



Estudio teórico de los mecanismos de descomposición de peróxidos

Flora Beltrán¹, Adriana Espinoza¹, Luis Ramos¹, Eduardo Ramírez¹, Gabriel Merino²

¹Centro de Investigación en Química Aplicada, Boulevard Enrique Reyna 140 C.P. 25294
Saltillo, Coahuila, México

²Centro de Investigación y de Estudios Avanzados Unidad Mérida, Depto. Física Aplicada, Km
6 Antigua carretera a Progreso, Cordemex 97310 Mérida, Yucatán, México
email:flora_beltran@hotmail.com

En este trabajo se presenta el estudio teórico de los mecanismos de descomposición de tres diferentes peróxidos: peróxido de dicumilo (DCP), di-(*terbutilperoxiisopropil*) benceno (Perkadox) y 2,5-dimetil-2,5-di(*terbutilperoxi*) hexano (Luperox), los cuales se emplean comúnmente como agentes de entrecruzamiento entre un material elástico y un material termoplástico¹ y como resultado se obtiene un material huloso con características de un elastómero vulcanizado de forma convencional pero que a su vez puede ser procesarse en fundido como un termoplástico, a los que se les designa como Vulcanizados TermoPlásticos (TPV).² Sin embargo, a nivel molecular se tiene la interrogante de cómo se lleva a cabo la reacción de entrecruzamiento entre éstos materiales y cómo esto influye en su desempeño. Por lo tanto, el primer paso a seguir es elucidar el mecanismo de descomposición del peróxido. En este sentido, primero, se obtuvo la conformación de mínima energía de cada molécula mediante Bilatu. Partiendo del estado de transición de cada una de ellas se obtuvieron las coordenadas intrínsecas de reacción (IRC) para describir su mecanismo de descomposición. Las energías de activación de cada molécula de peróxido obtenidas teóricamente y sus rutas de descomposición coinciden con las reportadas en la literatura y obtenidas de forma experimental mediante la técnica de Calorimetría Diferencial de Barrido (DSC).³ Los cálculos de optimización, estado de transición y mecanismo de reacción de cada molécula se llevaron a cabo con un nivel de teoría B3LYP/6-31++G(d,p) en Gaussian09.

1. Geoffrey, H.; Kricheldorf, H. R.; Quirk, R.P., *Thermoplastic Elastomers*. 3 ed.; Hanser: Munich, 2004; p 143-179.

2. Naskar, K.; Noordermeer, J. W. M., Influence of premade and in situ compatibilizers in polypropylene/ethylene-propylene-diene terpolymer elastomeric olefins and thermoplastic vulcanizates. *J. Appl. Polym. Sci.* **2006**, 100, 3877-3888.

3. Das, M.; Shu, C. M., A green approach towards adoption of chemical reaction model on 2,5-dimethyl-2,5-di-(*tert-butylperoxy*)hexane decomposition by differential isoconverional kinetic analysis. *J. Hazard. Mater.* **2016**, 301, 222-232.