

Efecto de la presión en la energía libre interfacial a lo largo de la curva de disociación del hidrato de CO₂

Cristóbal Romero-Guzmán^a, Iván M. Zerón^a, Jesús Algaba^a, Bruno Mendibourne^b,

José Manuel Míguez^a, Felipe J. Blas^a

^aUniversidad de Huelva, Laboratorio de Simulación Molecular y Química Computacional, CIQSO-Centro de Investigación en Química Sostenible y Departamento de Ciencias Integradas, Facultad de Ciencias Experimentales, 21071 Huelva, España

^bLaboratoire des Fluides Complexes et Leurs Réservoirs, UMR5150, Université de Pau et des Pays de l'Adour, B.P.1155, Pau Cedex 64014, France

E-mail: cristobal.romero@dfa.uhu.es

Palabras clave: hidrato, energía interfacial, simulación molecular

En este estudio se explora el impacto de variar la presión sobre la energía libre interfacial entre el hidrato de dióxido de carbono (CO₂) y agua a lo largo de su línea de disociación [1]. En este sentido, se hace una extensión de nuestros trabajos previos donde la energía interfacial del hidrato fue calculada a 400 bares usando los modelos TIP4P/Ice y TraPPE para CO₂ y agua, respectivamente, mediante dos extensiones del método Mold Integration [2,3], dando como resultado 29(2) y 30(2) mJ/m². Estos resultados muestran una gran concordancia entre las dos únicas medidas experimentales reportadas en la literatura. Concretamente, Uchida et al.[4] determinaron la energía interfacial en 28(6) mJ/m², mientras que Anderson et al. [5] reportaron 30(3) mJ/m². Considerando que no existen estudios en la literatura que obtengan la variación de la energía interfacial a lo largo de la curva de disociación del hidrato, expandimos nuestra investigación para cuantificar la influencia de la presión en la energía interfacial bajo diferentes condiciones de presión [1]. Nuestros hallazgos parecen revelar una correlación entre los valores de la energía libre interfacial y la presión. Específicamente, la energía libre interfacial disminuye levemente dentro del rango de presión de 100 a 1000 bares. A través de la combinación de extendidos modelos moleculares y técnicas de simulación avanzadas, anticipamos que este estudio contribuirá a mejorar nuestro entendimiento a un nivel molecular de los parámetros termodinámicos que gobiernan la energía libre interfacial de los hidratos.

Referencias

- [1] J. Algaba, E. Acuña, J. M. Míguez, B. Mendibourne, I. M. Zerón, and F. J. Blas, *Simulation of the carbon dioxide hydrate-water interfacial energy*, J. Colloid Interface Sci. **623**, pp. 354–367 (2022).
- [2] I. M. Zerón, J. M. Míguez, B. Mendibourne, J. Algaba, and F. J. Blas, *Simulation of the CO₂ hydrate–water interfacial energy: The mold integration–guest methodology*, J. Chem. Phys. **157**, 134709, (2022).
- [3] T. Uchida, T. Ebinuma, S. Tayeka, J. Nagao, and H. Narita, *Effects of pore sizes on dissociation temperatures and pressures of methane, carbon dioxide, and propane hydrates in porous media*, J. Phys. Chem. B., **106**, pp. 802–826 (2002).
- [4] R. Anderson, M. Llamedo, B. Tohidi, and R. W. Burgass, *Experimental measurement of methane and carbon dioxide clathrate hydrate equilibria in mesoporous silica*, J. Phys. Chem. B., **107**(15), pp. 3507–3514 (2003).