

# TASA DE NUCLEACIÓN HOMOGÉNEA DE LA FORMACIÓN DEL HIDRATO DE METANO BAJO CONDICIONES EXPERIMENTALES MEDIANTE SIMULACIONES SEEDING

Joanna Grabowska<sup>a</sup>, Samuel Blazquez<sup>b</sup>, Eduardo Sanz<sup>b</sup>, Eva G. Noya<sup>c</sup>, Jesús Algaba<sup>d</sup>,  
José Manuel Míguez<sup>d</sup>, Felipe J. Blas<sup>d</sup> y Carlos Vega<sup>b</sup>

<sup>d</sup>Laboratorio de Simulación Molecular y Química Computacional, CIQSO-Centro de  
Investigación en Química Sostenible and Departamento de Ciencias Integradas,  
Universidad de Huelva, 21006 Huelva Spain  
E-mail: [jesus.algaba@die.uhu.es](mailto:jesus.algaba@die.uhu.es)

**Palabras clave:** Nucleación, hidrato, metano, simulación molecular, seeding.

En este trabajo, se estima la tasa de nucleación homogénea del hidrato de metano a 400 bares y supercooling de 35 K mediante la técnica del Seeding de simulación molecular [1-3]. Para ello, el agua se describe mediante el modelo TIP4P/Ice [4] y el metano a través de centro Lennard-Jones [5]. La implementación de la técnica del Seeding se lleva a cabo insertando clusters de hidrato de metano de diferentes tamaños en la fase acuosa de un sistema en equilibrio con su vapor a 260 K y 400 bares [6]. A partir de estos sistemas, es posible determinar el tamaño de cluster crítico identificando aquellos que tienen una probabilidad del 50% de crecer o fundirse. Debido a que los tamaños de cluster que se pueden identificar con la técnica del Seeding son muy sensibles a la elección de parámetro de orden utilizado para determinar el tamaño del sólido esférico, en este trabajo se exploran varias posibilidades. Para ello, se llevan a cabo simulaciones de fuerza bruta de disoluciones acuosas de metano a concentraciones muy superiores a la concentración de equilibrio (disoluciones supersaturadas). A partir de estas simulaciones es posible estimar tasas de nucleación del sistema de un modo riguroso, lo que permite elegir parámetros de orden apropiados que reproduzcan la tasa de nucleación del hidrato utilizando la técnica del Seeding [6]. Haciendo uso de los parámetros de orden adecuado, en este trabajo se estima la tasa de nucleación del hidrato de metano a condiciones experimentales de 260 K y 400 bares. En concreto, nuestras simulaciones de Seeding indican que la tasa de nucleación del hidrato de metano a estas condiciones es de  $\log_{10}(\text{J/m}^3\text{s}) = -7(5)$  [6].

## Referencias

- [1] J. R. Espinosa, C. Vega, C. Valeriani, and E. Sanz, *J. Chem. Phys.* **144**, 034501 (2016).
- [2] X.-M. Bai and M. Li, *J. Chem. Phys.* **122**, 224510 (2005).
- [3] X.-M. Bai and M. Li, *J. Chem. Phys.* **124**, 124707 (2006).
- [4] J. L. F. Abascal, E. Sanz, R. García Fernández, and C. Vega, *J. Chem. Phys.* **122**, 234511 (2005).
- [5] B. Guillot and Y. Guissani, *J. Chem. Phys.* **99**, 8075 (1993).
- [6] C. D. Ruppel and J. D. Kessler, *Rev. Geophys.* **55**, 126–168 (2017).
- [6] J. Grabowska, S. Blazquez, E. Sanz, E. G. Noya, I. M. Zerón, J. Algaba, J. M. Míguez, F. J. Blas y C. Vega, *J. Chem. Phys.* **158**, 114505 (2023)