



## XXII Comunicaciones Científicas y Tecnológicas

Orden Poster: CE-043 (ID: 126)

**Autor:** Bordon, Alexander

**Título:** SIMULACIÓN DE LA REACCIÓN DE TERMÓLISIS DEL 3,6-DIBUTANAL-1,2,4,5-TETROXANO.

Director:

Palabras clave: DIPEROXIDOS,DESCOMPOSICION,MODELADO

Área de Beca: Cs. Naturales Y Exactas

Tipo Beca: Iniciacion Tipo B

Periodo: 01/03/2015 al 28/02/2018

Lugar de trabajo: Facultad De Cs. Exactas Y Naturales Y Agrimensura

Proyecto: (13F002) Síntesis, química y reactividad de peróxidos cíclicos. Parte III.

### **Resumen:**

El carácter multidisciplinario del estudio integral de los peróxidos orgánicos, abarca un gran campo de acción, comprendiendo desde aspectos biológicos (involucrando los procesos oxidativos del metabolismo) hasta importantes aplicaciones industriales (iniciación de reacciones de polimerización, acción de desinfectantes, fabricación de pinturas, etc.). Trabajos experimentales del grupo de investigación del LabInTam, postularon, dos posibles mecanismos para la reacción de termólisis de tetroxanos.

El objetivo de este trabajo es poder elucidar el mecanismo de reacción de la termolisis del 3,6-dibutanal-1,2,4,5-tetroxano. Los cálculos de simulación fueron realizados usando el método del funcional de la densidad (DFT), con la base 6-311+G\*\* y el funcional de correlación-intercambio BHandHLYP para determinar los puntos críticos del PES de la reacción de termólisis del 3,6-dibutanal-1,2,4,5-tetroxano (DPG). El método semiempírico PM6 se usó previamente para explorar el PES. Los cálculos fueron realizados con el programa GAUSSIAN 09. Mínimos y TS' se caracterizaron por las frecuencias armónicas vibracionales. Las energías totales más el ZPE se usó para calcular las energías relativas.

Se presentan los diferentes caminos de reacción de termólisis del DPG mediante un mecanismo concertado dando ambos como producto final 2 moléculas de glutaraldehído y una de oxígeno. En DFT la longitud de enlace O-O (1,50 Å) es ligeramente más larga que la experimental (1,478 Å). El reactivo va a los productos (dos moléculas de glutaraldehído y una de oxígeno) a través de dos caminos de reacción, cada uno con un TS, TSc y TSc1, cuyas energías de activación son 88.70 kcal/mol y 91.80 kcal/mol, respectivamente. La energía de activación del TSC es más baja que el TSC1, pero ambos son más elevados que el resultado experimental (24.3 kcal/mol) para el 1,2,4,5-tetroxano, que es el único miembro de la familia de estos compuestos que se determinó en fase gaseosa su energía de activación. Como consecuencia, la reacción de termólisis, a través ambos caminos no puede ser posible. Por ello se está modelando el camino de reacción a través de un mecanismo en etapas.