



MICROSOLVATACIÓN DE UNA ESPECIE ATMOSFÉRICA: ESTUDIO DEL SISTEMA $\text{CHBr}_3\text{-H}_2\text{O}$

Michelle T. Custodio Castro, Ailen Lamboglia, Tiziana Stobbia Shcrager, Tadeo G. Castro Palomino, Juan F. Coco, Luciano Lodola, 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. Blvd. 120 N° 1465, La Plata (1900), Argentina.

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

El bromoformo (CHBr_3) es una de las sustancias organobromadas más abundantes en la atmósfera, emitida a partir de fuentes naturales y antropogénicas. Su tiempo de vida es de ~3 semanas, por lo que no está regulada por el Protocolo de Montreal [1]. Sin embargo, puede contribuir significativamente a la destrucción catalítica del ozono estratosférico. Recientemente hemos caracterizado dímeros y trímeros del CHBr_3 y CDBr_3 en matrices criogénicas de gases inertes [2]. El objetivo del presente trabajo es evaluar su interacción con H_2O , a fin de contribuir a la comprensión de interacciones intermoleculares relevantes en condiciones atmosféricas.

Se prepararon mezclas de $\text{CHBr}_3\text{:H}_2\text{O:Ar}$ en diferentes proporciones (1:1:200 y 1:10:200). Posteriormente, se depositaron sobre la ventana de CsI del equipo de matrices de gases inertes, enfriada a 10 K. Las matrices resultantes fueron evaluadas mediante espectroscopia FTIR. Además de las bandas asignadas al CHBr_3 , al H_2O y a sus homoagregados, se detectaron nuevas bandas de absorción atribuibles a la formación de agregados moleculares. Se realizaron cálculos teóricos empleando el método B3LYP /6-311G++(d,p) y MP2/aug-cc-PVDZ, para estudiar posibles estructuras de complejos intermoleculares 1:1 entre CHBr_3 y H_2O sin restricciones geométricas. El complejo con interacción tipo puente de H, entre el H del CHBr_3 y el O del H_2O , resultó ser un mínimo de energía, y el espectro IR teórico presentó un buen acuerdo con los resultados experimentales, respaldando la asignación propuesta.

Los autores agradecen al CONICET (PIP 0352 y PUE-2017-22920170100053), la ANPCyT (PICT-2020-03746) y la UNLP (UNLP-11/X971) por el apoyo financiero.

REFERENCIAS ACS

- [1]. Roozitalab, B.; Hornbrook, R. S.; Kinnison, D. E.; Fernandez, R. P.; Gaubert, B.; Cuevas, C. A.; Hills, A. J.; Saiz-Lopez, A.; Emmons, L. K.; Apel, E. C. *J. Geophys. Res. Atmos.* **2025**, 130, e2025JD044790.
- [2]. Custodio Castro, M. T.; Leone, M. I.; Tamone, L. M.; Romano, R. M. *J. Mol. Struct.* **2026**, 1366, 146021.