

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

CINÉTICA DE LAS REACCIONES DE RADICALES CLOROCARBONADOS DE INTERÉS ATMOSFÉRICO

Gómez, Nicolás Damián

Badenes, María Paula (Dir.), Tucceri, María Eugenia (Codir.)

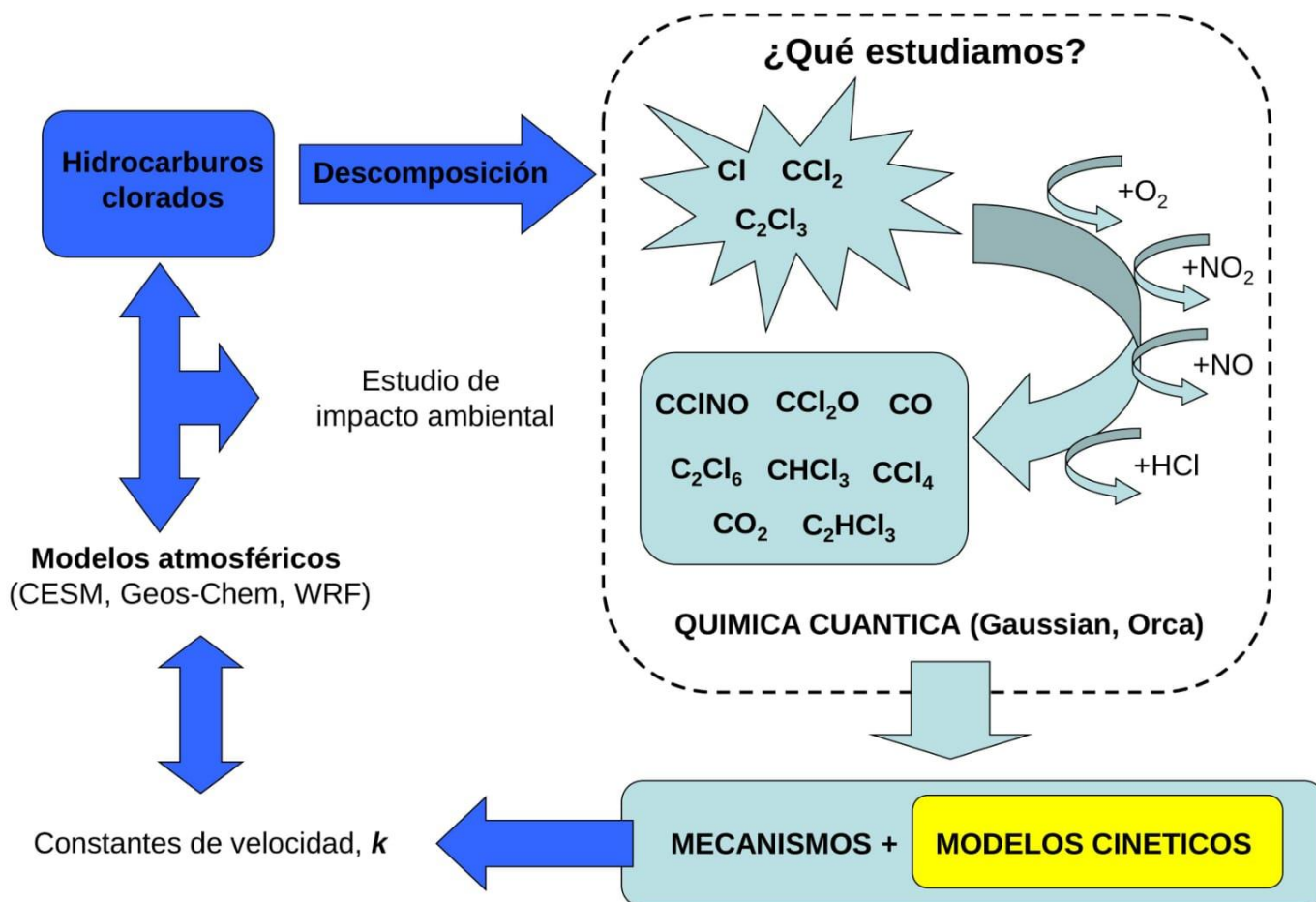
Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA)
nicodgomez@inifta.unlp.edu.ar

PALABRAS CLAVE: cinética química, química cuántica, ciencias de la atmosféricas.

CHEMICAL KINETICS OF CHLOROCARBON RADICALS OF ATMOSPHERIC INTEREST

KEYWORDS: chemical kinetics, quantum chemistry, atmospheric science

Resumen gráfico



Resumen

Los clorofluorocarburos se encuentran entre los contaminantes troposféricos de origen antropogénico más importantes. Estos compuestos han sido empleados principalmente en la producción de refrigerantes, aerosoles y solventes. En las últimas décadas, y a partir del Protocolo de Montreal, se han ido reemplazando por hidrocarburos parcialmente halogenados, que poseen un menor impacto en la destrucción del ozono estratosférico. Sin embargo, las emisiones no reguladas de estos compuestos podrían tener un impacto ambiental importante. Por ejemplo, en estudios recientes se ha encontrado que las emisiones globales de CHCl_3 se han ido incrementando y podrían afectar de manera significativa la recuperación del ozono estratosférico. La descomposición de las especies clorocarbonadas en las zonas superiores de la atmósfera contribuye a la destrucción de la capa de ozono y a la oxidación de diversos compuestos, dando lugar a la formación de otros contaminantes. Es por ello que en las últimas décadas ha crecido el interés en la química atmosférica de compuestos clorocarbonados. Existe una gran necesidad de eliminar cantidades importantes de ellos, siendo los procesos comúnmente empleados en el tratamiento de sus desechos los de combustión y pirólisis. En especial los radicales clorados son especies altamente reactivas y, por lo tanto, es muy importante entender

los mecanismos de reacción de los mismos, así como determinar las constantes de velocidad de las reacciones en las condiciones reinantes en la química de la atmósfera y de los procesos de combustión. Además, en la última década los avances alcanzados en el desarrollo de láseres de alta potencia, y en la química orgánica y computacional han incrementado el interés en el estudio de la cinética de radicales carbeno y vinilo halogenados. Es por ello que en el presente plan de trabajo postdoctoral se propone estudiar la cinética de las reacciones de diversos radicales clorocarbonados generados en procesos de hidrocarburos clorados relevantes en la química atmosférica y de las combustiones. Los mecanismos involucrados pueden conducir a la formación de contaminantes, y a su vez a la eliminación de átomos de cloro, favoreciendo el desarrollo de ciclos catalíticos de consumo de ozono estratosférico. Se propone la utilización de métodos de química cuántica para determinar parámetros moleculares, y entalpías y barreras de reacción. Luego, se determinarán las constantes de velocidad de las reacciones a partir de modelos cinéticos bien establecidos. En particular, debido a la escasa información reportada en la literatura, se investigará la cinética de los radicales CCl_2 y C_2Cl_3 , con diversas especies de interés atmosférico.