

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

ESTUDIO TEÓRICO DE LA REACCIÓN DE OZONÓLISIS DE ALQUENOS. FORMACIÓN DE INTERMEDIARIOS DE CRIEGEE Y SU DESTINO EN LA ATMÓSFERA

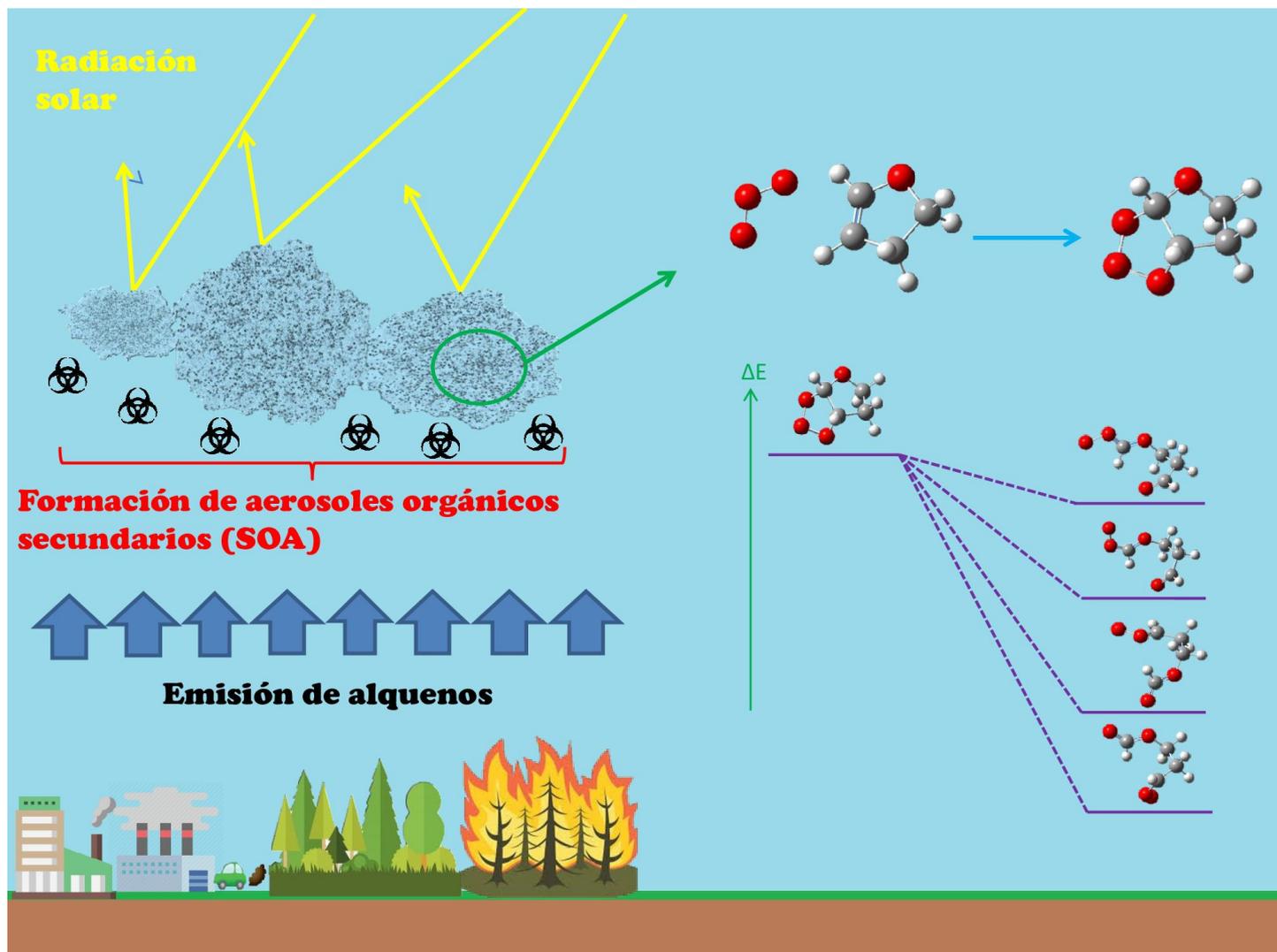
Villarreal, Valentín

Tucceri, Maria Eugenia (Dir.); Bracco, Larisa Laura Beatriz (Codir.)

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

villarreal@inifta.unlp.edu.ar**PALABRAS CLAVE:** Cinética Química y Fotoquímica, Química de la Atmosfera, Química Computacional.**THEORETICAL INVESTIGATION OF THE REACTION OF OZONOLYSIS OF ALKENES, FORMATION AND FINAL DESTINATION IN THE AMOSPHERE OF CRIEGEE INTERMEDIARIES****KEYWORDS:** Chemical Kinetics and Photochemistry, Atmospheric Chemistry, Computational Chemistry.

Resumen gráfico



Resumen

Es sabido que los aerosoles juegan un papel relevante en el sistema climático ya que intervienen en el balance radiativo de manera directa, al modificar la cantidad de radiación incidente o reflejada por la superficie terrestre, o de manera indirecta al actuar sobre la cubierta nubosa como núcleos de condensación. Según los últimos informes del Grupo Intergubernamental de Expertos sobre el Cambio Climático (IPCC), el alto grado de desconocimiento del impacto de los aerosoles sobre el clima está reconocido como la principal dificultad a la hora de evaluar el efecto de las emisiones antropogénicas. En este sentido, el estudio de estos sistemas resulta primordial para el tratamiento de problemáticas actuales como la contaminación atmosférica y el calentamiento global.

Los aerosoles orgánicos secundarios (SOA) constituyen hasta el 70% de la masa orgánica presente en la contaminación urbana, y se originan a partir de reacciones químicas en fase gaseosa de compuestos orgánicos y especies presente en la atmósfera. Entre ellas, se encuentran las reacciones de los alquenos con el ozono -denominadas ozonólisis- caracterizadas por ser altamente exotérmicas con numerosas vías posibles de reacción en función de las diferentes condiciones fisicoquímicas ambientales en las que transcurren. Esta versatilidad, en cuanto a la formación de productos, se debe a la existencia de una especie intermediaria muy reactiva que se conoce como "Intermediario de Criegee".

Dado el interés ambiental y la limitación experimental en el estudio de estos procesos, se propone llevar a cabo un estudio teórico detallado de la reacción de ozonólisis de diversos alquenos, con el fin de evaluar los distintos intermediarios de Criegee que se generan, sus conformaciones, rendimientos y la reactividad de los mismos con distintas especies de interés atmosférico.

El estudio tratará con los siguientes alquenos: isopreno, 2,3-dihidrofurano, 2,5-dihidrofurano, limoneno, α -pineno, limonool y α -terpenol. La elección de estos compuestos se debe a que son algunos de los compuestos orgánicos volátiles (VOC) emitidos mayoritariamente a la atmósfera.

La metodología teórica a emplear se basa fundamentalmente en cálculos de orbitales moleculares ab initio y cálculos de la teoría del funcional de la densidad (DFT), accesibles en el programa Gaussian 09. Mediante modelos mecano-cuánticos se podrán optimizar geometrías moleculares, determinar frecuencias vibracionales armónicas y anarmónicas, y establecer la energética de las especies reaccionantes y de los estados de transición involucrados. La información molecular obtenida se empleará en la realización de estudios cinéticos para determinar coeficientes de velocidad de reacciones, sus productos y los rendimientos de reacción en cada caso particular.

Multimedia

<http://sedici.unlp.edu.ar/handle/10915/113951>