



## DESCOMPOSICIÓN TÉRMICA DEL TRIPERÓXIDO DE DIETILCETONA EN METACRILATO DE METILO: COMPARACIÓN CON ESTIRENO MEDIANTE ESTUDIO TÉORICO Y EXPERIMENTAL DESDE EL ESTADO INICIAL DE SOLVATACIÓN

Karla Delgado<sup>1</sup>, Graciela Morales<sup>1\*</sup>, Adriana Espinoza<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Síntesis de Polímeros, Centro de Investigación en Química Aplicada (CIQA); Saltillo, Coahuila México.

e-mail: delgadokarla\_21@hotmail.com

La constante de la velocidad de descomposición ( $k_d$ ) del triperóxido de dietilcetona (TPDEC, 3,3,6,6,9,9-hexaetil-1,2,4,5,7,8-hexaoxaciclononano) en metacrilato de metilo (MMA) fue determinada mediante el estudio de la cinética de descomposición térmica en el intervalo de temperaturas de 110-140°C. La  $k_d$  para el TPDEC calculada experimentalmente en MMA fue 2.4 veces menor (a 130°C) comparada con la determinada y reportada previamente en estireno (St). La interpretación de los resultados se hizo considerando no sólo el carácter polar del disolvente, sino también otros factores como la reactividad del monómero e interacciones soluto-solvente. Las diferencias observadas en las constantes de velocidad de descomposición para los sistemas TPDEC-MMA y TPDEC-St fueron explicados con cálculos de la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT), en términos de solvatación del estado inicial molecular. Este trabajo aporta ideas mecánísticas entre las interacciones que tienen lugar entre el triperóxido multi-funcional cíclico TPDEC y los monómeros de vinílicos; St y MMA, durante la las primeras etapas de polimerización de los mismos.