



ESTUDIO DE REACCIONES DE INTERES ATMOSFÉRICO DE LA 1,1,3-TRICLOROTRIFLUOROACETONA EN FASE GASEOSA

Marcos I. Leone, 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. Blvd. 120
N° 1465, La Plata (1900), Argentina*

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

En los últimos años, el estudio de las cetonas halogenadas ha adquirido un interés creciente debido a su particular comportamiento fotoquímico y a su capacidad para generar, mediante procesos de fotodisociación, átomos y fragmentos halogenados o clorofluorocarbonos (CFC), que pueden participar en diversas reacciones atmosféricas, algunas de ellas de relevancia ambiental, como los procesos asociados a la destrucción del ozono estratosférico. En este contexto, el presente trabajo se centra en el estudio de la fotoquímica de la 1,1,3-triclorotrifluoroacetona ($\text{CCl}_2\text{FC}(\text{O})\text{CF}_2\text{Cl}$, TCTFA) en fase gaseosa, tanto pura como en presencia de O_2 y H_2O , con el objetivo de comparar los procesos fotoinducidos en los distintos sistemas. Esta molécula ha sido previamente estudiada por nuestro grupo [1], encontrándose experimental y teóricamente la coexistencia de tres conformeros en equilibrio, en concordancia con las predicciones obtenidas mediante cálculos teóricos. En el presente estudio se realizaron diferentes experimentos fotoquímicos empleando una lámpara de Hg-Xe (200–800 nm), sobre la TCTFA pura y sobre mezclas gaseosas de TCTFA con O_2 y H_2O , complementados con cálculos computacionales.

En las experiencias con TCTFA pura, la fotólisis produjo diversos compuestos, entre ellos dihaluros de carbonilo (OCCl_2 , OCF_2 y $\text{ClC}(\text{O})\text{F}$), CF_2Cl_2 , CCl_3F y CO , cuya formación puede explicarse principalmente mediante reacciones de los radicales $\text{Cl}\cdot$ generados durante la fotodisociación con moléculas de TCTFA y fragmentos halogenados. En presencia de O_2 se observó un marcado incremento de los haluros de carbonilo, lo que evidencia una fotooxidación más completa de la TCTFA. A diferencia del caso anterior, no se detectó la formación de CF_2Cl_2 y CCl_3F . Por otra parte, en presencia de H_2O se observó una competencia entre la fotodisociación de la TCTFA y su reacción con agua, dando lugar a la formación del diol $\text{CCl}_2\text{FC}(\text{OH})_2\text{CF}_2\text{Cl}$, producto esperado para la adición de agua al carbonilo de cetonas fuertemente activadas [2].

Agradecimientos

Al CONICET (PUE-17-BD20170173CO), a la UNLP (UNLP 11/X971) y a la ANPCyT (PICT 2020-3746) por el apoyo financiero.

Referencias

- [1] Spaltro, A.; Leone, M. I.; Castillo Ortiz, D. F.; Tamone, L. M.; Romano, R. M. *J. Mol. Struct.* **2025**, 1327, 141277.
- [2] Murto, J.; Kivinen, A.; Maninnen, A.; Perttilä, M. *Spectrochim. Acta, Part A*. **1974**, 81A, 217-282.