

Predicción de las propiedades interfaciales de sustancias promotoras de hidratos usando Dinámica Molecular

C. Romero¹, J. Algaba¹, A. I. Moreno-Ventas Bravo¹, P. Gómez-Álvarez¹, J. M. Míguez¹, and F. J. Blas¹

¹Universidad de Huelva, Laboratorio de Simulación Molecular y Química Computacional, CIQSO-Centro de Investigación en Química Sostenible and Departamento de Ciencias Integradas, Facultad de Ciencias Experimentales, E21071 Huelva, Spain

Un clatrato es una red cristalina tridimensional formada por dos tipos de partículas bien diferenciadas. Por un lado, las partículas que forman la estructura cristalina, conocidas como 'host molecules', y por otro lado las partículas encerradas en las cavidades que forman estas estructuras, conocidas como 'guest molecules'. Cuando esta red cristalina está formada por moléculas de agua los clatratos se conocen con el nombre de hidratos. En la naturaleza, los hidratos se producen espontáneamente en condiciones de presión alta y de temperatura baja, muy alejadas de las condiciones ambientales, ante la presencia de un gas que ocupa sus cavidades, como por ejemplo CH_4 o CO_2 . Por ello suelen aditivarse químicamente con promotores termodinámicos de hidratos, como el THF, que resulta el antecedente más importante que se tiene al desplazar la estabilidad de la fase hidrato a presión ambiental. Debido a la elevada toxicidad de esta sustancia existen otras alternativas como 1,3-dioxolano, ox-

ano y ciclopentano. Sin embargo, los modelos moleculares disponibles para predecir el comportamiento de estas sustancias no se han testeado para comprobar su eficacia a la hora de predecir su tensión interfacial líquido-vapor. Esta es una propiedad muy sensible a los detalles moleculares, por lo que la convierte en una de las propiedades clave ya que si la tensión interfacial líquido-vapor se predice correctamente, junto con el equilibrio de fase, se obtendrán buenos candidatos para el estudio futuro de hidratos de metano, dióxido de carbono, hidrógeno, etc., en presencia de estos promotores. Así, en este trabajo se pretende disponer de modelos moleculares realistas tanto flexibles como rígidos que sean capaces de predecir con precisión el equilibrio de fase y tensión interfacial de los promotores hidratos: THF, 1,3-dioxolano, oxano y ciclopentano para posteriormente abordar su estudio en presencia de hidratos.