



**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 de las Reacciones $HX/HOX + CHO \rightarrow H/HO + XCHO$ ($X=Cl, Br$)

Miranda, Matias O.^{1,2}, Duarte, Darío J. R.^{1,2}

¹ IQUIBA-NEA (UNNE-CONICET) Avenida Libertad 5460 (3400) Corrientes.

² LEMYP (FACENA-UNNE) Avenida Libertad 5460 (3400) Corrientes.

Email de contacto: djr_duarte@hotmail.com

Introducción. El radical formilo (CHO) es un intermediario reactivo de importancia atmosférica.¹ La reactividad entre CHO y compuestos halogenados presentes en la atmósfera ha sido poco explorada. Para evaluar posibles mecanismos de reacción entre el CHO y algunos reservorios de halógeno, se realizó un estudio teórico de las reacciones $RX + CHO \rightarrow R + XCHO$ ($X = Cl, Br$; $R = -H, -OH$).

Metodología. Las optimizaciones fueron realizadas a M06-2X/aug-cc-pVTZ. Las energías fueron calculadas a QCISD/aug-cc-pVTZ. Se obtuvieron las constantes cinéticas de cada reacción aplicando la Teoría Clásica del Estado de Transición.

Resultados. Las optimizaciones revelan que en todas las reacciones se forma un complejo pre-reactivo estabilizado por un enlace de halógeno (ver figura 1).

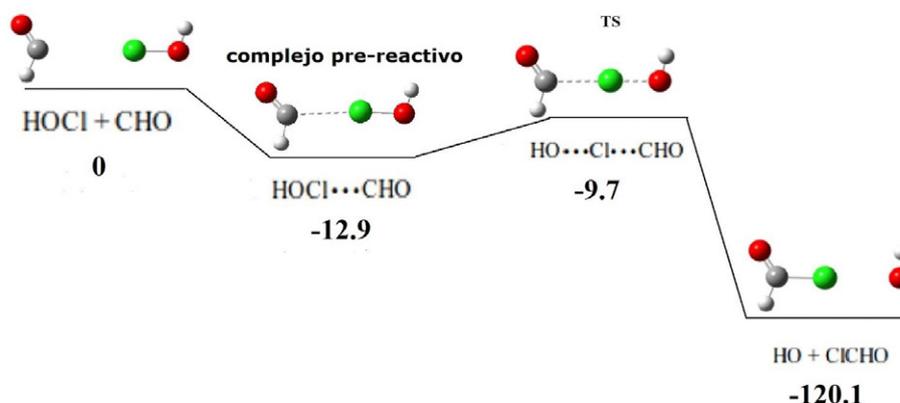


Figura 1. Diagrama de la reacción $CHO + HOCl \rightarrow ClCHO + OH$, con sus respectivas estructuras y energías relativas (en kJ/mol) respecto a los reactivos aislados.

Las reacciones $HOX + CHO$ presentan una energía de activación negativa, lo cual ya se había observado en otras reacciones radical-molécula.² Las constantes cinéticas de estas reacciones se obtuvieron por medio del modelo propuesto por Singleton y Cvetanovic.³ Además se informan las constantes cinéticas globales de 200 a 400 K.

Conclusiones. Se estudiaron los mecanismos de reacción entre el CHO y algunos reservorios de halógeno presentes en la atmósfera. Las propiedades termoquímicas obtenidas se corresponden con los datos experimentales extraídos de la literatura. Estudios experimentales futuros permitirán evaluar el éxito de los modelos cinéticos propuestos.

Referencias bibliográficas

- Wayne, R.P. Chemistry of Atmospheres, 2nd ed.; ClarendonPress: Oxford, UK, 1991.
- Idaboy, A.; Raúl, J.; J. Am. Chem. Soc. **2000**, 122, 3715-3720.
- Singleton, D. L.; Cvetanovic, R. J.J. Am. Chem. Soc. **1976**, 98, 6812.