



Sessão de Química
Dia 06/11/14 – 15h40 às 18h40
Unila-PTI - Bloco 09 – Espaço 03 – Sala 03

**ESTUDIO COMPUTACIONAL DE LA DEGRADACIÓN DE COMPUESTOS
ORGÁNICOS VOLÁTILES POR REACCIÓN CON RÁDICALES OH Y ÁTOMOS
DE CLORO.**

Clara Elizabeth Villasboa.

Estudiante de Ingeniería Civil de Infraestructura

Bolsista pibic- FA

clara.villasboa@unila.edu.br

Norma Beatriz Caballero Gonzalez.

Professor adjunto/visitante

Instituto Latino-Americano Da Vida e Da Natureza (ILACVN).

Orientadora

norma.caballero@unila.edu.br

Francisco Javier Arias Ortiz.

Estudiante de Ingeniería de Energías Renovables.

Voluntario

francisco.ortiz@unila.edu.br

Resumen: El trabajo realizado se ha basado en los cálculos computacionales de reacciones de compuestos biogénicos en la atmósfera. Este proyecto tuvo como objetivo el estudio computacional de la degradación de monoterpénoides en la atmósfera como efecto de su reacción con radicales OH y átomos de cloro. Si bien estas reacciones ya han sido estudiadas experimentalmente, con los cálculos computacionales se contribuye a establecer de forma más precisa el mecanismo de reacción energéticamente más favorable. Se planteó el estudio de las reacciones del crotonato de metilo, y crotonato de etilo, pertenecientes a una familia de ésteres instaurados oxigenados ampliamente utilizados en la industria, siendo liberados a la atmósfera a partir de su uso en la producción de cosméticos, champús, jabones de tocador, así como también en los productos de limpieza para el hogar, como detergentes y otros. Su gran utilidad explicaría entonces la causa de las grandes emisiones que se producen a la atmósfera. En este trabajo se han empleado varios programas

computacionales (HIPERCHEM, CHEMSKETCH, y GAUSSIAN 03) para el diseño, cálculo y visualización de las moléculas estudiadas. Con el programa Gaussian 03, se ha realizado una aproximación en la cual se empleó la teoría del funcional de la densidad (DFT). Este método se ha aplicado para predecir las propiedades moleculares tales como estructuras moleculares, frecuencias vibracionales, etc. usando diferentes FUNCIONALES (funciones matemáticas) y diferentes BASES (representaciones matemáticas de los orbitales moleculares), el funcional que se ha seleccionado para los cálculos finales es el funcional B3LYP, ya que este demanda poco tiempo computacional, y por lo tanto es apropiado para realizar los cálculos con moléculas complejas con la base 6-31+G(d,p). Se presentan los resultados obtenidos como ser; camino de reacción más factible a nivel energético del mecanismo propuesto, identificación de los principales modos vibracionales, parámetros geométricos y espectro IR de las dos moléculas estudiadas. Agradecemos a la Fundación Araucaria FA por la bolsa de iniciación científica concedida.

Palabra clave: Biogénicos, monoterpénoides, DFT, química atmosférica, cinética química.