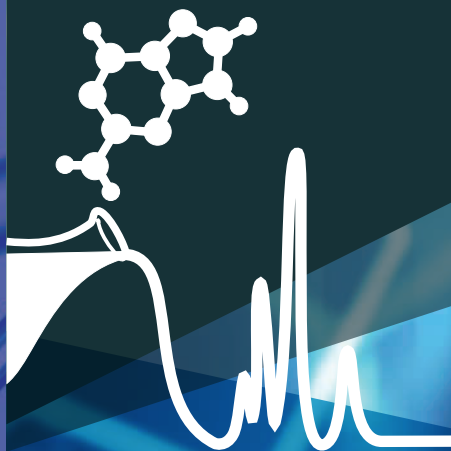


e-book ISBN 978-987-688-210-1



XX Congreso Argentino de Físicoquímica y Química Inorgánica

Néstor M. Correa y Luis A. Otero

Compiladores

16 al 19 de Mayo de 2017

Ciudad de Villa Carlos Paz, Córdoba, Argentina

UniRío
editora

XX Congreso Argentino de Físicoquímica y Química Inorgánica / Néstor Mariano Correa ... [et al.] ; compilado por Néstor Mariano Correa ; Luis Alberto Otero ; ; coordinación general de Néstor Mariano Correa ; Luis Alberto Otero. - 1a ed. - Río Cuarto : UniRío Editora, 2017.

Libro digital, PDF/A - (Académico científica)

Archivo Digital: descarga y online

ISBN 978-987-688-210-1

1. Física. 2. Química. 3. Química Inorgánica. I. Correa, Néstor Mariano II. Correa, Néstor Mariano, comp. III. Otero, Luis Alberto, comp. IV. Correa, Néstor Mariano, coord. V. Otero, Luis Alberto, coord.

CDD 540

XX CONGRESO ARGENTINO DE FÍSICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA

16 al 19 de Mayo de 2017

Néstor M. Correa y Luis A. Otero (*Compiladores*)

2017 © by UniRío editora. Universidad Nacional de Río Cuarto
Ruta Nacional 36 km 601 – (X5804) Río Cuarto – Argentina
Tel: 54 (358) 467 6309
editorial@rec.unrc.edu.ar
www.unrc.edu.ar/unrc/editorial.cdc

ISBN 978-987-688-210-1

Primera Edición: *Abril de 2017*



Este obra está bajo una Licencia Creative Commons Atribución 2.5 Argentina.

http://creativecommons.org/licenses/by/2.5/ar/deed.es_AR

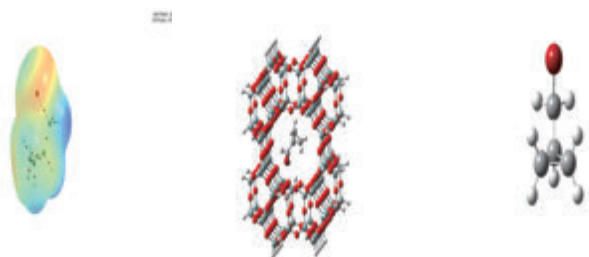
ESTUDIO TEORICO DE LA ESTABILIDAD DEL BROMURO DE METILCICLOPROPANO EN MORDENITA.

Alegre Clara, Zalazar Fernanda* y Peruchena Nélica

Instituto de Química Básica y Aplicada del Nordeste Argentino, IQUIBA-NEA, CONICET-UNNE, Avenida Libertad 5460, (3400) Corrientes, Argentina

*mfzalazar@conicet.gov.ar

La interacción de haluros de alquilo con zeolitas ácidas presenta un gran impacto en muchas aplicaciones industriales, como ser la conversión de haluros de metilo a hidrocarburos sobre H-SAPO-34, donde se propuso a los haluros de alquilo como sustitutos del metanol en la conversión de metanol a gasolina (MTG) y metanol a olefinas (MTO). En un reciente estudio experimental de los parámetros de activación de la reacción de reordenamiento del bromuro de ciclopropilcarbinil en H-MOR,¹ se destacó la capacidad de las zeolitas de actuar como solventes sólidos, como así también se resaltó la carencia de estudios teóricos de la adsorción de bromuros de alquilo sobre zeolitas protonadas, como paso elemental que precede a la ionización del sustrato. El propósito del siguiente trabajo es estudiar el proceso de adsorción del bromuro de metilciclopropano (**1**) sobre la zeolita ácida H-MOR, analizando en profundidad los cambios experimentados por la densidad electrónica y su relación con el rol del catalizador en la asistencia de la ionización del reactivo. Las optimizaciones geométricas y análisis de frecuencias vibracionales se realizaron utilizando el método M06-2X/6-31G(d), empleando un modelo de zeolita 12T/112T (T= Si, Al). El estudio electrónico se realizó mediante el análisis topológico de la distribución de densidad de carga electrónica $\rho(r)$, en el contexto de la Teoría Cuántica de Átomos en Moléculas, QTAIM. Las densidades electrónicas se obtuvieron a nivel M06-2X/6-31++G(d,p), sobre las geometrías optimizadas anteriormente. Los cálculos se realizaron con los programas Gaussian 09 y AIMAll. El complejo adsorbido (**2**) implica una interacción principal entre el Br y el protón del sitio ácido de Brønsted, asimismo la molécula se estabiliza por interacciones débiles con los átomos de oxígeno de la red de catalizador, estas últimas se relacionan con el efecto de confinamiento ejercido por el catalizador.



Referencias

- 1) Arca, H. A.; Gomes, G. C. C; Mota, C. J. A. *New J. Chem.*, **2014**, 38, 2760.