

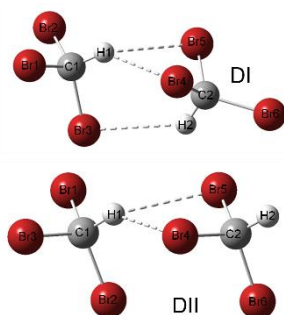
AISLAMIENTO DE AGREGADOS DE BROMOFORMO EN MATRICES CRIOGÉNICAS DE GASES INERTES

Michelle T. Custodio Castro, Marcos I. Leone, Luciana M. Tamone, 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: mcustodiocastro@quimica.unlp.edu.ar

El bromoformo, CHBr_3 , es el compuesto bromado más abundante en la atmósfera [1]. Proviene tanto de fuentes naturales como antropogénicas. Esta especie ha sido recientemente identificada como muy eficiente en la depleción de ozono [2], por lo que se ha propuesto la necesidad de incluirla en los modelos del clima. Por otra parte, se sabe que la formación de aerosoles mediante la conversión de gas a partícula juega un papel importante en el clima, particularmente por su contribución a la formación de núcleos de condensación de nubes, y con alto impacto en la salud humana.



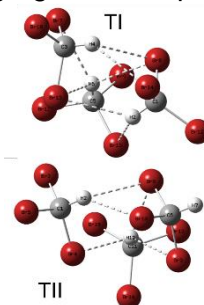
En este trabajo se estudiaron agregados de dos y tres moléculas de bromoformo, considerados como las semillas de agregados de mayor tamaño. Dímeros y trímeros de bromoformo y de deuterobromoformo fueron aislados en matrices criogénicas de gases inertes a temperaturas cercanas a 10 K e identificados mediante espectroscopia FTIR. Para ello se realizaron mezclas de $\text{CH(D)Br}_3:\text{Ar}$ y $\text{CH(D)Br}_3:\text{N}_2$ en diferentes

Figura 1. Dímeros optimizados con la aproximación B3LYP-D3/6-311G++(d,p).

proporciones. Al aumentar la concentración de bromoformo en la mezcla se favorece la formación de agregados, lo que constituye una herramienta fundamental para la correcta asignación. También se realizaron *annealings* o recocidos de las matrices formadas. En este caso se favorece la difusión molecular en la matriz, y por lo tanto se incrementan las señales originadas en agregados, lo que permite confirmar la asignación propuesta.

Se optimizaron las estructuras de dímeros y trímeros de CHBr_3 y CDBr_3 con métodos de la teoría de los funcionales de la densidad (DFT) y MP2 con diferentes funciones bases. Se encontraron dos estructuras diméricas (Figura 1) y dos correspondientes a trímeros (Figura 2). A partir de la comparación de los espectros FTIR experimentales y los calculados fue posible la identificación de agregados moleculares de 2 y 3 moléculas de bromoformo.

Figura 2. Trímeros optimizados con la aproximación B3LYP-D3/6-311G++(d,p).



Agradecimientos. Al CONICET (PUE-22920170100053CO y PIP-342), la UNLP (UNLP 11/X971) y la ANPCyT (2020-3746) por el apoyo financiero.

Referencias

[1] Jesswein, M.; Fernandez, R. P.; Berna, L.; Saiz-Lopez, A.; Groob, J. U.; Hossaini, R.; Apel, E.C.; Hornbrook, R. S.; Atlas, E.L.; Blake, D. R.; Montzka, S.; Keber, T.; Schuck, T.; Wagenhauser, T. *Atmos. Chem. Phys.*, **2022**, *22*, 15049.

[2] Villamayor, J.; Iglesias-Suarez, F.; Cuevas, C. A.; Fernandez, R.P.; Li, Q.; Abalos, M.; Hossaini, R.; Chipperfield, M. P.; Kinnison, D. E.; Tilmes, S.; Lamarque, J. F. *Nat. Clim. Change*, **2023**, *13*, 554-560.