



ESTUDIO TEORICO DE LA INTERACCIÓN DE HIDRATOS DE METANO CON 15 Y 20 MOLÉCULAS DE AGUA CON UN LÍQUIDO IÓNICO

Isidoro García-Cruz ¹, Ascención Romero-Martínez ²

¹ Gerencia de Refinación de la Dirección de Investigación en Transformación de Hidrocarburos,

²Gerencia de Herramientas y Sistemas para Pozos e Instalaciones, Dirección de Investigación en Exploración y Producción; Instituto Mexicano del Petróleo, Eje Central Lázaro Cárdenas Norte 152, Col. San Bartolo Atepehuacan, C.P. 07730, Ciudad de México, MÉXICO.

En este estudio, hemos considerado dos hidratos de metano formados por $n=15$ y $n=20$ moléculas de H_2O y una molécula huésped de metano, en interacción con un líquido iónico (LI), el bromuro de 1-hexil-3-metil-imidazolina. Las estructuras de los hidratos con $n=15$ y $n=20$ moléculas de H_2O , previamente fue obtenida por G. Bravo.¹ El hidrato con $n=15$ moléculas de H_2O es el precursor del hidrato $n=20$ moléculas de H_2O , donde cinco de las moléculas de agua yacen en la segunda esfera de hidratación y es 1.2 kcal/mol más estable que la estructura 5¹² (dodecaedro), bien conocida por ser la unidad del cristal de hidrato tipo I.

En este trabajo, se ha estudiado la interacción de hidratos de metano con $n=15$ y $n=20$ moléculas de H_2O con el LI, usando un funcional con fuerzas de dispersión tipo van der Waals (vdW). La correcta descripción de las fuerzas de dispersión tipo vdW, es crucial en este tipo de sistemas, con interacciones intermoleculares, en macromoléculas.^{2,3} Hemos considerado tres tipos de interacción: una a través de una cara cuadrada, otra con una cara pentagonal y una con una cara hexagonal, formadas por cuatro, cinco y seis moléculas de H_2O , respectivamente. Los resultados muestran que la interacción del bromuro de 1-hexil-3-metil-imidazolina con un anillo de cuatro moléculas de H_2O , es más estable, que la interacción con un anillo de seis y esta última interacción es más estable que la de la cara de cinco moléculas de H_2O . Algunas de estas interacciones hidrato de metano-LI, desestabilizan notablemente a las jaulas o cajas de H_2O .

Referencias:

¹ G. Bravo, H. Saint-Martin. *Int. J. Quant. Chem.* **2012**, 112, 3655

² A. Tkachenko, M. Scheffler. *Phys. Rev. Lett.* **2009**, 102, 073005

³ E. R. McNellis, J. Myer, K. Reuter. *Phys. Rev. B.* **2009**, 80, 205414