



## ESTUDIO DE LA REACCIÓN ENTRE EL RADICAL HIDROXILO Y VARIOS ACETATOS

Claudia Zavala-Oseguera<sup>1</sup>, Annia Galano<sup>2</sup>, Gabriel Merino<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Universidad de Guanajuato, División de Ciencias Naturales y Exactas, Guanajuato; México.

<sup>2</sup>UAM-Unidad Iztapalapa, Departamento de Química, D. F.; México.

<sup>3</sup>Cinvestav-Unidad Mérida, Yucatán; México.

e-mail: c.zavalaoseguera@ugtomx.onmicrosoft.com

En este trabajo se presentan los resultados del estudio cinético, en fase gas, de la reacción entre varios acetatos (acetato de metilo, acetato de etilo, acetato de propilo, acetato de isopropilo, acetato de butilo, acetato de secbutilo y acetato de tercbutilo) y el radical hidroxilo. Las emisiones atmosféricas de estos acetatos pueden provenir tanto de fuentes antropogénicas (debido su uso como solventes en la manufacturación de perfumes y de saborizantes), como de fuentes naturales.<sup>1-3</sup> La reacción de estos compuestos con el radical hidroxilo es una de las principales vías de degradación en la atmósfera diurna.<sup>4</sup> Para evaluar el impacto ambiental de su degradación atmosférica, es necesario determinar el mecanismo de la reacción, la velocidad de descomposición de cada canal y la proporción de los productos formados en esta reacción.

En el estudio cinético es posible discernir dos etapas. Inicialmente, se llevó a cabo la localización y caracterización de los puntos estacionarios que conforman todos los canales de reacción. Esto se realizó al nivel M06-2x/6-311++G(d,p), tal como está implementado en el programa Gaussian 09. Finalmente, se calcularon las constantes de velocidad en un intervalo de temperaturas de 240-500 K, para lo cual se usó el programa Polyrate 9.1.

<sup>1</sup>Wallington, T. J.; Dagaut, P.; Liu, R.; Kurylo, M. J. *Int. J. Chem. Kinet.* **1988**, *20*, 177-186.

<sup>2</sup>El Boudali, A.; Le Calvé, S.; Le Bras, G.; Mellouki, A. *J. Phys. Chem.* **1996**, *100*, 12364-12368.

<sup>3</sup>Lam, K.-Y.; Davidson, D. F.; Hanson, R. K. *J. Phys. Chem. A* **2012**, *116*, 1229-12241.

<sup>4</sup>Cambell, I. M.; Parkinson, P. E. *Chem. Phys. Lett.* **1978**, *53*, 385-387.