

ABSTRACCIÓN DE ÁTOMO DE HIDROGENO DEL $\text{CH}_3\text{C}(\text{O})\text{O}(\text{CH}_2)_2\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$ POR ÁTOMOS DE Cl Y RADICALES OH

Adriana C. Olleta, Verónica E. Encinas

Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de Jujuy, Gorriti 237, A4600FDC, San Salvador de Jujuy, Argentina. aolleta@fi.unju.edu.ar

Introducción: Teniendo en cuenta el creciente agotamiento de los recursos de energía convencional y los problemas relacionados al cambio climático, ha habido un importante interés por desarrollar combustibles alternativos, como por ejemplo aquellos provenientes de fuentes bioenergéticas.¹ Los principales biocombustibles bajo estudio son los ésteres metílicos de ácidos grasos de cadena larga, el biodiesel.

El biodiesel es un combustible renovable y biodegradable, que posee un atractivo económico y ambiental, el cual puede ser obtenido a través de transesterificación.² Uno de los derivados más importantes del proceso de obtención de biodiesel es la glicerina, la cual puede ser reutilizada mediante proceso de acilación con diferentes ácidos, por ejemplo el ácido acético, obteniéndose así diferentes derivados acilados de la glicerina.

El etilen glicol diacetato, $\text{CH}_3\text{C}(\text{O})\text{O}(\text{CH}_2)_2\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$, es usado como modelo de estudio dada la similitud que este presenta en el comportamiento químico y presión de vapor respecto de los derivados de acilación de la glicerina con ácidos grasos de cadena más largas.³

Trabajos de investigación teórica, relacionados a la química atmosférica de diacetatos, son escasos.

Por lo tanto el objetivo de este trabajo es obtener datos cinéticos y mecanísticos teóricos, de la reacción del etilen glicol diacetato utilizando diferentes oxidantes atmosféricos (átomos de Cl y radicales OH).

Detalles computacionales: Los cálculos fueron realizados con el conjunto de programas Gaussian 09.⁴ Las geometrías y frecuencias vibracionales de reactivos, productos, intermediarios y estados de transición son optimizadas a nivel de teoría MP2/6-31+G(d,p).

Nuestros cálculos teóricos están en buen acuerdo con estudios cinéticos experimentales, que indican que, considerando la simetría de la molécula (C_2), solo dos canales de reacción pueden ser observados en la reacción de Cl + $\text{CH}_3\text{C}(\text{O})\text{O}(\text{CH}_2)_2\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$. Sin embargo para la reacción del OH + $\text{CH}_3\text{C}(\text{O})\text{O}(\text{CH}_2)_2\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$ son posibles tres canales de reacción diferentes.

Referencias:

1. Encinar, J. M.; González, J. F.; Rodríguez-Reinares, A. 2007, Fuel Process. Technol. 88, 513.
2. Meher, L. C., Vidya Sagar, D., Naik, S. N., 2006, Renewable and Sustainable Energy Reviews 10-248.
3. Hurley, M. D.; Ball, J. C., Wallington, T. J., Toft, A., Nielsen, O. J., Bertman, S.; Perkovic, M. 2007, J. Phys. Chem. A 111, 2547–2554.
4. Gaussian 09, Revision A.1, Frisch, M. J.; Trucks, G. W.; Schlegel, H. B.; Scuseria, G. E.; Robb, M. A.; Cheeseman, J. R.; Scalmani, G.; Barone, V.; Mennucci, B.; Petersson, G. A.; Nakatsuji, H.; Caricato, M.; Li, X.; Hratchian, H. P.; Izmaylov, A. F.; Bloino, J.; Zheng, G.; Sonnenberg, J. L.; Hada, M.; Ehara, M.; Toyota, K.; Fukuda, R.; Hasegawa, J.; Ishida, M.; Nakajima, T.; Honda, Y.; Kitao, O.; Nakai, H.; Vreven, T.; Montgomery, Jr., J. A.; Peralta, J. E.; Ogliaro,

F.; Bearpark, M.; Heyd, J. J.; Brothers, E.; Kudin, K. N.; Staroverov, V. N.; Kobayashi, R.; Normand, J.; Raghavachari, K.; Rendell, A.; Burant, J. C.; Iyengar, S. S.; Tomasi, J.; Cossi, M.; Rega, N.; Millam, J. M.; Klene, M.; Knox, J. E.; Cross, J. B.; Bakken, V.; Adamo, C.; Jaramillo, J.; Gomperts, R.; Stratmann, R. E.; Yazyev, O.; Austin, A. J.; Cammi, R.; Pomelli, C.; Ochterski, J. W.; Martin, R. L.; Morokuma, K.; Zakrzewski, V. G.; Voth, G. A.; Salvador, P.; Dannenberg, J. J.; Dapprich, S.; Daniels, A. D.; Farkas, Ö.; Foresman, J. B.; Ortiz, J. V.; Cioslowski, J.; Fox, D. J. Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.