

Determinación de la línea de disociación del hidrato de dióxido de carbono en agua salada mediante dinámica molecular

A. Díaz Acosta, I. M. Zerón, J. M. Míguez, y F. J. Blas

Laboratorio de Simulación Molecular y Química Computacional,
CIQSO-Centro de Investigación en Química Sostenible y Departamento de Ciencias Integradas,
Universidad de Huelva, 21007 Huelva, Spain

Los hidratos de gas son estructuras cristalinas formadas por moléculas de agua las cuales se enlazan entre sí formando cajas poliédricas donde quedan retenidas moléculas gaseosas [1, 2]. El tipo de estructura del hidrato queda determinado principalmente por el tamaño de la partícula invitada, por ejemplo, el metano y el dióxido de carbono forma una estructura sl. En la naturaleza, los hidratos se producen en condiciones de presión alta y de temperatura baja como las presentes el lecho marino y zonas del permafrost.

En este trabajo se ha estimado la línea de coexistencia trifásica (hidrato- agua salada - CO₂ líquido) mediante simulaciones de dinámica molecular en el colectivo *NPT*, utilizando la técnica de coexistencia directa de las tres fases involucradas. La temperatura a la cuál las tres fases se encuentran en equilibrio fue determinada para diferentes presiones (10, 40 y 100 Mpa) y utilizando una concentración salina de 0.6 m en la fase acuosa. El modelo de CO₂ utilizado fue TraPPE [3], para el caso del agua se ha seleccionado el modelo TIP4P/2005 [4] y para el NaCl se usó el modelo Madrid de cargas escaladas [5].

La predicción de la línea trifásica fue comparada con los valores de simulación correspondientes al caso en ausencia de sal desarrollado por Míguez et al. [6]. En el presente

estudio se encuentra un desplazamiento de la línea trifásica de 6 K hacia la izquierda debido a la presencia de sal (NaCl a 0.6 m).

-
- [1] R. Boswell y T. S. Collett, *Current perspectives on gas hydrate resources*, Energy & environmental science **4**, 1206 (2011).
 - [2] E. Sloan y C. A. Koh, *Clathrate Hydrates of Natural Gases*, 3^a Edición, CRC Press (2008).
 - [3] J. J. Potoff y J. I. Siepmann, *Vaporliquid equilibria of mixtures containing alkanes, carbon dioxide, and nitrogen*, AIChE J. **47**, 1676 (2001)
 - [4] J. L. F. Abascal y C. Vega, *A general purpose model for the condensed phases of water: TIP4P/2005*, J. Chem. Phys. **123**, 234505 (2005).
 - [5] I. M. Zeron, J. L. F. Abascal y C. Vega, *A force field of Li⁺, Na⁺, K⁺, Mg²⁺, Ca²⁺, Cl⁻, and SO₄²⁻ in aqueous solution based on the TIP4P/2005 water model and scaled charges for the ions*, J. Chem. Phys. **151**, 134504 (2019).
 - [6] J. M. Míguez, M. M. Conde, J.-P. Torré, F. J. Blas, M. M. Piñeiro, and C. Vega *Molecular dynamics simulation of CO₂ hydrates: Prediction of three phase coexistence line*, J. Chem. Phys. **142**, 124505 (2015).