

METODOLOGÍAS PARA PREDECIR LA REGIÓN DE ESTABILIDAD DE LOS HIDRATOS DE CO₂

Jose Manuel Míguez^a, Jesús Algaba^a, Iván Michael Zerón^a, Cristobal Romero-Guzmán^a,
y Felipe J. Blas^a

^aLaboratorio 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: jose.miguez@dfa.uhu.es

Palabras clave: hidrato, CO₂, coexistencia trifásica, dinámica molecular

La línea de coexistencia trifásica Hidrato-H₂O líquida-CO₂ líquido (HLL) que presenta el diagrama de fases de la mezcla binaria H₂O+CO₂ a bajas temperaturas y que delimita la zona de estabilidad de la fase hidrato ya ha sido estimada por varios trabajos previos mediante la técnica de coexistencia directa en simulación molecular [1,2]. Esta técnica consiste en poner en contacto las tres fases coexistentes a una misma presión y variar la temperatura con el objetivo de encontrar la temperatura límite de estabilidad del hidrato de CO₂. Aunque es un método eficaz, es un método muy costoso computacionalmente ya que requiere el cálculo explícito de todas las interacciones moleculares entre las fases coexistentes para predecir la evolución de la coexistencia HLL.

En este trabajo se propone una ruta novedosa que consiste en el cálculo de la solubilidad del CO₂ en agua calculada a lo largo de una isobara en su contacto por separado con las otras dos fases presentes en la línea trifásica, la fase líquida rica en CO₂ y con la fase hidrato. En particular, se ha calculado la solubilidad del CO₂ en agua al poner en contacto una fase acuosa con otra fase líquida rica en CO₂, los resultados muestran que esta disminuye a medida que aumenta la temperatura. Por otro lado, se ha realizado el mismo cálculo al poner en contacto una fase acuosa con la fase sólida restante, el hidrato de CO₂, las predicciones muestran que en este caso la solubilidad del CO₂ en agua aumenta a medida que crece la temperatura. Concretamente estas simulaciones han sido realizadas a lo largo de las isobaras de 1000 y 2000 bar y a temperaturas comprendidas entre 260 y 300 K. Las dos curvas de solubilidad obtenidas se cruzan en un punto que corresponde con la temperatura de coexistencia trifásica (T₃) de los hidratos de CO₂ a las presiones seleccionadas [3].

Referencias

- [1] J. M. Míguez, M. M. Conde, J. P. Torré, B. Mendiboure, F. J. Blas, M. M. Piñeiro, C. Vega, *J. Chem. Phys.* **142**, 124505 (2015)
- [2] J. Costandy, V. K. Michalis, I. N. Tsimpanogiannis, A. K. Stubos and I. G. Economou, *J. Chem. Phys.* **143**, 094506 (2015)
- [3] J. Algaba, I. M. Zerón, J. M. Míguez, J. Grabowska, S. Blazquez, E. Sanz, C. Vega and F. J. Blas, *J. Chem. Phys.* **158**, 184703 (2023)