

XXII CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA LA PLATA 2021

OXIDACIÓN FOTOQUÍMICA DEL CLORURO DE DICLOROACETILO EN FASE GASEOSA Y EN MATRIZ DE ARGÓN

Tamone Luciana M.¹, Picone A. Lorena¹ y Romano Rosana M.¹

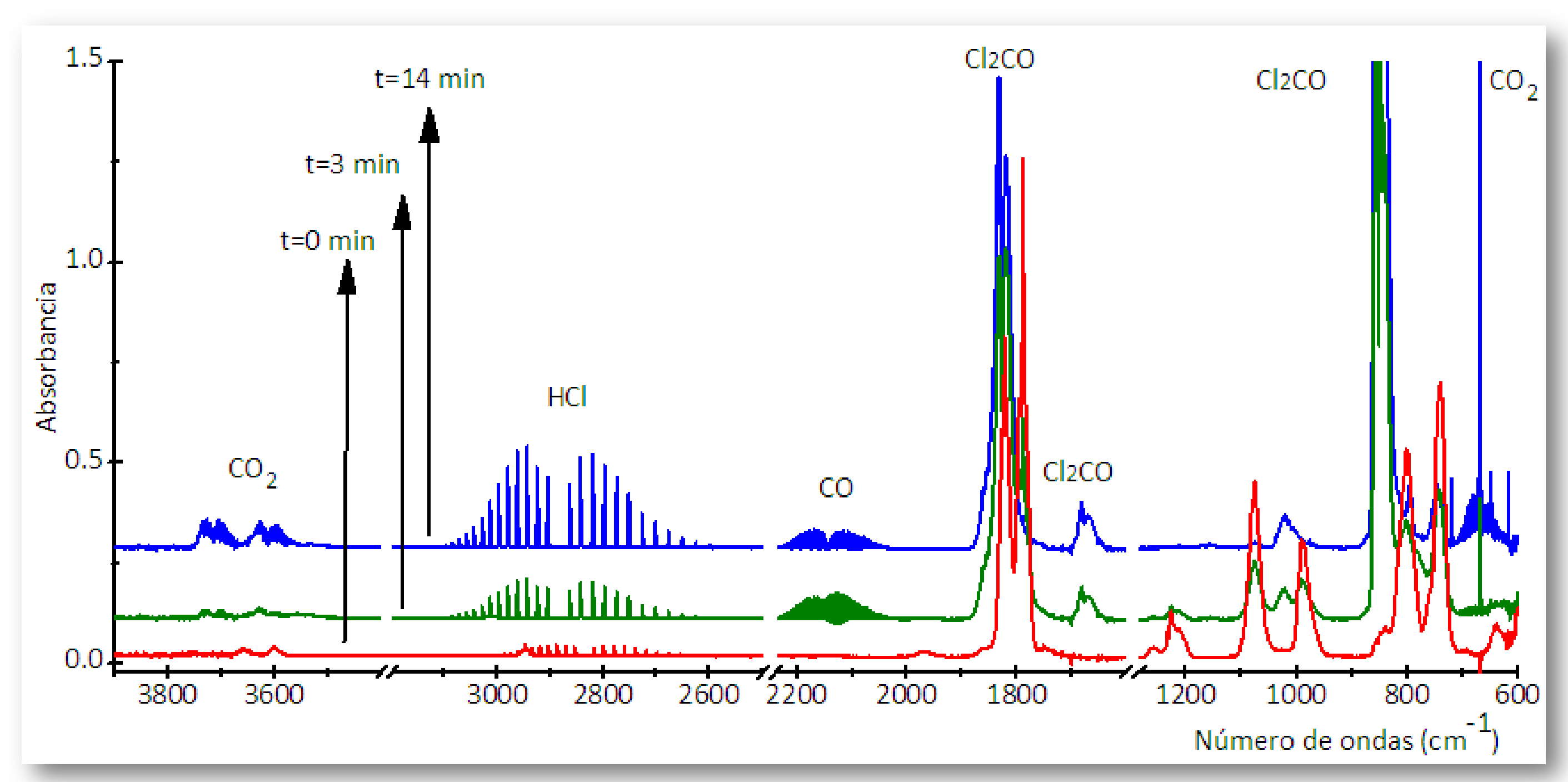
¹CEQUINOR (UNLP, CCT-CONICET La Plata, asociado a CIC). Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata. Blvd. 120 N° 1465, La Plata (CP 1900), Argentina. ltamone@quimica.unlp.edu.ar

Introducción

En el estudio fotoquímico del tricloroetileno (TCE) con oxígeno molecular se propuso como intermediario de reacción al cloruro de dicloroacetilo (CDA), tanto para las reacciones en condiciones de matrices de gases inertes como en fase gaseosa. En este trabajo se muestran los resultados obtenidos del estudio fotoquímico del CDA en matriz en presencia de oxígeno molecular y su comparación con los resultados obtenidos del estudio la reacción fotoquímica en fase gaseosa. Estas experiencias fueron realizadas siguiendo la evolución de los espectros infrarrojos (FTIR) en forma simultánea a la irradiación.

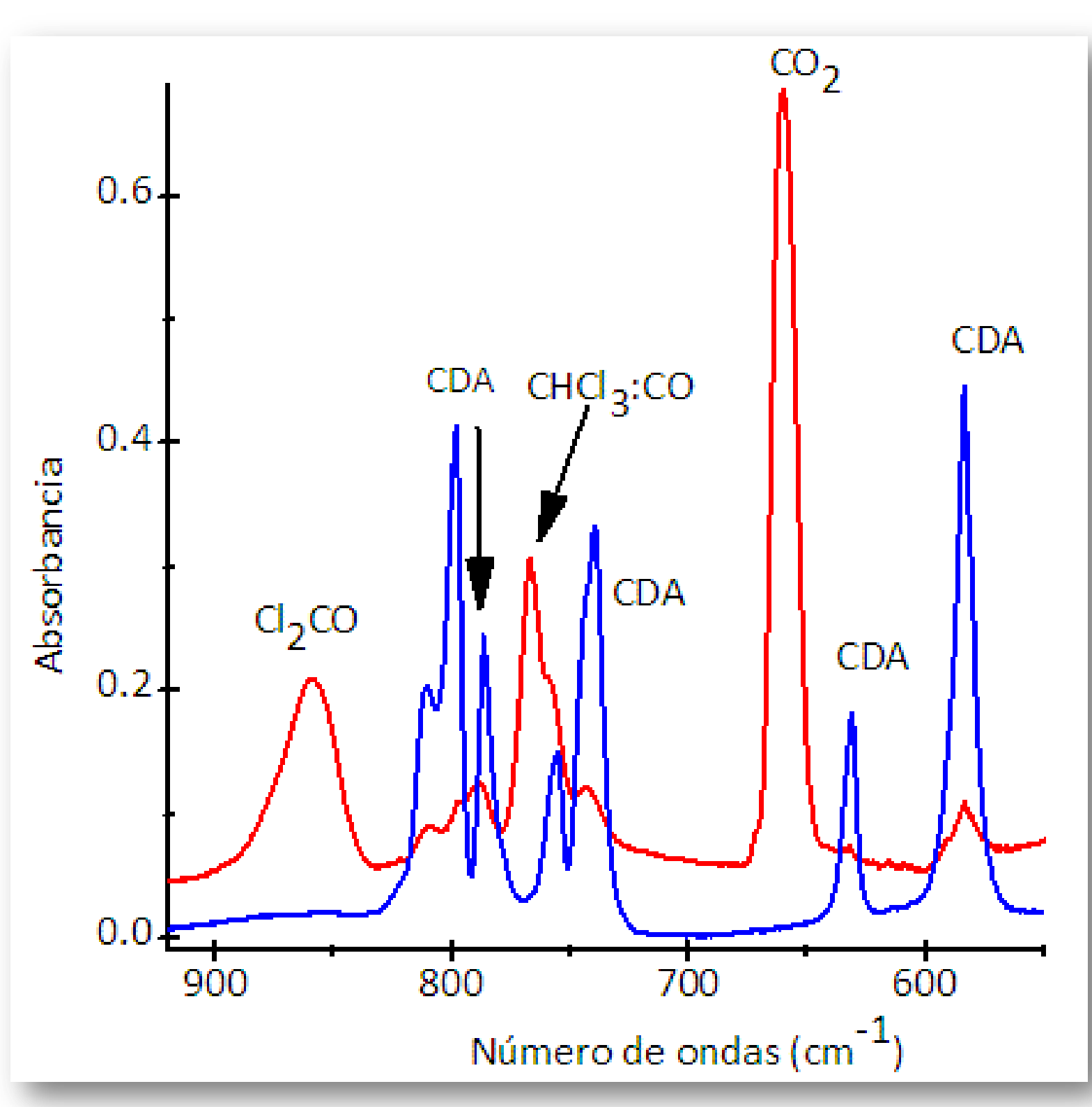
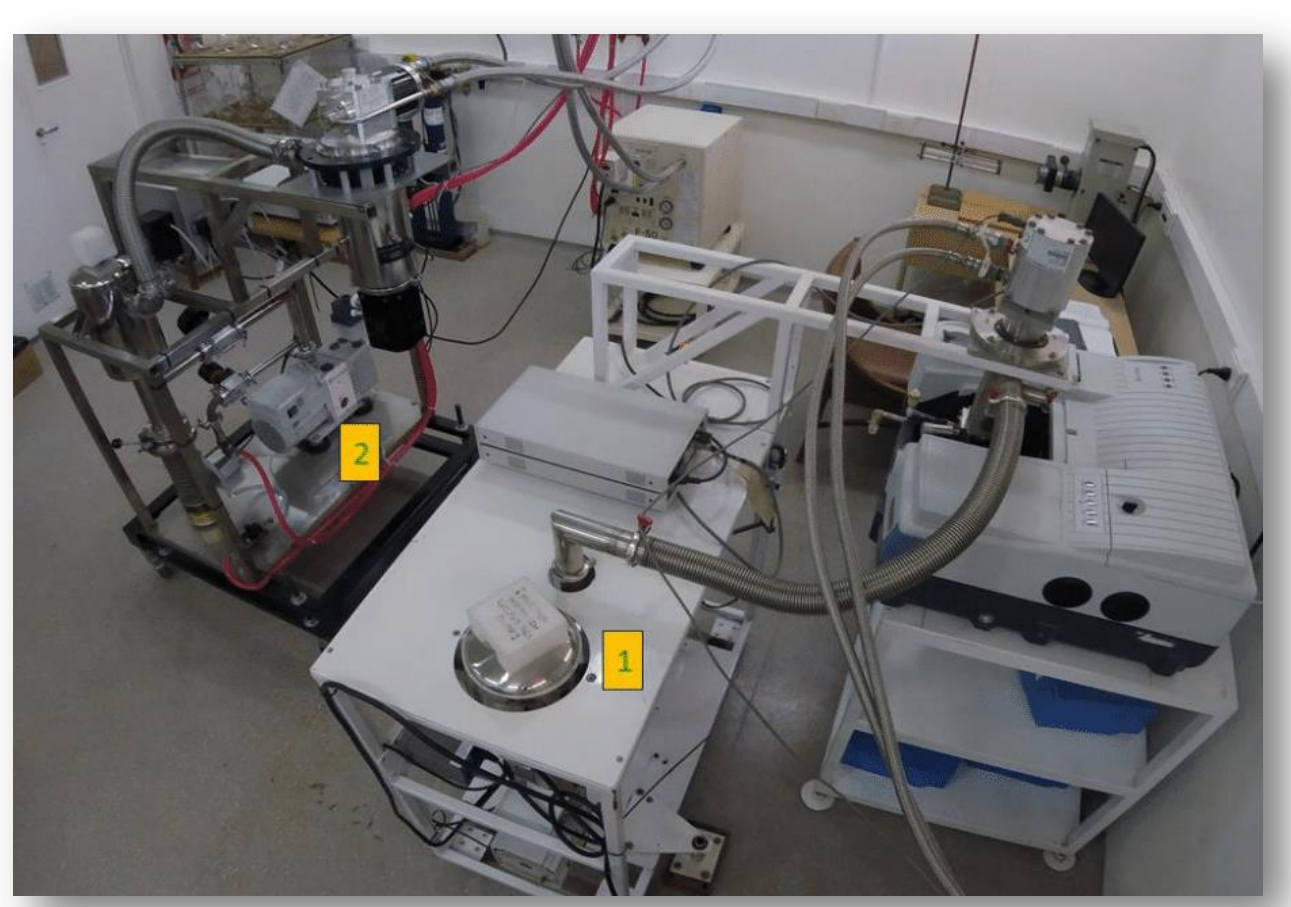
Resultados

Reacciones fotoquímicas de CDA y O₂ en fase gaseosa

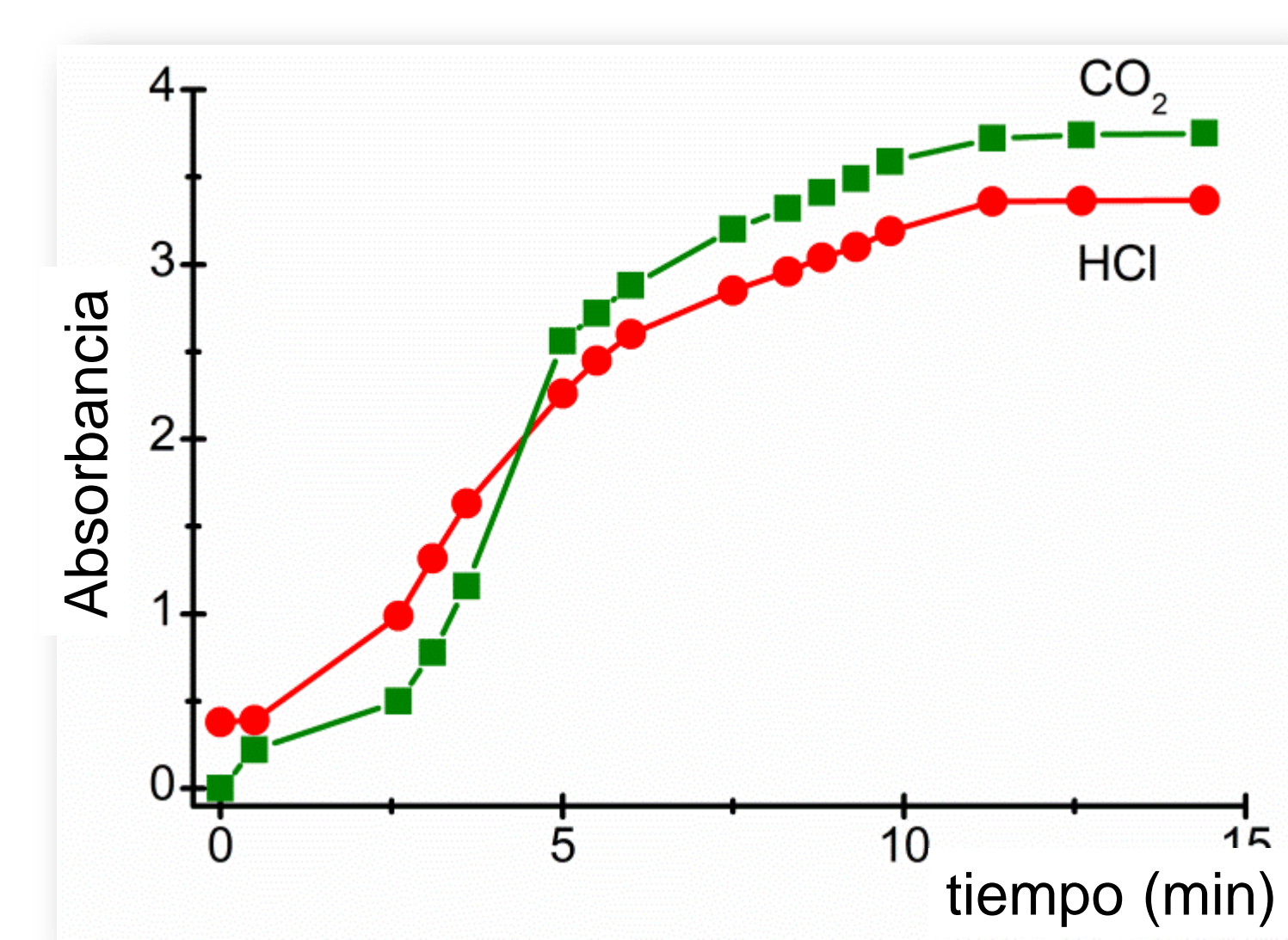


Espectros FTIR de una mezcla gaseosa 1:1 CDA:O₂ (1 mbar de cada uno de los reactivos) antes de irradiar (rojo) y después de 3 (verde) y 14 minutos (azul) de irradiación con luz UV-visible de amplio espectro.

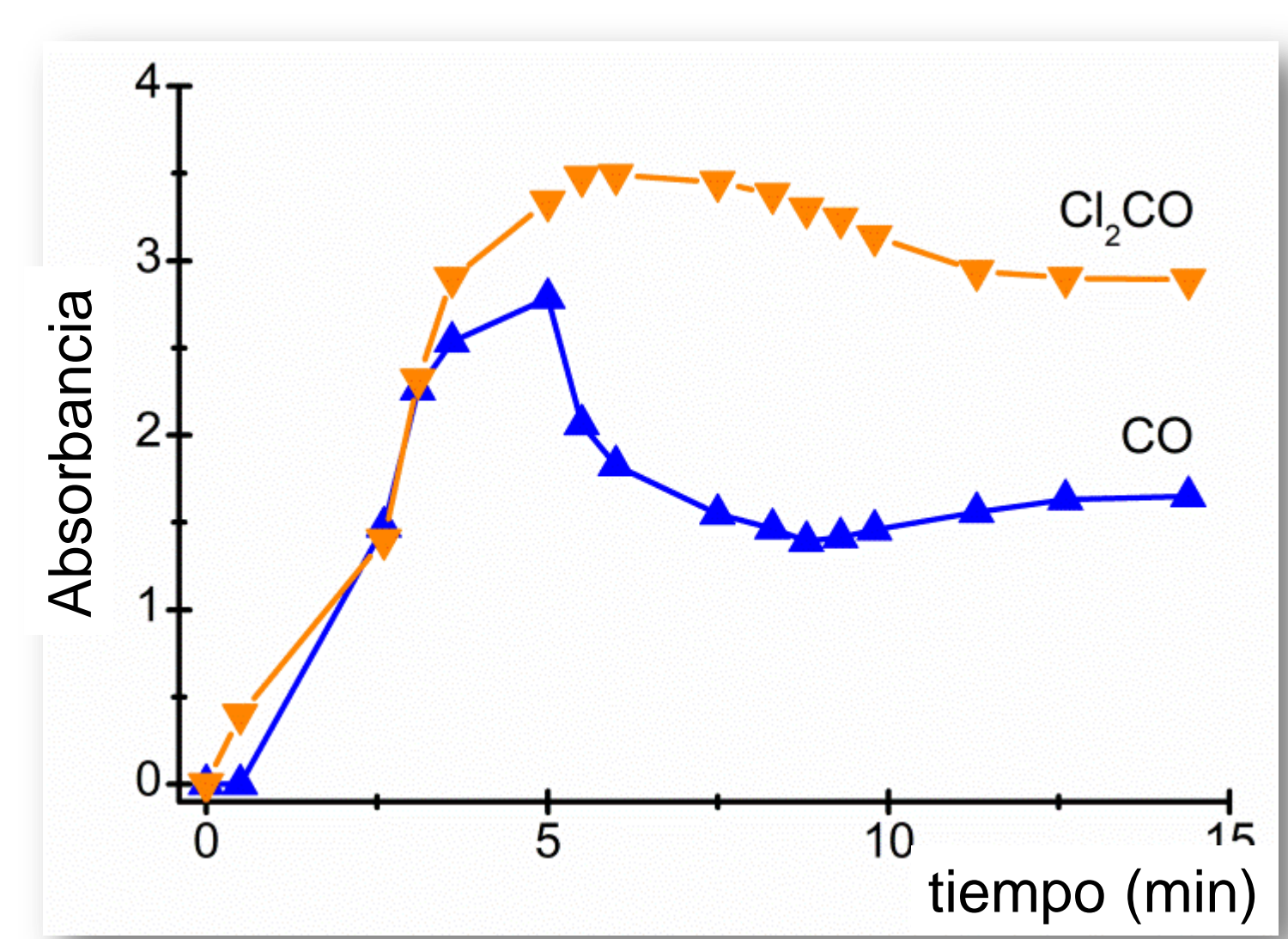
Reacciones fotoquímicas de CDA y O₂ en matriz de Ar



Espectros FTIR de una matriz de Ar matrix conteniendo inicialmente CDA y O₂ en una proporción CDA:O₂:Ar 1:20:1000 inmediatamente después del depósito (espectro azul) y luego de 50 minutos de irradiación con luz UV-visible (espectro rojo). Resolución 0,5 cm⁻¹ y 64 scans.



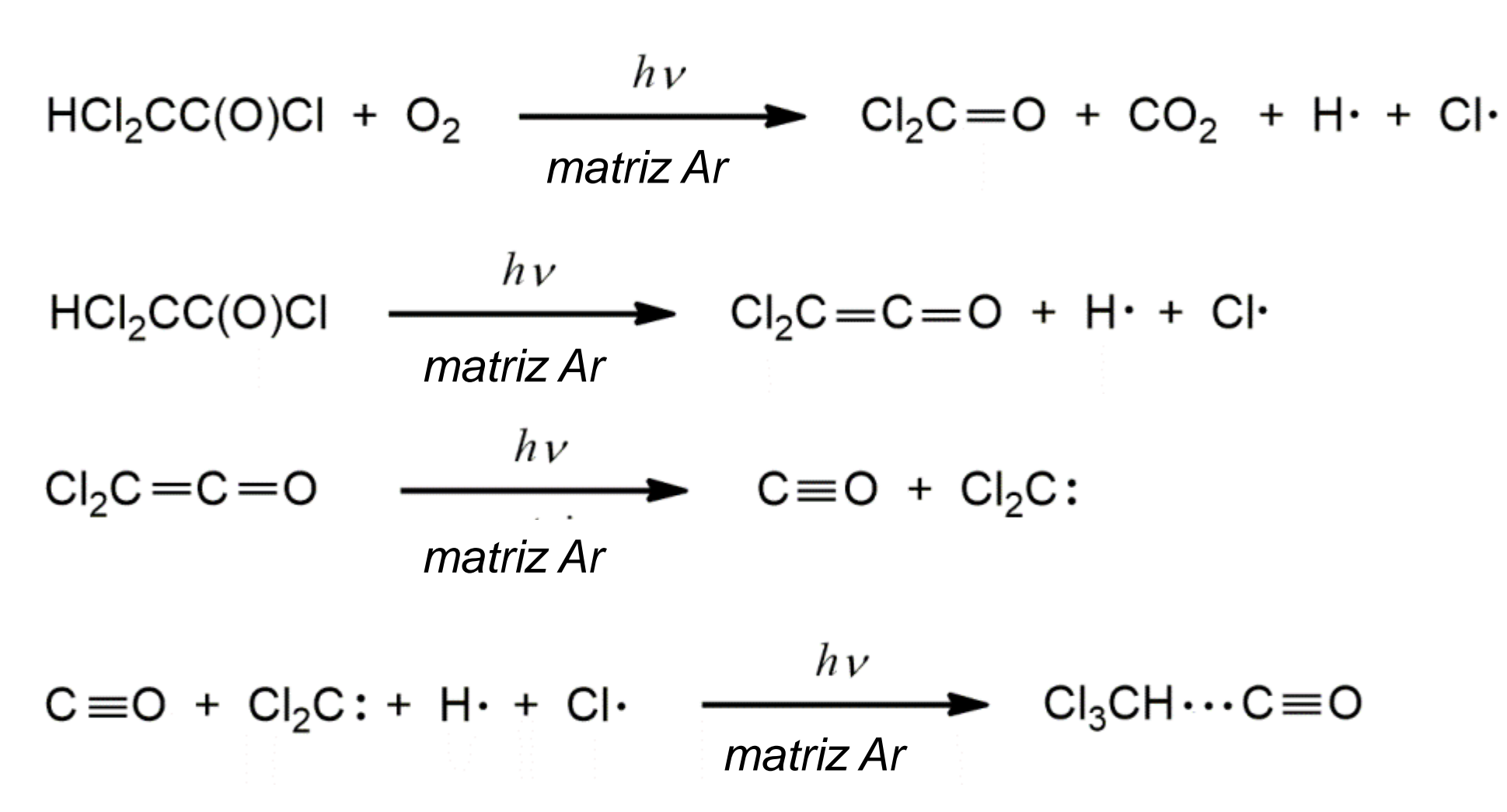
Intensidad de la absorción IR integrada correspondiente a los modos de combinación (ν₁ + ν₃) y (2ν₂ + ν₃) del CO₂ (cuadrados, trazo verde) y a la banda fundamental del HCl (círculos, trazo rojo) en función del tiempo de irradiación de una mezcla gaseosa 1:1 CDA:O₂.



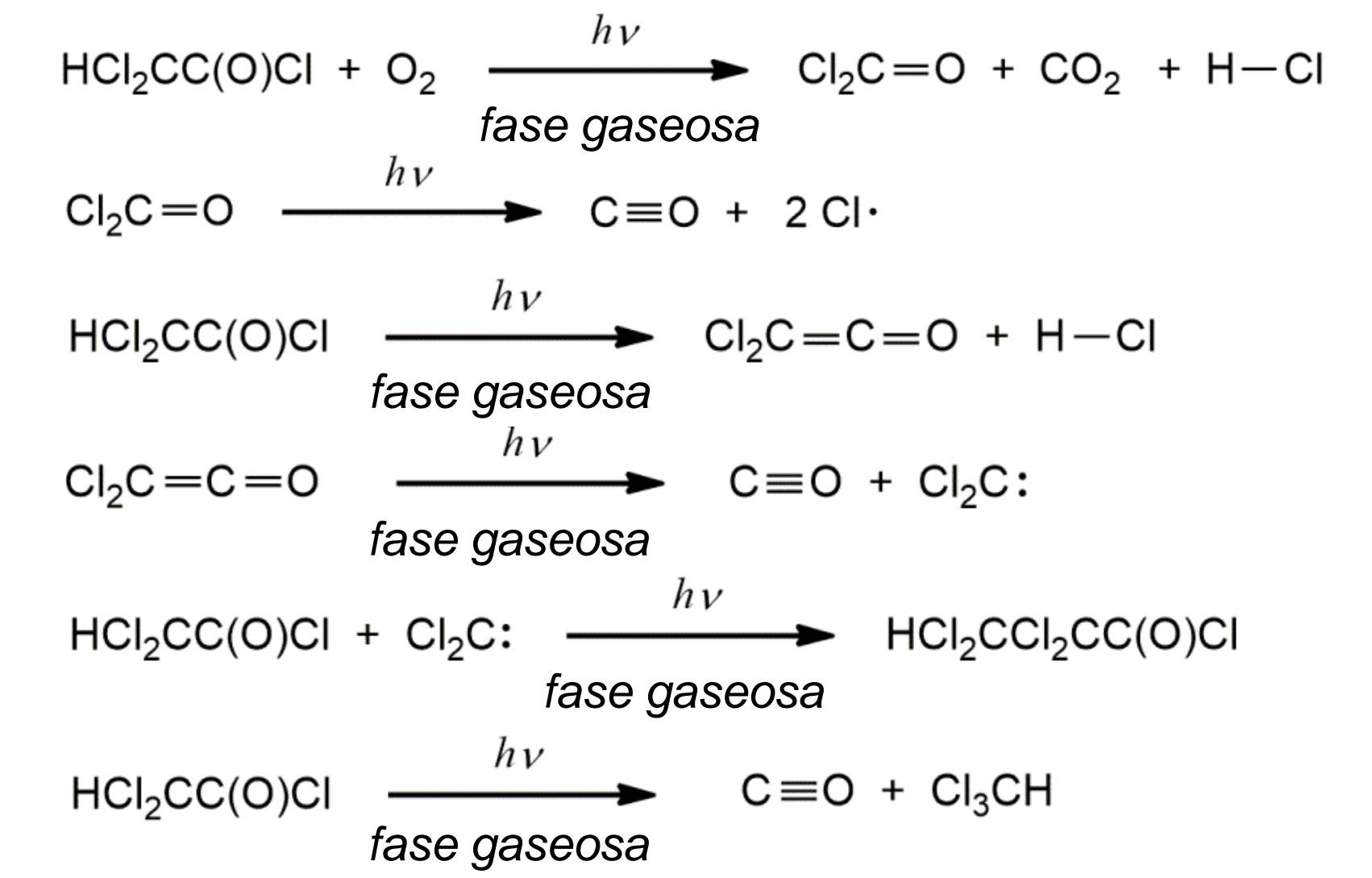
Intensidad del sobretono 2ν₅ del fosgeno (naranja) y de la banda fundamental del CO fundamental (azul) en función del tiempo de irradiación de una mezcla gaseosa 1:1 CDA:O₂.

Conclusiones

Mecanismos de reacción en matriz de Ar



Mecanismos de reacción en fase gaseosa



Las diferencias en los mecanismos en fase gaseosa y en condiciones de matriz pueden ser explicadas debido a que el aislamiento en matriz restringe los procesos a aquellos de baja molecularidad y por la posibilidad de aislar en matrices especies poco estables o formas de mayor energía.

Referencias

Tamone, L. M., Picone, A. L. y Romano, R. M., *J. Photochem. Photobiol.* **2021**, 6, 100019.

Agradecimientos

Los autores agradecen al CONICET, a la UNLP (UNLP-11/X822) y a la ANPCyT (PICT 2014-3266) por el apoyo financiero.