

ESTUDIO CINÉTICO E IMPLICANCIAS ATMOSFÉRICAS DE LA REACCIÓN DEL RADICAL OH CON HALOALCANOS: 1-CLOROBUTANO

Rafael Jara Toro, Juan Pablo Aranguren, Javier Barrera, Raúl Taccone,
Silvia I. Lane, Gustavo Pino

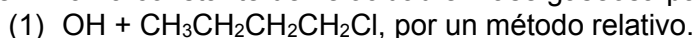
INFIQC, Dpto. de Físicoquímica- Fac. de Ciencias Químicas - Centro Láser de Ciencias Moleculares – Universidad Nacional de Córdoba – C.P. 5000, Córdoba, Argentina.

E-mail: rajarat23@gmail.com

Introducción: Un gran número de compuestos orgánicos volátiles (COVs) son emitidos a la atmósfera tanto biogénica como antropogénicamente. Por este motivo, en los últimos años, ha crecido la demanda de parámetros cinéticos de las reacciones más importantes que ocurren en la atmósfera, principalmente por el rol que juegan en la contaminación en ambientes cerrados y la formación de aerosoles secundarios.

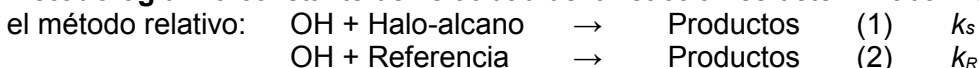
Es ampliamente conocido que la principal vía de remoción de los COVs en la troposfera durante las horas del día es la reacción con el radical OH. La obtención de las constantes de velocidad de las reacciones de este radical con los diferentes compuestos emitidos a la atmósfera es de crucial importancia para estimar el tiempo de residencia de estos compuestos en la misma y consecuentemente calcular índices de su impacto ambiental.

Objetivos: * Determinar la constante de velocidad en fase gaseosa para la reacción:



* Determinar el impacto atmosférico de este compuesto.

Metodología: La constante de velocidad de la reacción es determinada mediante



El principio de este método consiste en medir la velocidad de decaimiento de la concentración del 1-clorobutano debido a la oxidación inducida por el radical OH, relativa a un compuesto de referencia, cuya constante de velocidad de reacción con el radical OH (k_R) es bien conocida [1].

La constante de velocidad se determinó a (298 ± 1) K y a presión atmosférica, utilizando N_2 y aire sintético como gas baño. El dispositivo experimental utilizado para realizar el estudio cinético consiste en un sistema de vacío convencional, una bolsa colapsable de Teflón de 80 L y un cromatógrafo de gases (Claurus 500-Perkin Elemer).

Resultados: El valor de la constante de velocidad determinada es $k_s = (1.43 \pm 0.4) \times 10^{-12} \text{ cm}^3 \text{ molécula}^{-1} \text{ s}^{-1}$, el cual es un promedio de las distintas determinaciones realizadas utilizando metanol y etanol como compuestos de referencia, tanto en atmósfera de aire como de N_2 .

Por otro lado, a partir de los resultados obtenidos se calcularon parámetros que indican su posible impacto ambiental [1]. Se evaluó el tiempo de vida troposférico (τ) que es de 4,08 días. Se calcularon también el potencial de disminución de la capa de ozono (ODP), el forzamiento radiativo y el potencial de calentamiento global (GWP). Estos fueron comparados con los valores correspondientes a compuestos similares [2].

Referencias:

[1] B.J. Finlayson-Pitts, J.N. Pitts, Jr., *Chemistry of the upper and lower atmosphere*, Academic Press, N.Y., 2000.

[2] J.C. Loison, L. Ley, R. Lesclaux., *Kinetic study of OH radical reactions with chlorobutane isomers at 298 K*, Chem. Phys. Lett. 296 (1998) 350-356.