

## FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

**ESTUDIO TEÓRICO DE LA ENERGÉTICA Y DEGRADACIÓN ATMOSFÉRICA DE ALQUENOS HALOGENADOS DE INTERÉS MEDIOAMBIENTAL**

Zucchini, Paolo G.

Tucceri, Maria E. (Dir.), Caballero, Norma B. (Codir.)

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

[paolozucchini@inifta.unlp.edu.ar](mailto:paolozucchini@inifta.unlp.edu.ar)PALABRAS CLAVE: Termodinámica, Cinética, Energética, Degradación, Descomposición.**ATMOSPHERIC DEGRADATION AND ENERGETIC OF HALOGENATED ALKENES: A THEORETICAL STUDY OF THEIR ENVIRONMENTAL IMPACT**KEYWORDS: Thermochemistry, Kinetics, Energetic, Degradation, Decomposition.

## Resumen gráfico



Paolo G. Zucchini

## Resumen

Numerosos estudios recientes indican que los átomos de halógenos (flúor, cloro, bromo y yodo) intervienen en los procesos de destrucción del ozono atmosférico, debido a su participación en varios ciclos catalíticos tanto en la estratósfera como en la tropósfera. Estas especies llegan a la atmósfera proveniente de procesos que sufren moléculas halogenadas tanto de origen natural como antropogénicas. En la industria química se emplean muy a menudo hidrocarburos halogenados como precursores para la producción de muy diversos productos e incluso algunos de estos productos finales son ellos mismos sustancias halogenadas.

Debido a esto, se vuelve esencial el hecho de poder entender y modelar la energética y la cinética de tales procesos para luego hacer predicciones y control de los mismos. Esto es de gran importancia en la eliminación de los residuos generados y en el conocimiento del destino atmosférico de estas especies. De allí la necesidad de disponer de valores confiables tanto de los parámetros cinéticos como termoquímicos de radicales y especies halogenadas. Particularmente, es fundamental conocer la entalpía de formación estándar de las especies intervinientes, así como también las constantes de velocidad y productos formados en un gran número de reacciones químicas elementales que involucran estas especies halogenadas, puesto que, en muchos casos, estos parámetros son fundamentales para el éxito de los modelados de estos sistemas.

En este trabajo de tesis se planea estimar las entalpías de formación estándar de dihaloalquenos con 3, 4 y 5 carbonos en su estructura y, efectuar un estudio sistemático de su termoquímica y estabilidad. Además, se planea el estudio teórico de las reacciones de descomposición térmica de los dihaloalquenos de cuatro y cinco carbonos con un enlace doble o dos dobles enlaces conjugados y analizar los mecanismos de degradación atmosférica con los radicales OH y Cl. Dado que estas especies pueden aparecer en la atmósfera por uso directo (como fumigantes, en la industria, etc.) o como producto de degradación de especies más grandes, se ve la necesidad de un estudio sistemático de su energética y mecanismos de degradación.

La metodología a emplear se basa en cálculos de orbitales moleculares ab initio de alto nivel y estimaciones mediante la teoría del Funcional de la Densidad (DFT), accesibles en el programa Gaussian 09. Mediante modelos mecano-cuánticos se podrán optimizar geometrías moleculares, determinar frecuencias vibracionales armónicas y anarmónicas, y establecer la energética de las especies reaccionantes y de los estados de transición involucrados.

## Multimedia

<http://sedici.unlp.edu.ar/handle/10915/116034>