

ESTUDIO TEÓRICO Y ESPECTROSCÓPICO DE AGREGADOS DE DISULFURO DE CARBONO AISLADOS EN MATRICES CRIOGÉNICAS

Marcos I. Leone, Michelle T. Custodio Castro, Agustín Spaltro, Rosana M. Romano

CEQUINOR (UNLP, CCT-CONICET La Plata, asociado a CIC-PBA). Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata. Boulevard 120 N° 1465, La Plata (1900), Argentina

Correo electrónico de contacto: marcosleone@quimica.unlp.edu.ar

La comprensión de los estados iniciales de la formación de aerosoles atmosféricos requiere un conocimiento detallado de los agregados moleculares, su composición química y los compuestos gaseosos que participan en su formación y crecimiento. Es probable que la nucleación atmosférica proceda a través de estados intermediarios [1], que impliquen la formación y ruptura de agregados moleculares [2], por lo que resulta muy importante obtener información sobre la composición química de estos agregados y sus interacciones con contaminantes u otros gases traza en la atmósfera.

En este trabajo se investigó la formación de homoagregados de CS₂, a partir de mezclas en distintas proporciones con Ar, en matrices criogénicas (~10 K). Se realizaron además *annealings* a cada matriz obtenida. La estructura y composición de los posibles agregados formados se estudió mediante espectroscopia FTIR, junto con cálculos computacionales bajo el formalismo DFT. Además, para cada estructura obtenida, se procedió al estudio de su correspondiente energía de estabilización, por medio del análisis de Orbitales Naturales de Enlace (NBO) y de Descomposición Local de Energía (LED).

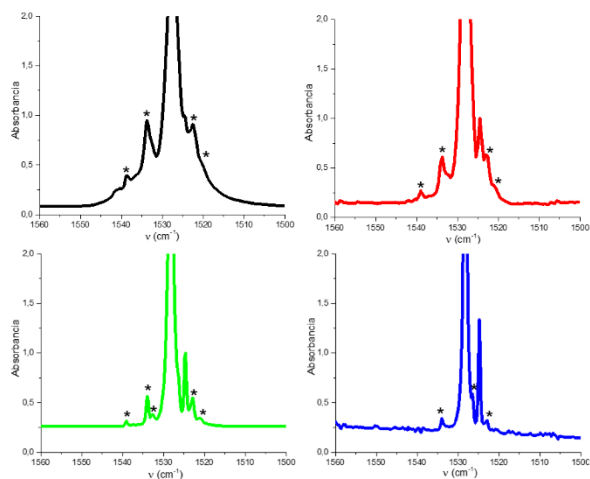


Figura 1: Espectros FTIR de mezclas CS₂:Ar en la proporción 1:50 (negro), 1:100 (rojo), 1:200 (verde) y 1:5000 (azul). Los asteriscos indican bandas asignadas a agregados.

Se observó la aparición de bandas nuevas, no asignadas al monómero de CS₂ en la literatura, principalmente en la zona correspondiente al estiramiento antisimétrico del S=C=S. Estas bandas aumentan su intensidad al incrementar la concentración del CS₂ en las mezclas estudiadas, como puede verse en la Figura 1. Asimismo, al aumentar los tiempos de *annealings* se observa un incremento en su intensidad. Las mismas fueron asignadas a seis estructuras, tres correspondientes a dímeros y tres a trímeros.

Al analizar la energía de interacción de cada estructura, se encontró que los tres trímeros son más estables que los dímeros, y estos más que los monómeros aislados. Además, la principal fuente de estabilización se debe a las interacciones electrostáticas entre los monómeros, en conjunto con las interacciones de origen dispersivo.

Agradecimientos: a la Facultad de Ciencias Exactas de la UNLP (UNLP-11/X822), al CONICET (PUE-17BD20170173CO), y a la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica (PICT2020-3746) por el apoyo financiero.

Referencias

- [1] Kulmala, M.; Riipien, I.; Sipila, M.; Manninen H.E. *Science*, **1979**, 318, 5847.
- [2] Vehkamäki, H.; Riipien, I. *Chem Soc Rev*, **2012**, 41, 5160.