcentajes de heteroátomos y metales. Una de sus características es que son poliaromáticos (varios anillos de benceno fusionados). Son insolubles en n-heptano o fracciones ligeras, lo que provoca que precipiten. Esto es un problema grave en la industria, ya que causa taponamientos en tuberías y equipos, lo que afecta la producción y el refinado. Además, provee viscosidades altas.

El análisis SARA permite predecir la calidad del crudo, ya que un mayor contenido de asfaltenos representa un crudo viscoso y con muchos contaminantes. A un crudo con alto contenido de saturados se le denomina ligero y es de carácter parafínico. O bien, si tiene un alto contenido de resinas, se le denomina crudo resinoso (figura 1.4).

Figura 1.4. Representación de la composición SARA del petróleo



Fuente: elaboración propia.

Maltenos, resinas y asfaltenos: la complejidad del petróleo

Más allá de que los hidrocarburos ligeros son la base de muchos combustibles, el petróleo crudo contiene una fracción compleja y pesada que son las resinas y asfaltenos. Por otra parte, en el SARA, hay una subclasificación que son los maltenos. Es decir, los maltenos son la fracción soluble cuando se le agrega n-alcano al crudo y en esta categoría están los saturados, los aromáticos y las resinas. Por otra parte, la fracción insoluble son los asfaltenos; sin embargo, las resinas y los asfaltenos representan la parte más densa y compleja del crudo, con unas estructuras químicas complejas. Dichas estructuras impactan directamente en las propiedades físicas del petróleo y su posterior procesamiento en la refinería (Martínez Palou y Cerón Camacho, 2023).

Los maltenos es un término colectivo que se refiere a la fracción del petróleo crudo que es soluble en n-alcenos. Esencialmente, cuando se precipitan los asfaltenos de un crudo, al material restante se le denomina maltenos. Esta fracción es una mezcla compleja de saturados (alcenos y cicloalcenos) y aromáticos de menor peso molecular, junto con las resinas. Los maltenos son los principales contribuyentes a la fluidez y la baja viscosidad del crudo (Miller, 2006).

Las resinas, por otro lado, son compuestos polares, pero menos condensados que los asfaltenos, y son solubles en n-alcenos. Se consideran como surfactantes naturales del petróleo, actuando como estabilizadores de los asfaltenos en el crudo, impidiendo su floculación y precipitación. Estructuralmente, las resinas son moléculas más pequeñas y menos aromáticas que los asfaltenos, con una mayor proporción de grupos funcionales polares (oxígeno, nitrógeno, azufre) y cadenas alifáticas más largas, a veces de carácter polimérico de bajo peso molecular. Su papel es crucial en la reología del crudo, pues influyen en la viscosidad y la fluidez.

Los asfaltenos son la fracción más pesada y polar del petróleo crudo; son insolubles en n-alcenos ligeros (como n-pentano o n-heptano), pero solubles en tolueno o benceno. Químicamente, no son una clase de compuestos con una fórmula molecular compleja, son una mezcla heterogénea de macromoléculas policíclicas condensadas. De forma general, se les describe como “asfaltenos de tipo islas” de anillos aromáticos y nafténicos altamente fusionados que contienen heteroátomos como azufre, nitrógeno, oxígeno, y metales (vanadio, níquel) intercalados. Si estas islas están conectadas por cadenas alifáticas, se les denomina “asfaltenos tipo archipiélago”. Además, forman agregados supramoleculares a través de interacciones π - π , puentes de hidrógeno y fuerzas de van der Waals. Los asfaltenos son responsables de la alta viscosidad del crudo pesado y pueden causar graves problemas de deposición en tuberías y equipos de procesamiento, lo que conlleva pérdidas de producción y bloqueos (Ramírez-Pérez *et al.*, 2016).

La importancia de estos componentes en la industria petrolera es múltiple. Primero, influyen directamente en la calidad y el valor del crudo. Un alto contenido de asfaltenos y resinas suele indicar un crudo más pesado y de menor valor comercial, que requerirá procesos de refinación más intensivos

y costosos para convertirlo en productos ligeros. Segundo, afectan drásticamente la operatividad. Los asfaltenos son notoriamente problemáticos, causando incrustaciones y bloqueos en pozos, tuberías y equipos de superficie y refinería. Comprender su comportamiento de fase es crucial para evitar costosas interrupciones.

Gravedad API y viscosidad

La gravedad API (American Petroleum Institute) y la viscosidad son dos propiedades críticas en la industria petrolera. Éstas determinan, en gran medida, el valor comercial, la facilidad de transporte, almacenamiento y refinación del crudo (Biblioteca Visual del Petróleo, 2015; Miller, 2006). La gravedad API es una medida de la densidad relativa del petróleo crudo o de un producto derivado con respecto al agua a una temperatura estándar (generalmente 60 °F o 15.6 °C). Se expresa como gravedad API y es adimensional. Un valor de 10 API equivale a la densidad del agua. Cuanto mayor es la gravedad API del petróleo, es más ligero y menos denso. Los crudos con alta gravedad API (superiores a 31.1°API) son considerados “ligeros”, mientras que aquellos con valores menores a 22.3°API son “pesados” o “extrapesados” (ver tabla 1.1).

Tabla 1.1. Relación entre la gravedad específica, gravedadt y el tipo de crudo

Crudo	Gravedad específica	Gravedad API
Súper ligero	0.800	45.4
	0.825	40.0
	0.850	35.0
	0.87	31.1
Ligero	0.875	30.2
	0.900	25.7
	0.920	22.3
	0.925	21.5
Pesado	0.950	17.4
	0.975	13.6
	1.000	10
	1.025	6.6
Extra pesado	1.050	3.3

Fuente: elaboración propia.

Los crudos ligeros son más valiosos porque producen un mayor número de productos de alto valor, como gasolina y diésel, y requieren menos energía para su refinación.

Por otra parte, la viscosidad es la resistencia de un fluido a fluir. En el petróleo, esta propiedad es crucial para su bombeo, transporte y procesamiento. Un crudo de alta viscosidad, o “más espeso”, es más difícil de mover a través de tuberías y requiere más energía. Esto a menudo se resuelve con calentamiento para reducir su resistencia. La viscosidad del petróleo depende fuertemente de la temperatura, la presión y la composición del crudo (su gravedad API). Ambas propiedades son fundamentales para la evaluación de yacimientos, el diseño de sistemas de producción y el monitoreo de la calidad del producto final (Ramírez-Pérez *et al.*, 2016).

El agua y las salmueras en la industria del petróleo

El agua desempeña un papel relevante en la industria petrolera, presentándose en diversas formas y con implicaciones que van desde la facilitación de operaciones hasta la generación de complejos desafíos operativos, ambientales y económicos (Sheng, 2015). Su presencia es inherente a casi todas las etapas, desde la exploración hasta la refinación, y comprender sus tipos y características es crucial para la eficiencia y la sostenibilidad del sector (Miller, 2006).

El tipo más abundante y significativo es el agua de formación, también conocida como agua connata o de yacimiento. Esta agua se encuentra naturalmente atrapada dentro de los poros y espacios de las rocas subterráneas que contienen petróleo y gas (The SLB | Energy Glossary, s. f.). Es un residuo de la deposición sedimentaria original o de la intrusión marina antigua y, por lo tanto, su composición es extremadamente variada. Típicamente, el agua de formación tiene altas concentraciones de cloruros de sodio, calcio y magnesio, y puede contener otros iones, como sulfatos, carbonatos, bario y estroncio, además de gases disueltos como H_2S y CO_2 , y, en ocasiones, trazas de metales pesados y elementos radiactivos. Su manejo es crítico, ya que su producción, junto con el petróleo y el gas, puede ser voluminosa, superando a menudo el volumen de hidrocarburos

extraídos, lo que requiere procesos costosos de separación, tratamiento y disposición (Cisneros-Dévora *et al.*, 2019; Sheng, 2015).

Como hemos visto, la extracción de hidrocarburos no es un proceso aislado. En la mayoría de los yacimientos, el petróleo y el gas están intrínsecamente asociados con agua y sales. Esta agua es el fluido original que ocupaba los poros de la roca antes de la migración y la acumulación de los hidrocarburos.

Las propiedades químicas del agua de formación son altamente variables y dependen de múltiples factores, incluyendo la geología del yacimiento, la interacción con la roca, la temperatura, la presión y la historia de migración de fluidos. A diferencia del agua dulce o de mar, el agua de formación es típicamente una salmuera. Su pH puede variar ampliamente, desde ser ligeramente ácido hasta alcalino, influenciado también por la presencia de ácidos orgánicos como los ácidos nafténicos. La densidad y la viscosidad del agua de formación también son mayores que las del agua dulce debido a su alta salinidad, lo que afecta su movilidad dentro del yacimiento y su separación de los hidrocarburos.

El perfil de sales disueltas es una característica distintiva del agua de formación. Los iones predominantes pueden llegar a tener salinidades del orden de 400 000 ppm, como NaCl, y durezas del orden de 180 000 ppm, como CaCO_3 . Las sales pueden precipitar y formar incrustaciones inorgánicas en los poros de la roca, en las tuberías y equipos de superficie que son notoriamente difíciles de remover y causan pérdidas de producción y daños a la infraestructura (Parra *et al.*, 2023).

El agua de formación es un desafío operativo y económico significativo. A medida que un yacimiento madura, la producción de agua tiende a aumentar, superando a menudo la de hidrocarburos. Incluso representa nuevos retos como la formación de emulsiones, lo cual ocasiona otros problemas operativos, como la separación del agua de los hidrocarburos en superficie, que requiere más equipos y mayor energía.

Conclusión

Como se puede apreciar, para hablar de química y petróleo, no sólo basta con saber de química orgánica y grupos funcionales. También es necesario

conocer un poco de química inorgánica, por la parte de las sales, compuestos de coordinación y metales involucrados. Aun así, conceptos como el SARA, la gravedad API, y las familias químicas del petróleo pueden aportar un panorama general y aproximado de las características fisicoquímicas de ese material. Sin embargo, existen otros conceptos como la química de superficies, la fisicoquímica de superficies, la catálisis y productos químicos, que serán abordados a lo largo de este libro.

Referencias

- ASALE, R., y RAE. (s. f.). Químico, química | Diccionario de la lengua española. «Diccionario de la lengua española» - Edición del Tricentenario. Recuperado 20 de enero de 2025, de <https://dle.rae.es/químico>
- Balasubramanian, A. (2016). Chemical Elements in Life—Part 1. Biblioteca Visual del Petróleo (Segunda). (2015). Instituto Mexicano del Petróleo.
- Cisneros-Dévora, R., Cerón-Camacho, R., Soto-Castruita, E., Pérez-Alvarez, M., Ramírez-Pérez, J. F., Oviedo-Roa, R., Servín-Nájera, A. G., Buenrostro-Gonzalez, E., Martínez-Magadán, J. M., y Zamudio-Rivera, L. S. (2019). A theoretical study of crude oil emulsions stability due to supramolecular assemblies. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 567, 121-127. <https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2019.01.045>
- Hein, M. (1999). Fundamentos de Química. EUNED.
- Huheey, J. E., Keiter, E. A., y Keiter, R. L. (1997). Química inorgánica: Principios de estructura y reactividad. Alfaomega.
- Martínez Palou, R., y Cerón Camacho, R. (2023). Entendiendo la Industria Petrolera (1.a ed.). Amazon.
- McMurry, J. (2012). Química Orgánica (8a. edición). Cengage Learning Editores.
- Miller, J. (2006). The Chemistry and Technology of Petroleum. Taylor & Francis Group.
- Parra, J. E., Rosales-Arias, F., Jiménez De La Cruz, G., Ramírez-Pérez, J. F., Pérez-Alvarez, M., Oviedo-Roa, R., Martínez-Magadán, J. M., Cerón-Camacho, R., Soto-Castruita, E., Servín-Nájera, A. G., Cisneros Dévora, R., y Zamudio-Rivera, L. S. (2023). Development and Application of New Multifunctional Foaming Agents to Enhance Production in Oil Wells. *SPE Journal*, 28(06), 3358-3376. <https://doi.org/10.2118/201603-PA>
- Ramírez-Pérez, J., Cisneros-Dévora, R., Cerón Camacho, R., y Zamudio-Rivera, L. S. (2016). Impacto de la química supramolecular en la recuperación adicional de hidrocarburos. 1, 29-39.
- Sheng, J. J. (2015). Status of surfactant EOR technology. *Petroleum*, 1(2), 97-105. <https://doi.org/10.1016/j.petlm.2015.07.003>
- Speight, J. G. (2014). Chapter 3—Corrosion by High Acid Crude Oil. En J. G. Speight (Ed.), *High Acid Crudes* (pp. 57-75). Gulf Professional Publishing. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-800630-6.00003-4>

- Speight, J. G. (2017). Industrial Organic Chemistry. En Environmental Organic Chemistry for Engineers (pp. 87-151). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-804492-6.00003-4>
- Speight, J. G. (2020). Chapter 12—Petrochemicals. En J. G. Speight (Ed.), Handbook of Industrial Hydrocarbon Processes (Second Edition) (pp. 511-552). Gulf ProTional Publishing. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-809923-0.00012-6>
- The SLB Energy Glossary | Energy Glossary. (s. f.). Recuperado 4 de julio de 2025, de <https://glossary.slb.com/>
- Wade, L. G. (s. f.). Química Orgánica (2017.a ed., Vol. 2). Pearson.
- Wade, L. G., y Simek, J. W. (2017). Química Orgánica (Vol. 1). Pearson.