

## Industria del petróleo y simulaciones atomísticas

En esta charla se describirán posibles usos de la simulación atomística, tanto basadas en la mecánica cuántica (QM) como en la mecánica clásica (MM), aplicada a la industria del petróleo. En particular, se expondrá la fisicoquímica involucrada en los procesos de recuperación mejorada de petróleo (EOR). Desde simulaciones QM se analizará la factibilidad termodinámica de mecanismos superficiales involucrados en EOR. Desde MM se determinarán las propiedades estructurales y dinámicas del agua y salmuera confinada en poros slit de carbonato de calcio, estructura elegida para representar reservorios de carbonatos. Ambas simulaciones ayudan a la comprensión de estos procesos y son relevantes para la industria a fin de optimizarlos. Asimismo, se plantearán las líneas de investigación actuales dentro del CSC-CONICET en relación a esta área.

Verónica Muriel Sánchez

Investigadora Asistente

CSC-CONICET

(Centro de Simulación Computacional para Aplicaciones Tecnológicas- Polo Científico y Tecnológico- CONICET)