

Cálculo de la Energía Interfacial del Sistema Hidrato de Metano-Agua

Usando Dinámica Molecular

Iván M. Zerón^a, Jesús Algaba^a, José Manuel Míguez^a, Bruno Mendibourne^b, Felipe J. Blas^a

^a*Universidad 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*

^b*Laboratoire 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: ivan.zeron@dcu.uhu.es

Palabras clave: hidrato de metano, energía interfacial, dinámica molecular

Los hidratos de gas son sólidos similares al hielo, en los cuales las moléculas de agua se enlazan mediante puentes de hidrógeno formando estructuras poliédricas donde moléculas de gas son atrapadas. Dado que la estabilidad de estos sistemas se da a altas presiones y bajas temperaturas, los hidratos de gas son encontrados de forma natural en fondos marinos y en zonas de permafrost alrededor de todo el mundo [1].

En la actualidad, los hidratos de gas son considerados como una potencial fuente de energía (por ejemplo, el hidrato de metano) y a su vez una posible estrategia para atrapar gases de efecto invernadero como el dióxido de carbono. Debido a esta importancia, surge la necesidad de conocer y reproducir propiedades de estos sistemas, incluida la región de estabilidad termodinámica y coexistencia con otras fases. Esta última está íntimamente relacionada con la energía interfacial, sin embargo, para el caso de la coexistencia hidrato de metano – agua existen pocos datos experimentales en la literatura y cuyo rango se encuentra entre 32-34 mJ/m² [2,3].

Haciendo uso de modelos atomísticos realistas para las moléculas de agua (TIP4P/Ice [4]) y metano [5], hemos calculado la energía interfacial hidrato-agua usando simulaciones de dinámica molecular junto con las técnicas Mold Integration [6]: Mold Integration Host [7] y Mold Integration Guest [8]. Las cuales han demostrado la capacidad de proveer valores correctos de la energía interfacial para el caso del hidrato de CO₂. En este trabajo se estima que la energía interfacial hidrato de metano-agua se encuentra entre 43 y 45 mJ/m².

Referencias

- [1] E. D. Sloan and C. Koh, Clathrate Hydrates of Natural Gases, 3rd ed. (CRC Press, New York, 2008).
- [2] T. Uchida, T. Ebinuma, S. Takeya, J. Nagao, H. Narita, J. Phys. Chem. B 106, 802 (2002).
- [3] R. Anderson, M. Llamedo, B. Tohihi, R.W. Burgass, J. Phys. Chem. B 107, 3507 (2003).

- [4] J. L. F. Abascal, E. Sanz, R. G. Fernández, and C. Vega, *J. Chem. Phys.* 122, 234511 (2005).
- [5] B. Guillot and Y. Guissani, *J. Chem. Phys.* 99, 8075 1993.
- [6] J. R. Espinosa, C. Vega, and E. Sanz, *J. Chem. Phys.* 141 134709 (2014).
- [7] J. Algaba, E. Acuña, J. M. Míguez, B. Mendiboure, I. M. Zerón, and F. J. Blas, *J. Colloid and Interface Sci.* 623, 354 (2022).
- [8] I. M. Zerón, J. M. Míguez, B. Mendiboure, J. Algaba, and F. J. Blas, *J. Chem. Phys.* 157, 134709 (2022).