

Predicción de la línea de coexistencia trifásica en hidratos de CO₂ mediante Dinámica Molecular

José Manuel Míguez*¹, María M. Conde², Jean-Philippe Torré¹, Felipe J. Blas³, Manuel M. Piñeiro⁴, Carlos Vega²

¹ *Laboratoire des Fluides Complexes et leurs Réservoirs, Université de Pau et des Pays de l'Adour, Pau, France*

² *Departamento de Química Física, Universidad Complutense de Madrid*

³ *Departamento de Física Aplicada, Facultad de Ciencias Experimentales, Universidad de Huelva*

⁴ *Departamento de Física Aplicada, Facultad de Ciencias, Universidade de Vigo*

Los hidratos de gas son estructuras cristalinas compuestas por una red tridimensional de moléculas de agua que bajo ciertas condiciones de presión y temperatura pueden albergar moléculas de pequeño tamaño ($d < 10 \text{ \AA}$), como por ejemplo metano o CO₂. Estos compuestos tienen numerosas aplicaciones prácticas de considerable impacto económico, ya que son considerados como sistemas propicios para la captación/almacenamiento de CO₂ industrial, y la explotación de depósitos naturales de hidratos representaría una fuente alternativa de obtención de gas natural de importancia estratégica, ya que se estima que la cantidad de gas almacenada en este tipo de depósitos es superior a la encontrada en todos los depósitos convencionales conocidos¹.

En este trabajo se ha estimado la línea de coexistencia trifásica (hidrato - agua líquida - CO₂ líquido), que se puede diferenciar en el diagrama de fases de mezcla binaria agua - CO₂, mediante simulaciones de dinámica molecular, usando GROMACS como herramienta de cálculo. La temperatura y la presión a la cual las tres fases se encuentran en equilibrio fueron determinadas mediante simulaciones en el colectivo NPT usando el método de coexistencia directa de las tres fases involucradas. En estas simulaciones la molécula de CO₂ fue representada mediante un modelo molecular formado por

tres átomos, cada uno de ellos representado por un centro Lennard-Jones y una carga eléctrica puntual. Dentro de las distintas versiones disponibles para esta estructura molecular, se ha seleccionado el modelo TraPPE², cuya eficacia en la descripción del equilibrio de fase sólido-líquido del CO₂ ha sido ya demostrada³. Para el caso del agua, se ha seleccionado también un modelo rígido no-polarizable, el denominado TIP4P-ICE⁴ ya que este modelo proporciona una buena descripción de las fases sólidas del agua, y además predice correctamente los valores experimentales de la línea de tres fases para la mezcla agua-metano⁵. Las reglas de mezcla de Lorentz - Berthelot se aplicaron para el cálculo de las interacciones cruzadas. Finalmente, la predicción de la línea trifásica mediante simulación molecular se comparó con los resultados experimentales.

* jose-manuel.miguez@univ-pau.fr

¹ G. J. MacDonald, *Annual Review of Energy* 15, 53 (1990).

² J. J. Potoff y J. I. Siepmann, *AIChE* 47, 1676 (2001).

³ G. Pérez-Sánchez, D. González-Salgado, M. M. Piñeiro y C. Vega, *J. Chem. Phys.* 138, 084506 (2013).

⁴ J. L. F. Abascal, E. Sanz, R. G. Fernández y C. Vega, *J. Chem. Phys.* 122, 234511, (2005).

⁵ M. M. Conde y C. Vega, *J. Chem. Phys.* 133, 064507, (2010).