



Journal of the Mexican Chemical Society

ISSN: 1870-249X

editor.jmcs@gmail.com

Sociedad Química de México
México

Castañeda, Romina; Iuga, Cristina; Álvarez-Idaboy, J. Raúl; Vivier-Bunge, Annik
Rate Constants and Branching Ratios in the Oxidation of Aliphatic Aldehydes by OH Radicals
under Atmospheric Conditions
Journal of the Mexican Chemical Society, vol. 56, núm. 3, julio-septiembre, 2012, pp. 316-324
Sociedad Química de México
Distrito Federal, México

Disponible en: <http://www.redalyc.org/articulo.oa?id=47524533014>

Resumen

En este trabajo se presenta un estudio teórico del mecanismo de las reacciones de radicales OH con aldehídos alifáticos de uno a cinco carbonos. Mostramos que, a partir del butanal, el camino de abstracción del átomo de hidrógeno unido al CB se vuelve relativamente importante y contribuye moderadamente a la constante de velocidad total. Las constantes calculadas con el método CCSD(T)/6-311++G**//BHandHLYP/6-311++G** reproducen perfectamente los datos experimentales, respaldando así el mecanismo propuesto. Se obtienen energías de activación negativas, en acuerdo con la dependencia anti-Arrhenius observada experimentalmente. La proporción entre las constantes de velocidad para las abstracciones aldehídica y del C no se modifica apreciablemente al aumentar la temperatura de 230 a 330 K.

Palabras clave

Reacciones radical-molécula, reacciones atmosféricas, mecanismos de reacción, energía de activación negativa, complejos pre-reactivos.

- ▶ Cómo citar el artículo
- ▶ Número completo
- ▶ Más información del artículo
- ▶ Página de la revista en redalyc.org

redalyc.org

Sistema de Información Científica

Red de Revistas Científicas de América Latina, el Caribe, España y Portugal

Proyecto académico sin fines de lucro, desarrollado bajo la iniciativa de acceso abierto