

ESTUDIO DE LA DESCOMPOSICIÓN EN FASE GASEOSA DE TRIFLUOROMETILNITRATO

Cardona Alejandro¹, Salas Juana¹, Malanca Fabio E.¹ y Burgos Paci Maximiliano.¹

¹ INFIQC - CONICET- Departamento de Físicoquímica, Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Nacional de Córdoba, Ciudad Universitaria (X5000HUA), Córdoba. acardona@unc.edu.ar

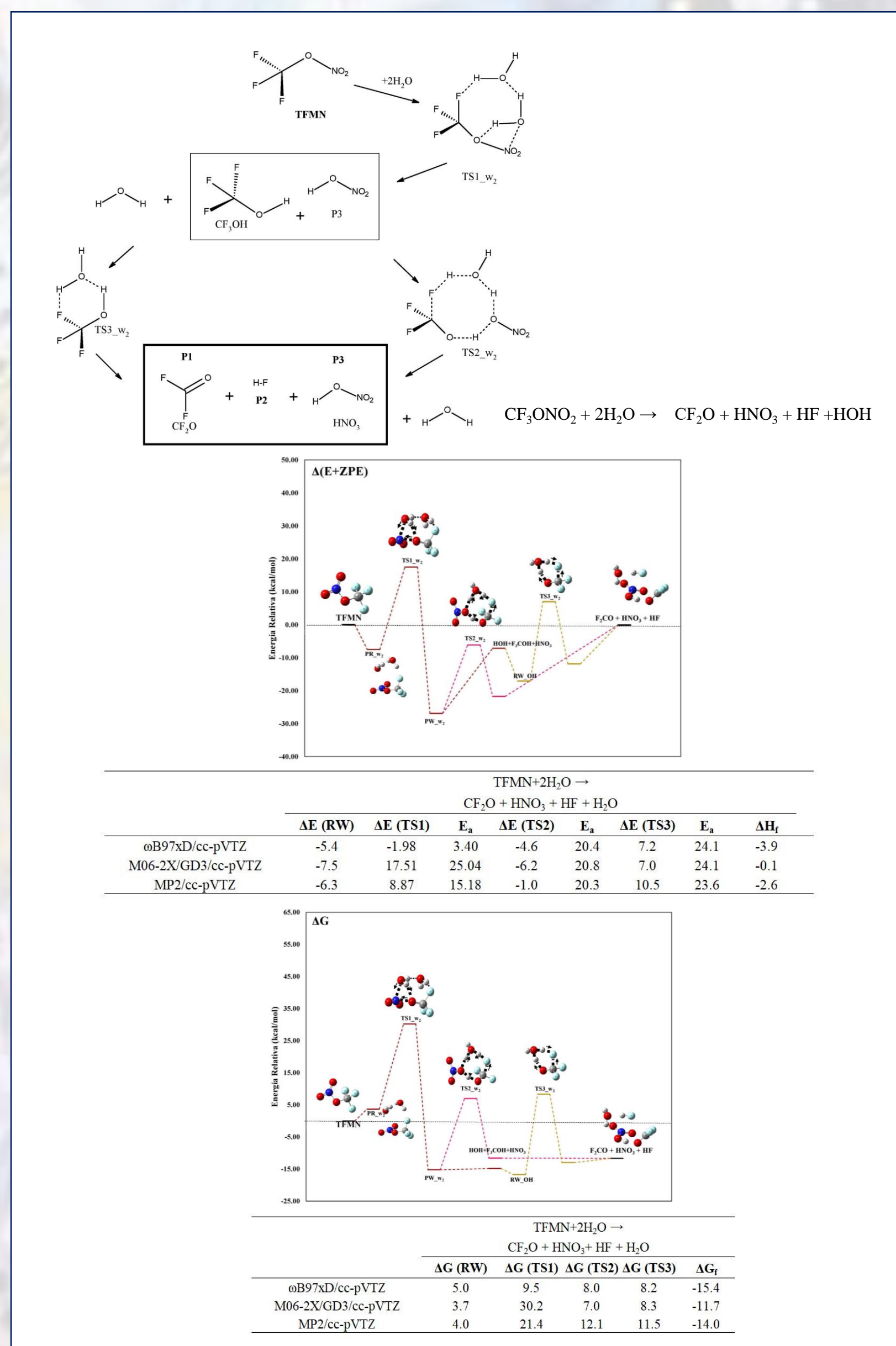
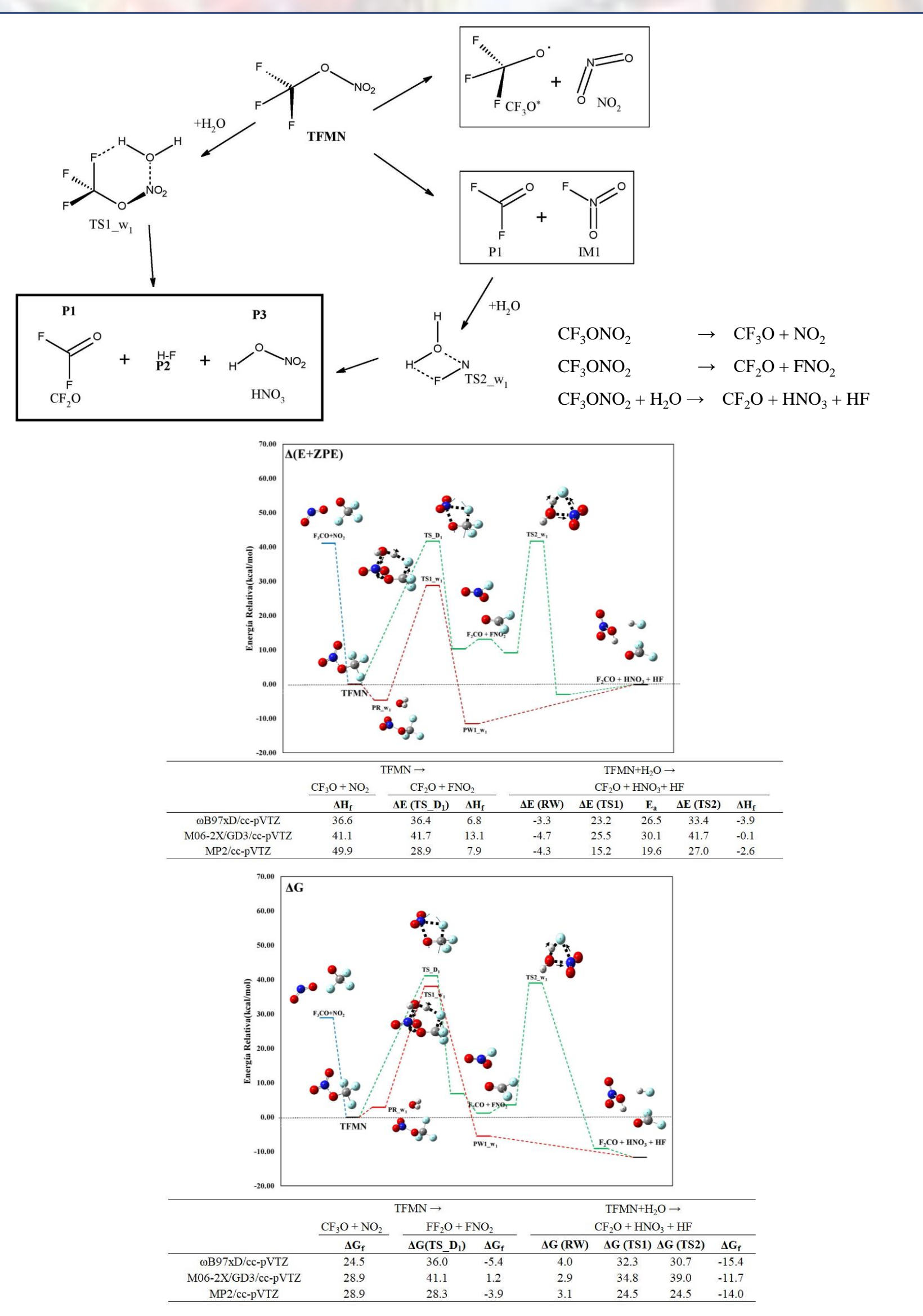
INTRODUCCIÓN

Las emisiones antropogénicas de compuestos hidrofluorocarbonados (HFCs) llevan a la formación de radicales fluorados en la atmósfera. Esto conlleva al interés de comprender el destino atmosférico de estos compuestos y sus productos de degradación, especialmente radicales como el $\text{CF}_3\text{O}^\bullet$. En este trabajo se estudió la degradación en presencia y ausencia de moléculas de agua del trifluorometil nitrato (TFMN) producido en la reacción de radicales CF_3O con NO_2 . El objetivo principal es proponer un mecanismo de degradación y validar los resultados obtenidos experimentalmente.

METODOLOGIA

Se usaron los métodos DFT con corrección por dispersión de Grimme DFT-GD3²: M06-2X³-GD3 y ωB97XD^1 y el método *ab initio* MP2⁴ en combinación con la función de base de Dunning⁵ cc-pVTZ. Todos los cálculos de estructura electrónica fueron llevados a cabo empleando el programa Gaussian 16.

RESULTADOS



CONCLUSIONES

Los resultados experimentales y computacionales sugieren que la descomposición del TMNF es acelerada por la interacción con moléculas de agua que permiten la formación de estados de transición cíclicos de baja energía que favorecerían la reacción. Se observó que, al igual que en el sistema $\text{CF}_3\text{OH} + \text{H}_2\text{O}$,^{2,3} el H₂O sirve como un "intercambiador de hidrógeno" entre el oxígeno y el flúor promoviendo la descomposición en HONO₂, CF₂O y HF a través de la reducción de la barrera de activación.

BIBLIOGRAFIA.

- Wallington, T.J., Sulbaek Andersen, M.P., Nielsen, O.J. Adv. Atmos. Chem. 2016, 1, 305–402.
- Grimme, S. Density functional theory with London dispersion corrections. Wiley Interdiscip. Rev. Comput. Mol. Sci. 1, 211–228 (2011).
- Zhao, Y. & Truhlar, D. G. The M06 suite of density functionals for main group thermochemistry, thermochemical kinetics, noncovalent interactions, excited states, and transition elements: Two new functionals and systematic testing of four M06-class functionals and 12 other function. Theor. Chem. Acc. 120, 215–241 (2008).
- Head-Gordon, M. & Head-Gordon, T. Analytic MP2 frequencies without fifth-order storage. Theory and application to bifurcated hydrogen bonds in the water hexamer. Chem. Phys. Lett. 220, 122–128 (1994).
- Dunning, T. H. Gaussian basis sets for use in correlated molecular calculations. I. The atoms boron through neon and hydrogen. J. Chem. Phys. 90, 1007–1023 (1989).
- Frisch, M. J. et al. Gaussian 16, revision C. 01. (2019).

AGRADECIMIENTOS.