

DETERMINACIÓN DE LA LINEA DE DISOCIACIÓN Y DE LA FUERZA IMPULSORA PARA NUCLEACIÓN DEL HIDRATO DE NITRÓGENO A PARTIR DE SIMULACIÓN MOLECULAR

Miguel J. Torrejón,¹ Jesús Algaba¹ y Felipe J. Blas¹

¹*Laboratorio de Simulación Molecular y Química Computacional, CIQSO-Centro de Investigación en Química Sostenible y Departamento de Ciencias Integradas, Universidad de Huelva, 21006, Huelva, España.*

E-mail: miguel.torreon@dcu.uhu.es

Palabras clave: Disociación, nucleación, nitrógeno, hidrato.

En este trabajo, hemos determinado la línea de disociación del hidrato de nitrógeno (N₂) mediante simulación molecular usando el modelo de agua TIP4P/Ice y el modelo de fuerza TraPPE del N₂. Hemos usado el método de la solubilidad, propuesto por alguno de nosotros recientemente [1], para determinar la temperatura de disociación del hidrato a diferentes presiones, desde 500 hasta 1500 bar [2]. Concretamente, calculamos la solubilidad del N₂ en la disolución acuosa cuando esta en contacto con una fase líquida rica en N₂ y cuando está en contacto con la fase de hidrato en función de la temperatura. En el primer caso, la solubilidad del N₂ decrece y se incrementa en el segundo caso con la temperatura, cortándose ambas curvas a una cierta temperatura que determina la temperatura de disociación del hidrato a la presión dada. En este trabajo encontramos una buena concordancia entre las predicciones obtenidas y los datos experimentales tomados de la literatura en el rango de presiones considerado [3,4]. A partir del conocimiento de las curvas de solubilidad del N₂ en la disolución acuosa se determina la fuerza impulsora para la nucleación del hidrato [1], en función de la temperatura a diferentes presiones. En particular, se utilizan dos rutas termodinámicas para evaluar el cambio del potencial químico en la formación del hidrato. Aunque la fuerza impulsora para la nucleación disminuye ligeramente (en valor absoluto) cuando aumenta la presión, nuestros resultados indican que el efecto de la presión puede considerarse insignificante en el rango de presiones estudiado en este trabajo. Hasta donde sabemos, esta es la primera vez que la fuerza impulsora para la nucleación de un hidrato, que exhibe una estructura cristalográfica sII a lo largo de su línea de disociación, se estudia por simulación molecular.

Referencias

- [1] J. Algaba, I. M. Zerón, J. M. Míguez, J. Grabowska, S. Blazquez, E. Sanz, C. Vega and F. J. Blas, "Solubility of carbon dioxide in water: Some useful results for hydrate nucleation," *The Journal of Chemical Physics* **158** (2023)
- [2] J. Grabowska, S. Blazquez, E. Sanz, I. M. Zerón, J. Algaba, J. M. Míguez, F. J. Blas and C. Vega, "Solubility of methane in water: some useful result for hydrate nucleation," *J. Phys. Chem. B* **126**, 8553-8570 (2022).
- [3] D. R. Marshall, S. Saito, and R. Kobayashi, "Hydrates at high pressures: Part i. methane-water, argon-water, and nitrogen-water systems," *AIChE Journal* **10**, 202-205 (1964).
- [4] K. Sugahara, Y. Tanaka, T. Sugahara, and K. Ohgaki, "Thermodynamic stability and structure of nitrogen hydrate crystal," *Journal of Supramolecular Chemistry* **2**, 365-368 (2002).