

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

ESTUDIO FOTOQUÍMICO DE CONTAMINANTES ATMOSFÉRICOS

Arango Hoyos, Bryan Elith

Romano, Rosana Mariel (Dir.)

Centro de Química Inorgánica "Dr. Pedro J. Aymonino" (CEQUINOR). Facultad de Ciencias Exactas, UNLP.

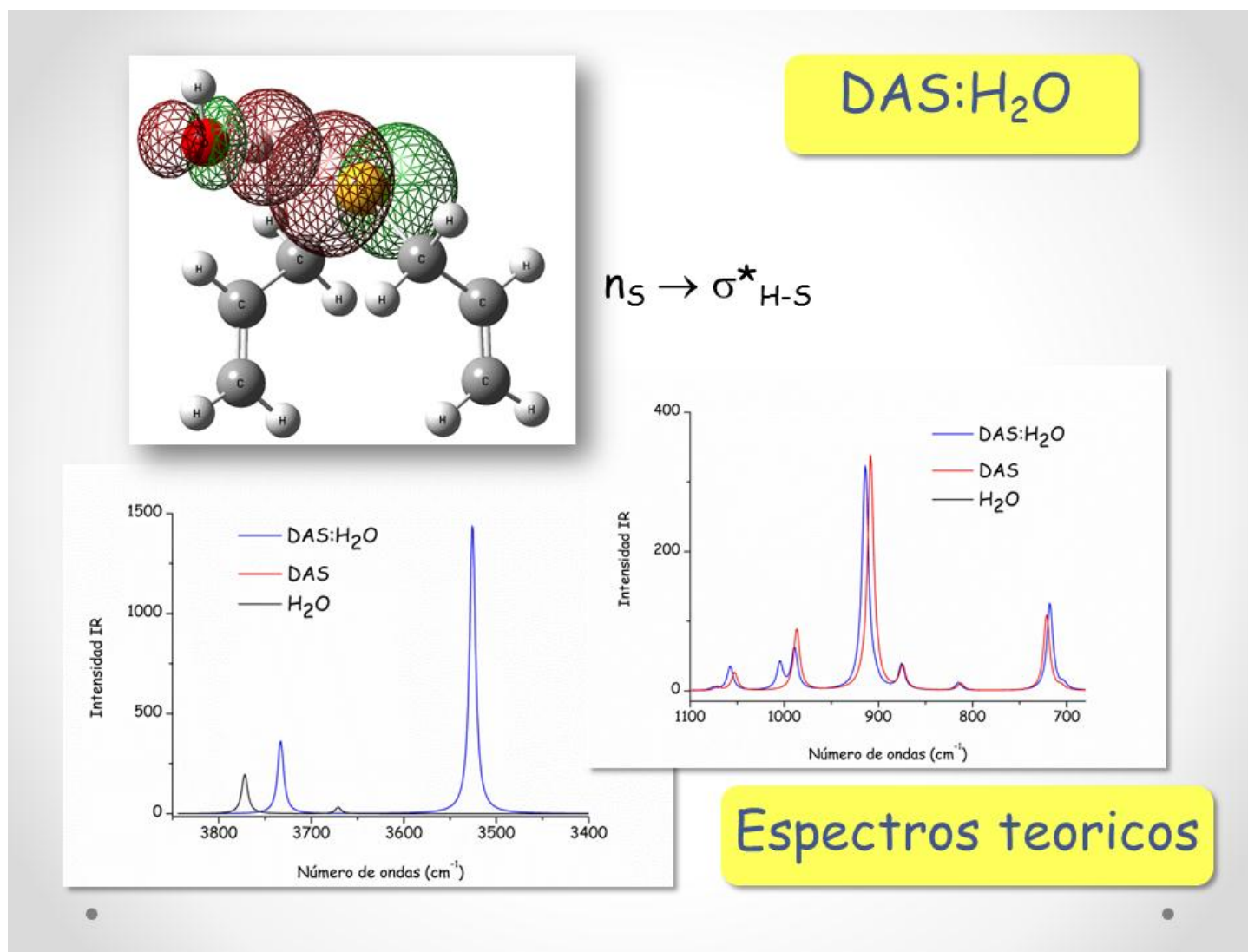
bryan.elith.arango.hoyos@quimica.unlp.edu.ar

PALABRAS CLAVE: Temperaturas Criogénicas, Matriz Rígida, FTIR y Raman.

PHOTOCHEMICAL STUDY OF ATMOSPHERIC POLLUTANTS

KEYWORDS: Cryogenic Temperatures, Rigid Matrix, FTIR and Raman.

Resumen gráfico



Resumen

Este trabajo es parte de un trabajo de Tesis más amplio, en el que se investiga la estabilidad de compuestos orgánicos volátiles a radiación de diferente energía, y las reacciones con especies presentes en la atmósfera en presencia o ausencia de radiación. En particular se realizan estudios en fase gaseosa y en matrices de gases inertes a temperaturas criogénicas. Esta técnica consiste en el aislamiento de una especie en una matriz rígida e inerte. En este trabajo se empleó Ar a una temperatura entre 10 y 15 K. En todos estos estudios se realiza un seguimiento in-situ de las reacciones mediante una espectroscopia FTIR o Raman. Esta metodología permite el aislamiento y estudio de especies intermediarias reactivas, radicales libres y complejos moleculares, de fundamental importancia para la determinación de mecanismos de reacción químicos o fotoquímicos. Hemos demostrado en varios sistemas el rol que un complejo molecular juega en el mecanismo de una reacción, por ejemplo, dando lugar en primer lugar a un producto que no es el más estable, pero es el que se ve favorecido por la geometría del complejo. Es por este motivo que pueden considerarse como “complejos prerreactivos”. En este trabajo se estudiaron reacciones que involucran dos compuestos azufrados: el sulfuro de dialilo, que llamaremos DAS,1 que es un compuesto emitido por algunas plantas (es por ejemplo uno de los volátiles del ajo) y el tiopropionato de S-alilo, SATP, que es un tioéster,

perteneciente a una familia de compuestos que puede generarse a partir de fitoplancton en ambientes marinos. En general los compuestos orgánicos que contienen azufre son altamente reactivos y juegan un papel clave en la formación de la lluvia ácida y en la producción de aerosoles atmosféricos.

El radical OH se preparó a través de la fotólisis del peróxido de hidrógeno en fase gaseosa. El H_2O_2 , que es inestable en estado gaseoso, se obtuvo por calentamiento de un aducto cristalino 1:1 $(NH_2)_2C=O:H_2O_2$, previamente sintetizado y caracterizado. Dependiendo de las condiciones experimentales, pueden obtenerse también moléculas de H_2O , a partir de la descomposición parcial del peróxido de hidrógeno. Por este motivo se realizaron experiencias depositando mezclas de COV: H_2O_2 (en ausencia y en presencia de radiación) y COV: H_2O diluidas en Ar en una ventana enfriada a aproximadamente 10 K. A partir del análisis de los espectros FTIR de las mezclas con respecto a los espectros de los monómeros, y la comparación con los espectros teóricos calculados con métodos de la Teoría de los Funcionales de la Densidad fue posible caracterizar vibracionalmente los complejos $DAS\cdots H_2O$, $DAS\cdots H_2O_2$, $DAS\cdots HO$, $SATP\cdots H_2O$, $SATP\cdots H_2O_2$ y $SATP\cdots HO$.

Multimedia

<http://sedici.unlp.edu.ar/handle/10915/114325>