

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

**ESTUDIO CINÉTICO TEÓRICO Y EXPERIMENTAL DE LA DEGRADACIÓN ATMOSFÉRICA DE
PLAGUICIDAS DE POTENCIAL RIESGO PARA EL MEDIO AMBIENTE**

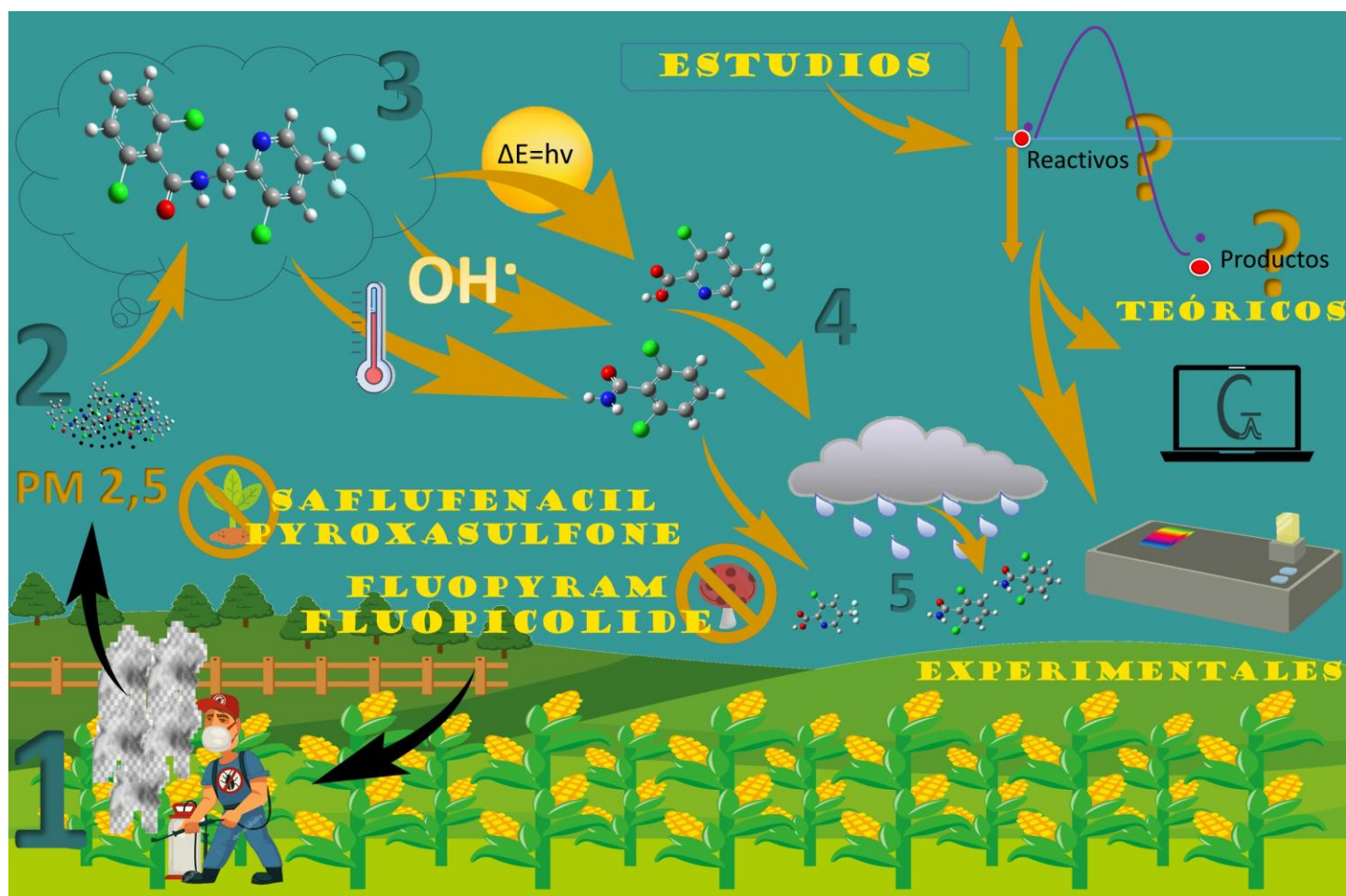
Espinosa Manrique, Wilfred Edilberto

Tucceri Eugenia (Dir.); Badenes Paula (Dir.)

Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA)- Facultad de Ciencias Exactas, UNLP.

wilfredesp@gmail.comPALABRAS CLAVE: Plaguicidas de Interés Atmosférico, Cinética de Degradación, Ab Initio y DFT.**THEORETICAL AND EXPERIMENTAL KINETIC STUDY OF ATMOSPHERIC DEGRADATION OF PESTICIDES OF THE
POTENTIAL RISK TO THE ENVIRONMENT**KEYWORDS: Pesticides of Atmospheric Interest, Degradation Kinetic, Ab Initio and DFT.

Resumen gráfico



Resumen

¿Qué nos motivó a hacer este trabajo?

La demanda de alimentos por parte de una población mundial en constante crecimiento ha generado un aumento significativo en los últimos años del uso de plaguicidas como una estrategia para mejorar la producción en el sector agrícola. Se estima que una cantidad entre el 15% y 40% de los plaguicidas aplicados a un cultivo se dispersan en la atmósfera por procesos como la volatilización y la pulverización, estos se pueden adherir a partículas de aerosol en la atmósfera y de esta manera ser transportados a grandes distancias. A lo largo de este transporte pueden sufrir procesos de degradación térmica, fotolítica o reaccionar con diferentes radicales presentes en la atmósfera, lo que puede conllevar a la producción de moléculas con efectos más tóxicos que los compuestos originales.

El entendimiento de los procesos de degradación, la identificación de los productos que se originan y sus interacciones con otras especies atmosféricas es fundamental para establecer su comportamiento y conocer su posible impacto ambiental. Sin embargo, la medición de estas moléculas e interacciones in situ no es siempre factible a causa de su rápida disolución. Como una herramienta alternativa surge el modelado teórico de estos procesos que permiten estimaciones de propiedades que, validado con trabajos experimentales, constituyen herramientas muy valiosas en la interpretación de las medidas de monitoreo.

¿Cuál es nuestro objetivo?

Estudiar la cinética teórica y experimental de la degradación atmosférica química y fotoquímica de plaguicidas de potencial riesgo para el medio ambiente (pyroxasulfone, saflufenacil, fluopyram y fluopicolide).

¿Qué metodología planteamos?

Se caracterizarán molecular, espectroscópica y energéticamente los compuestos de interés. Luego, se estudiará la cinética de las posibles vías de descomposición térmica, fotolítica y de sus reacciones con el radical OH. También se caracterizarán los intermediarios de reacción y los estados de transición involucrados a través de simulaciones hechas por modelos computacionales empleando una metodología basada en cálculos de orbitales moleculares ab initio de alto nivel y de funcionales de la densidad (DFT) mediante el software Gaussian 09. Se determinarán de manera experimental los espectros UV-Vis y se evaluarán las vías de degradación fotoquímica. Así, se podrán estimar las vidas medias atmosféricas (químicas y fotoquímicas) de cada uno y también sistematizar los resultados obtenidos a fin de evaluar el impacto atmosférico de estos pesticidas. Los estudios cinéticos se realizarán mediante teorías mecano-estadísticas bien establecidas.

Multimedia

<http://sedici.unlp.edu.ar/handle/10915/113991>