

XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

ESTUDIO TEÓRICO DE REACCIONES DE ALCANOS CÍCLICOS RELEVANTES EN PROCESOS DE COMBUSTIÓN, QUÍMICA ATMOSFÉRICA Y ASTROQUÍMICA

Monascal Yeljair y Badenes María Paula

Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

yemonascal@inifta.unlp.edu.ar

Introducción. Las reacciones en fase gaseosa son esenciales en numerosos procesos, que van desde la combustión hasta la química atmosférica e interestelar. En esta tesis doctoral se lleva a cabo una investigación teórica sobre los mecanismos por los cuales transcurren reacciones químicas en las que participan alcanos cíclicos de interés ambiental. En esta presentación, se detallan los resultados obtenidos mediante métodos *ab initio* y DFT sobre las reacciones de algunos de estos compuestos con radicales relevantes en la atmósfera terrestre y en entornos astroquímicos, como lo son los radicales OH y CN, respectivamente. Aunque se conocen varios estudios sobre la oxidación del ciclopropano por el radical OH, no se dispone de mucha información respecto de la reactividad de este radical con ciclopropanos sustituidos [1]. Por ello, en primer lugar, se examinan las reacciones de ciclopropanos con grupos halocarbonados frente al radical OH. En segundo lugar, se exploran las interacciones entre el ciclopropano y el radical CN. Si bien el ciclopropano no es detectable en observaciones astronómicas milimétricas, existe evidencia reciente de su formación en análogos de hielo interestelar [2], lo que motiva el análisis de posibles productos de reacción que puedan identificarse mediante técnicas de radioastronomía.

Resultados. Las barreras de energía determinadas para las reacciones $c\text{-C}_3\text{H}_5\text{R} + \text{OH}$ ($\text{R} = \text{CH}_2\text{F}, \text{CHF}_2, \text{CF}_3$) indican que la abstracción de átomos de H es más favorable en comparación con las vías de adición. Se estima que la vida media de estos sustratos en la atmósfera es < 20 días. Por otro lado, la superficie de energía potencial encontrada para el sistema $c\text{-C}_3\text{H}_6 + \text{CN}$ reveló una vía de reacción con barreras sumergidas que conduce a la formación de $c\text{-C}_3\text{H}_5\text{CN}$. Se prevé estudiar la cinética de este canal en etapas posteriores. Otros mecanismos analizados presentan barreras altas, lo que sugiere que son poco factibles en regiones frías del medio interestelar.

Conclusiones. Los cálculos teóricos permitieron derivar las constantes de velocidad para distintas vías de reacción de ciclopropanos halocarbonados con el radical OH. Además, se halló un mecanismo de formación de $c\text{-C}_3\text{H}_5\text{CN}$ a partir de $c\text{-C}_3\text{H}_6$ y CN, el cual es exotérmico en $\sim 20 \text{ kcal mol}^{-1}$ y procede a través de barreras sumergidas.

Referencias

- 1) Louis, F., *Int. J. Chem. Kinet.*, **2015**, 47, 232-245.
- 2) Abplanalp, M.J., Góbi, S., Kaiser, R.I., *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2019**, 21, 5378-5393.