



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



## 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.<sup>1,2</sup>, Duarte, Darío J. R.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> IQUIBA-NEA (UNNE-CONICET) Avenida Libertad 5460 (3400) Corrientes.

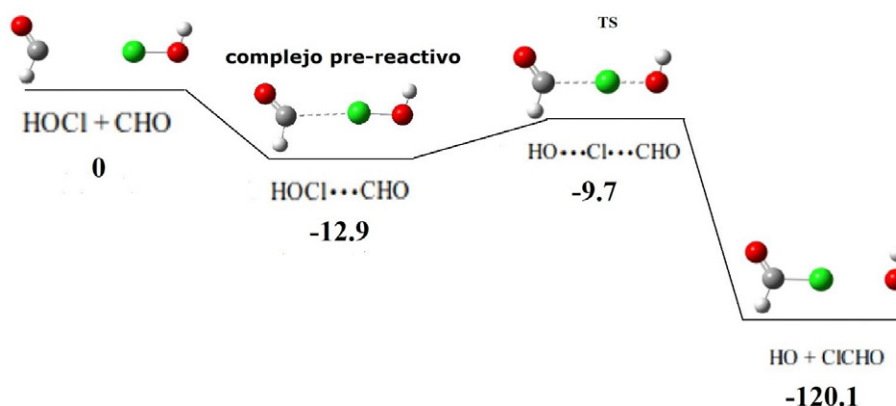
<sup>2</sup> LEMYP (FACENA-UNNE) Avenida Libertad 5460 (3400) Corrientes.

Email de contacto: djr\_duarte@hotmail.com

**Introducción.** El radical formilo (CHO) es un intermediario reactivo de importancia atmosférica.<sup>1</sup> 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.<sup>2</sup> Las constantes cinéticas de estas reacciones se obtuvieron por medio del modelo propuesto por Singleton y Cvetanovic.<sup>3</sup> 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.