

## ESTUDIOS FOTOQUÍMICOS DE COMPUESTOS AZUFRADOS DE INTERÉS ATMOSFÉRICO

Arango Hoyos Bryan Elith

Romano Rosana Mariel (Dir.)

Centro de Química Inorgánica (CEQUINOR), Facultad de Ciencias Exactas, UNLP-CIC-CONICET.

[bryan.elith.arango.hoyos@quimica.unlp.edu.ar](mailto:bryan.elith.arango.hoyos@quimica.unlp.edu.ar)

**PALABRAS CLAVE:** Fotoquímica, Fase gaseosa, Matriz.

Los procesos químicos que ocurren en la atmósfera son sumamente complejos debido a la diversidad de variables que intervienen. La química atmosférica, considerada como una ciencia aplicada, emplea metodologías y resultados provenientes de estudios desarrollados en otras áreas de la química, como espectroscopia, fotoquímica, cinética y estudios de mecanismos de reacciones orgánicas e inorgánicas, tanto en fase homogénea como heterogénea.

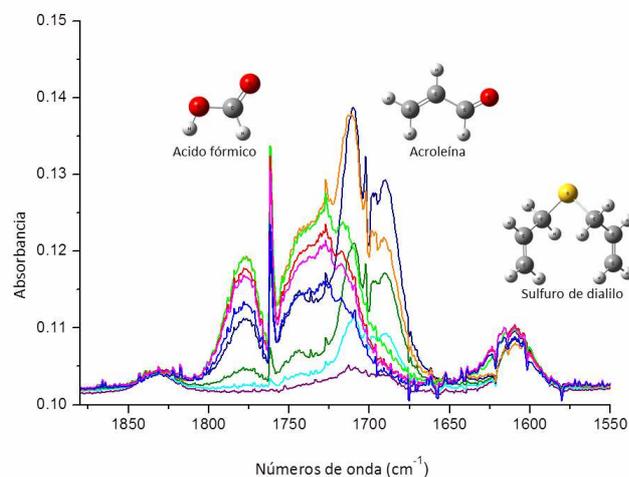
En este trabajo de Tesis se estudia la evolución de especies moleculares que pueden encontrarse en la atmósfera como contaminantes, ya sea proveniente de fuentes naturales o antropogénicas, cuando son sometidos a diferentes condiciones de temperatura, radiación de diferentes longitudes de onda, exposición a diferentes especies presentes en la atmósfera (como por ejemplo  $H_2O$ ,  $O_2$  y radical  $OH$ ). Los estudios se realizan en diferentes fases: gaseosa, líquida, aislado en matrices de gases inertes (que permite modelar mecanismos unimoleculares) y en levitación (como modelo de aerosoles atmosféricos). El seguimiento de los productos, incluyendo las conformaciones adoptadas por las especies, fue realizado mediante técnicas espectroscópicas (FTIR y Raman).

Se llevaron a cabo estudios a especies potencialmente contaminantes conteniendo átomos de azufre en diferentes entornos. En este trabajo se presenta el estudio de las reacciones fotoquímicas de sulfuro de dialilo (DAS) con  $O_2$  molecular. Previo a estas experiencias se realizó el estudio espectroscópico y teórico del DAS. Los resultados fueron interpretados en términos de 4 conformeros en equilibrio, en base al análisis de los espectros FTIR del compuesto aislado en matriz de Ar, en fase gaseosa y en estado líquido y al espectro Raman del líquido [1].

El estudio fotoquímico se realizó en fase gaseosa y en matrices de gases inertes a temperaturas criogénicas. Como fuente de irradiación se utilizó una lámpara de amplio espectro (200 a 800 nm). También se irradió con radiación en las regiones de 350-450 y 280-320 nm. Las experiencias en fase gaseosa fueron monitoreadas in-situ mediante espectros FTIR en forma simultánea a la irradiación. En las experiencias de matrices se realizaron irradiaciones con diferentes tiempos, con posterior determinación del espectro FTIR de la matriz. Se emplearon además diferentes proporciones entre el DAS y el  $O_2$ , desde 1:1 hasta 1:100.

El diseño de las experiencias realizadas permite la detección de intermediarios reactivos o fotoquímicamente activos. Por ejemplo, uno de los productos de la reacción en fase gaseosa del DAS con  $O_2$  identificado por su espectro IR es la cetena,  $H_2C=C=O$ . Esta especie se forma en la mezcla de reacción y posteriormente se consume, siendo posible su detección solo durante los primeros segundos de iniciada la irradiación. Cuando la fotoquímica se realiza con luz en el rango de 350-450 nm la acroleína,  $H_2C=CH-CHO$ , es uno de los productos principales de la reacción. Sin embargo, cuando se utiliza luz de amplio espectro o se irradia en la región UV del espectro la acroleína se forma y posteriormente se consume, es decir se comporta como un intermediario de la reacción, produciendo fundamentalmente ácido fórmico,  $HC(O)OH$ . Además se forma  $CO$ ,  $OCS$  (como intermediario) y  $SO_2$ .

Este trabajo se realiza gracias a una beca de la ANPCyT asociada al proyecto PICT2014-3266.



### REFERENCIAS

1. B.E. Arango Hoyos, R.M. Romano, "Experimental and theoretical conformational studies on diallyl sulphide". enviado al *J. Mol. Struct.*