

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

ESTUDIO CINÉTICO TEÓRICO DETALLADO DE REACCIONES QUÍMICAS DE INTERÉS AMBIENTAL
EN LAS QUE PARTICIPAN ALCANOS CÍCLICOS

Monascal, Yeljair

Badenes, María Paula (Dir.)

Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA). Facultad de Ciencias Exactas, UNLP.

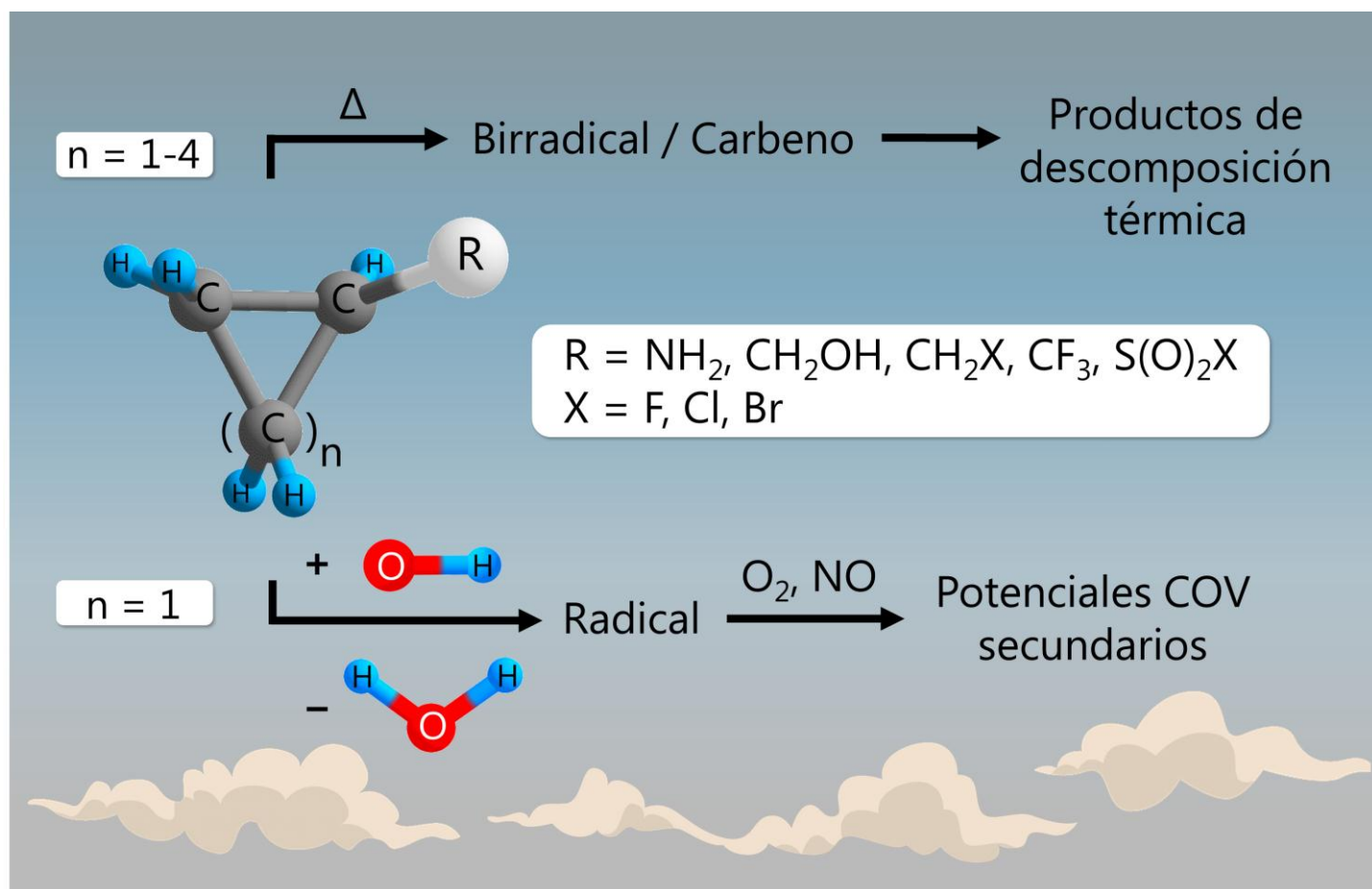
monascal.yeljair@gmail.com

PALABRAS CLAVE: Cinética Química, Ab Initio y DFT, Cicloalcanos.

DETAILED THEORETICAL KINETIC STUDY OF CHEMICAL REACTIONS OF ENVIRONMENTAL INTEREST INVOLVING CYCLIC
ALKANES

KEYWORDS: Chemical Kinetics, Ab Initio and DFT, Cycloalkanes.

Resumen gráfico



Resumen

Todos los días, grandes cantidades de compuestos orgánicos volátiles (COV) son emitidas al aire desde fuentes antropogénicas y naturales. Para comprender el destino atmosférico de estas especies y evaluar su impacto en el ambiente, se requiere contar tanto con datos termodinámicos como cinéticos provenientes de determinaciones experimentales y teóricas de gran precisión. El objetivo fundamental de este plan de trabajo doctoral es realizar una investigación teórica detallada de diversos procesos individuales y mecanismos de isomerización y descomposición térmica de alcanos cíclicos sustituidos de interés ambiental, así como las reacciones de diversos ciclopropanos con el radical hidroxilo ($\cdot\text{OH}$). La metodología a emplear se basa en cálculos de orbitales moleculares *ab initio* de alto nivel y de la teoría del funcional de la densidad (DFT), relativos a las geometrías moleculares,

frecuencias vibracionales y energías de especies estables, así como de los posibles intermediarios y estados de transición involucrados. Los resultados generados a partir del plan propuesto, que incluye datos estructurales, espectroscópicos, termoquímicos y cinéticos nuevos o en intervalos de presión y temperatura más amplios que los conocidos, permitirán una mejor comprensión de las interacciones y las transformaciones de especies relevantes como radicales, birradicales y carbenos. Se espera que los resultados obtenidos puedan ser útiles para mejorar los modelos atmosféricos existentes y ayuden al entendimiento y proposición de posibles soluciones en la problemática ambiental y de la química de las combustiones, así como también en la orientación de futuros trabajos experimentales.

Multimedia

<http://sedici.unlp.edu.ar/handle/10915/113987>