



**Congreso Argentino de Fisicoquímica y  
Química Inorgánica - La Plata 2021**



*En memoria del Profesor*  
***Dr. Alejandro Jorge Arvia***  
*14/01/1928-22/04/2021*

## Comité Organizador \_\_\_\_\_

### Presidente:

- Ing. Liliana M. Gassa

### Vicepresidente:

- Dra. María Eugenia Tucceri

### Secretaria:

- Dra. María Paula Badenes

### Prosecretaria:

- Dra. Larisa Bracco

### Tesorera:

- Dra. Carolina Vericat

### Vocales:

- Dra. Carolina Lorente
- Dr. Ezequiel Wolcan
- Lic. Claudia Chacón Gil
- Lic. Valentín Villarreal
- Lic. Yoskiel Lorca
- Lic. Paolo Zucchini
- Dr. Fabricio Ragone
- Mag. Wilfred Espinosa
- Lic. Yeljair Monascal

## Comité Científico

---

### Presidente:

- Dra. Florencia Fagalde

### Delegación UNS, Bahía Blanca:

- Dr. Juan Manuel Sieben
- Dra. Graciela Pilar Zanini
- Dra. Mariana Alvarez

### Delegación CONEA, CAC – Buenos Aires:

- Dra. Verónica Lombardo
- Dr. Nahuel Montesinos

### Delegación UNC, Córdoba:

- Dra. Belén Blanco
- Dr. Sergio Dassie
- Dr. Gustavo Pino

### Delegación UNNE, Corrientes:

- Dra. Maria Fernanda Zalazar
- Dr. Emilio Luis Angelina (UNNE)

### Delegación UNLP, La Plata:

- Dra. Andrea Lorena Picone
- Dra. Rosana Romano
- Dra. Melina Cozzarin
- Dr. Gustavo Ruiz

### Delegación UNRC, Rio IV:

- Dr. Walter A. Massad
- Dr. Mariano Correa
- Dr. Rodrigo Palacios

### Delegación UNR, Rosario, Santa Fé:

- Dr. Sebastián Bellú
- Dr. Juan Carlos Gonzalez

### Delegación Santa Fé

- Dra. Claudia Neyertz

### Delegación UNSL, San Luis:

- Dr. Germán Gómez
- Dra. Griselda Narda

### Delegación UNSE, Santiago del Estero:

- Dra. Ana Ledesma
- Dra. Valentina Rey

### Delegación Tucumán:

- Dra. Aída Ben Altabef
- Dr. Mauricio Cattaneo



## XXII CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA LA PLATA 2021

### CINÉTICA Y MECANISMO DE LA DESCOMPOSICIÓN TÉRMICA DEL DIPEROXIDO DE MALONALDEHIDO (DPM) EN SOLUCIÓN

Reguera Mónica Beatriz<sup>1</sup>, Romero Jorge Marcelo<sup>2</sup> y Jorge Nelly Lidia<sup>2</sup>

1UNCAUS, laboratorio de Fisicoquímica, Comandante Fernandez 755, Pdcia. Roque Sáenz Peña, Chaco, Argentina

2 UNNE, Área de Química Física, LabInTam, Av. Libertad 5460, Corrientes, Argentina

[monica@uncaus.edu.ar](mailto:monica@uncaus.edu.ar), [jromero@exa.unne.edu.ar](mailto:jromero@exa.unne.edu.ar), [nelly.jorge@gmail.com](mailto:nelly.jorge@gmail.com)

#### INTRODUCCION

El carácter multidisciplinario del estudio integral de los peróxidos orgánicos, abarca un gran campo de acción, comprendiendo desde aspectos biológicos, hasta importantes aplicaciones industriales (iniciación de reacciones de polimerización, y actualmente como potenciales herbicidas). Este particular diperoxido orgánico es líquido y muy soluble, lo que lo hace ideal para hacer formulaciones, pero es importante estudiar su actividad frente a diferentes solventes y en este trabajo se utiliza metanol como un primer solvente.

#### METODOLOGÍA

La reacción se realiza en ampollas de vidrio Pyrex conteniendo la solución del diperoxido en metanol, selladas en ausencia de aire y colocadas en un baño termostatzado; las ampollas son retiradas del mismo a diferentes tiempos, elegidos convenientemente. La cantidad del reactivo remanente en la solución como así también los productos formados, son determinados cuantitativamente por análisis por CG, utilizando una columna capilar de sílice fundida HP5 (30 m long. 250µm d.i.) con 5% de fenilmetilsilicona como fase estacionaria, en un instrumento marca AGILENT 7890A, equipado con detector FID, utilizándose nitrógeno como gas portador y empleándose el método cuantitativo del patrón externo. Los valores de  $k_{exp}$  fueron calculados utilizando una ley cinética de primer orden, estimándose la bondad del ajuste con el método de regresión lineal por cuadrados mínimos ( $r > 0,998$ ). Los parámetros de activación de la reacción inicial se obtuvieron aplicando la ecuación de Arrhenius y la ecuación de Eyring.

#### RESULTADOS Y CONCLUSIONES

La descomposición térmica del DPM en metanol, en el ámbito de temperaturas de 130 - 166°C y concentración inicial  $2,0 \times 10^{-2}$  mol/L, cumple satisfactoriamente una ley cinética de primer orden. Los valores de los parámetros de la etapa inicial de la reacción ( $\Delta H^\ddagger = 20,5 \pm 0,7$  kcal/mol;  $\Delta S^\ddagger = -15,6 \pm 0,5$  cal/mol K;  $E_a = 21,3 \pm 0,7$  kcal/mol) conjuntamente con el hallazgo de malonaldehido como producto principal de la termólisis, permiten postular un mecanismo de reacción iniciado por la ruptura homolítica de un enlace peroxídico del DPM y que lleva a la formación de un birradical como intermediario de la reacción.