

Area de Beca: CE - Cs. Exactas y Naturales

Título del Trabajo: **DESCOMPOSICIÓN TÉRMICA DEL DIPERÓXIDO CÍCLICO DE BENZALDEHÍDO EN SOLUCIÓN ACUOSA.**

Autores: BORDON, ALEXANDER G.-PROFETA, MARIELA I.-ROMERO, JORGE M.

E-mail de Contacto: germanbordon_7@hotmail.com

Teléfono: 3794787519

Tipo de Beca: UNNE Pregrado

Resolución Nº: 1012/12

Período: 04/03/2013 - 04/03/2014

Proyecto Acreditado: Res:1080/09CS,F005,Síntesis Química y Reactividad de Peróxidos Cíclicos,01/01/09-31/12/13

Lugar de Trabajo: Facultad de Cs. Exactas y Naturales y Agrimensura

Palabras Claves: DFT-cinetica-diperoxido

Resumen:

La química de los diperóxidos orgánicos, lo que implica la síntesis, caracterización, y su transformación, tiene usos importantes como, iniciadores para la polimerización, actividad antimalárica y explosivos. La reactividad inusual de estos peróxidos se atribuye generalmente a la escisión homolítica de la unión peroxídica. Los diperóxidos cíclicos derivados de aldehído alifático que se prepararon en este laboratorio son el objeto de numerosos estudios relacionados con su efecto sustituyente, efecto de solvente y su actividad tóxica.

En la descomposición térmica de algunos derivados de diperóxidos cíclicos de cetonas, la sustitución de grupos metilo por grupos fenilos en sus moléculas afecta a los valores de los parámetros de activación correspondientes a la homólisis unimolecular. Se observó el mismo comportamiento en peróxidos aldehídos cíclicos.

En este trabajo se presenta la descomposición térmica del diperóxido de benzaldehído (3,6-difenil-1, 2, 4,5-tetroxano, DFT) en solución de acuosa, miembro del grupo diperóxido con muchas propiedades para ser usado como iniciador de polimerización. Los resultados de este estudio serán de interés para la aplicación de los mismos en procesos industriales.

La termólisis se realiza en ampollas de vidrio Pyrex, desgasificada y selladas al vacío, en un rango de temperatura comprendido entre 130°C y 166°C, y concentración inicial de 0,01 M. La concentración de los productos de la reacción y del diperóxido remanente (DFT) a diferentes tiempos se miden por cromatografía en fase gaseosa con detector de ionización de llama, utilizando n-octano como patrón interno. La cinética, sigue una ley cinética de primer orden hasta el 60% de conversión DFT. Los productos que se observaron fueron benzaldehído y oxígeno y ácido benzoico producto de la oxidación del benzaldehído. Como conclusión podemos decir a través del análisis los productos de la reacción que el DFT sufre una ruptura homolítica inicial del enlace O-O dando un birradical, luego este sufre una ruptura del enlace C-O para dar dos moléculas de benzaldehído y una molécula de oxígeno molecular. Los parámetros cinéticos, entalpía de activación ($23,96 \pm 1,2$ kcal/mol) y la entropía de activación ($-22,30 \pm 0,8$ cal/mol K) se compararon con los obtenidos con otros solventes para evaluar el efecto del solvente sobre la reacción de descomposición térmica, observándose una relación lineal entre los diferentes solventes.

Becario
(Firma)

Co-Autor
(Firma)

Co-Autor
(Firma)

Director de Beca
(Firma y Aclaración)

Director de Proyecto
(Firma y Aclaración)

Control: 23rt4nrek