



Contribution ID : 113

Type : **Poster**

Determinación Teórica y Experimental de las rutas de disociación de Metil Acrilato ($\text{CH}_2=\text{CHCOOCH}_3$) a 193 nm

Thursday, 13 August 2015 17:30 (1:00)

Abstract content

Reportamos las rutas de disociación originadas durante la fotólisis a 193 nm de Metil Acrilato ($\text{CH}_2=\text{CHCOOCH}_3$, MA) usando VUV Espectroscopia Translacional de Fotofragmentación basada en radiación sincrotrón, y se ha iniciado su validación mediante cálculos perturbacionales MP2 y Hartree-Fock. Para esto, recolectamos Espectros de Masa de Tiempo de Vuelo (TOF-MS) de los fragmentos producidos a partir de la disociación del MA, en un intervalo de masa/carga (m/z) = +14 a +86, y en ángulos de laboratorio $\theta_{\text{lab}} = 20^\circ$ a 50° . Los datos obtenidos TOF-MS se ajustaron por simulación con programas de convolución ad hoc, permitiendo así que se originaran diagramas de distribución de probabilidad de liberación de energía translacional. A través de estos diagramas se ha logrado el establecimiento de las principales rutas de disociación primarias y secundarias. Se identificó la presencia de los canales de disociación primaria ($\text{CH}_2\text{CHCHO} + \text{HCOH}$, $\text{CH}_2\text{CHCHO} + \text{CH}_2\text{O}$, $\text{CH}_2\text{CHCO} + \text{CH}_2\text{OH/CH}_3\text{O}$), secundaria ($\text{CH}_2\text{CHCHO} \rightarrow \text{CH}_2\text{CH} + \text{HCO}$, $\text{CH}_2\text{CHCHO} \rightarrow \text{CH}_2\text{CHCO} + \text{H}$) y de tres cuerpos ($\text{CH}_2\text{O} + \text{CH}_2\text{CH}_2 + \text{CO}$, $\text{CH}_2\text{CH}_2 + \text{CO}_2 + \text{CH}_2$, $\text{CO}_2 + \text{CH}_3 + \text{CH}_2\text{CH}$), así como datos termoquímicos relevantes a este sistema. Se ha iniciado la confirmación de los resultados experimentales con la proyección de una superficie de energía potencial para esta fotodisociación, y a la fecha se ha logrado obtener energías correlacionales, las energías del Punto Cero (ZPE) y la optimización geométrica de toda las especies detectadas.

Summary

Primary author(s) : Mr. QUIROZ-CARDOSO, Oscar (Departamento de Ingeniería Química y Bioquímica, Instituto Tecnológico de Zacatepec)

Co-author(s) : Mr. DOMÍNGUEZ-FLORES, Orlando (Departamento de Ingeniería Química y Bioquímica, Instituto Tecnológico de Zacatepec); Mr. SANTANA-HERNÁNDEZ, Uriel (Departamento de Ingeniería Química y Bioquímica, Instituto Tecnológico de Zacatepec); Dr. LEE, Shih-Huang (National Synchrotron Radiation Research Center); Dr. RODRÍGUEZ-HERNÁNDEZ, Annia (Laboratorio Nacional de Genómica para la Biodiversidad – CINVESTAV); Dr. HERNÁNDEZ-LAMONEDA, Ramón (Centro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos); Dr. QUINTO-HERNANDEZ, Alfredo (Departamento de Ingeniería Química y Bioquímica, Instituto Tecnológico de Zacatepec)

Presenter(s) : Mr. QUIROZ-CARDOSO, Oscar (Departamento de Ingeniería Química y Bioquímica, Instituto Tecnológico de Zacatepec)

Session Classification : Posters II