



ID de la contribución : 501

Tipo : Oral parallel contribution

Simulación molecular de hidratos de metano en condiciones oceánicas

lunes, 17 de julio de 2017 16:30 (15)

Los hidratos de gas (o clatratos de agua) son compuestos de inclusión no estequiométricos constituidos por agua y pequeñas moléculas de gas. Aparecen a bajas temperaturas y presiones moderadamente altas, y están presentes de forma natural principalmente en los fondos oceánicos y el permafrost de las regiones frías [1]. Existen además, evidencias de la presencia de hidratos en cometas y otros cuerpos del sistema solar, especialmente en los planetas exteriores y sus lunas [2], y se considera que abundan en numerosos lugares del universo fuera del sistema solar.

Una de las aplicaciones más interesantes de estos compuestos reside en la posibilidad de utilizarlos para capturar contaminantes como clorofluorocarbonos (CFC's), o el CO₂ de origen antropogénico. Otras aplicaciones están relacionadas con su potencial uso para transporte y almacenamiento de gases, ya que la relación existente entre el volumen que ocupa un gas en condiciones normales es 164 veces mayor que el que ocupa formando un hidrato con todas sus cavidades llenas, pero sin el coste que supone mantener un gas altamente comprimido.

Actualmente, los hidratos de gas naturales despiertan un gran interés debido a su alto contenido en metano, dadas las implicaciones económicas de este como combustible y su impacto medioambiental como gas de efecto invernadero [3].

A pesar de los numerosos estudios teóricos y computacionales sobre hidratos de gas que existen en la literatura [4,5], no encontramos apenas referencias que incluyan las condiciones oceánicas, en particular la presencia de iones Na⁺ y Cl⁻ principalmente disueltos en el agua líquida. Es por ello que proponemos y verificamos un modelo molecular para simular el comportamiento de estos sistemas en condiciones más realistas.

Primary author(s) : ÁNGEL MANUEL, Fernández Fernández (Universidad de Vigo)

Presenter(s) : ÁNGEL MANUEL, Fernández Fernández (Universidad de Vigo)

Clasificación de la sesión : Thermodynamics

Clasificación de temáticas : Thermodynamics