



**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



# CONFERENCIAS PLENARIAS



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

### EVALUACIÓN CINÉTICA TEÓRICA GLOBAL DE LA PIRÓLISIS DE 1-BROMO-3-CLOROPROPANO EN FASE GASEOSA

Badenes, M. Paula<sup>1</sup>, Bracco, Larisa L. B.<sup>1</sup>, Tuccheri, M. Eugenia<sup>1</sup> y Cobos, Carlos J.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, Casilla de Correo 16, Sucursal 4, La Plata (1900), Argentina.  
mbadenes@inifta.unlp.edu.ar

**Introducción.** La pirólisis de hidrocarburos halogenados puede ocurrir a través distintos procesos [1]. En este sentido, resulta interesante analizar la descomposición térmica de dihalocompuestos. En particular, en esta comunicación presentamos una evaluación cinética teórica global en un amplio rango de temperaturas y presiones, de la pirólisis de 1-bromo-3-cloropropano. En investigaciones previas, encontramos que los canales de reacción más accesibles corresponden a la eliminación de los haluros de hidrógeno correspondientes y que proceden a través de estados de transición de cuatro centros. Además, realizamos un estudio de las reacciones de descomposición de los productos generados [2,3]. En esta oportunidad estudiamos el efecto de la presión total, el rendimiento de ambos canales, su conexión con las descomposiciones térmicas de 3-bromopropeno y 3-cloropropeno, y comparamos nuestros resultados con la información experimental disponible [4].

**Resultados.** A partir de cálculos de la teoría del funcional de la densidad (BMK, MN15, entre otros) acoplados al conjunto de bases 6-311++G(3df,3pd), y mediante métodos compuestos de alto nivel (G4, G3B3), obtuvimos los parámetros moleculares, frecuencias vibracionales armónicas y energías de todas las especies estudiadas. Estimamos la entalpía de formación para 1-bromo-3-cloropropano mediante reacciones isodésmicas, encontrando los valores de -26,7 y -25,9 kcal mol<sup>-1</sup> a los niveles G4 y MN15/6-311++G(3df,3pd), respectivamente. Posteriormente, realizamos un estudio cinético entre 600 y 1000 K y en un amplio rango de presiones. Calculamos los coeficientes de velocidad en sus límites de baja y de alta presión. Las curvas de *fall-off* construidas indican que los resultados experimentales [4] se han medido muy cerca de los límites de alta presión. Además, determinamos los coeficientes de velocidad específicos encontrando que el canal que conduce a la eliminación de HBr y 3-cloropropeno ocurre con un rendimiento superior al 70 % respecto al otro canal.

**Conclusiones.** Las investigaciones realizadas nos permitieron estimar los parámetros cinéticos y rendimientos de los dos canales de eliminación de BrCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>Cl y presentar una global y detallada evaluación de la pirólisis del mismo.

#### Referencias

- 1) Macoll, A. *J. Chem. Phys.*, **1949**, 17, 1350-1351.
- 2) Tuccheri, M.E.; Badenes, M.P.; Bracco, L.L.B.; Cobos, C.J, *J. Phys. Chem. A* **2016**, 120, 2285-2294.
- 3) Villarreal, V; Estudio teórico de la descomposición térmica del 3-Cloropropeno de interés ambiental, Tesina de grado para la Lic. en Cs. Químicas UNLP, **2019**.
- 4) Kim, S. H.; Choo, K. Y.; Jung, K-H. *Bull. Korean Chem.*, **1989**, 10, 262-269.