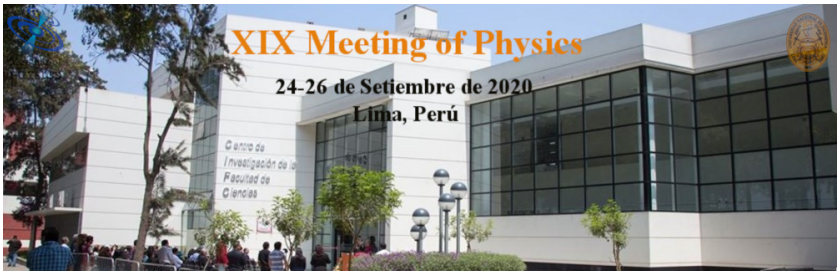

Contribution ID : **105** Type : **not specified**

Reactividad molecular de los gases traza atmosféricos

Friday, 25 September 2020 08:00 (30)

Los gases traza atmosféricos, presentes en concentraciones muy bajas (órdenes de ppb y ppt), tales como el ozono O3, óxidos de nitrógeno NOx (NO + NO2), radicales nitrato NO3 e hidroxilo OH, ácido nitroso HONO, óxidos de halógenos XO (X= Cl, Br, I), etc. pueden alterar la capacidad oxidativa de la atmósfera a través de procesos, que incluyen ciclos catalíticos, como la destrucción de la capa de ozono, oxidación del dimetil sulfuro, cambios en la concentración HOx/NOx, oxidación del Hg0 a HgII, etc. Varios de estos gases son productos de la fragmentación fotolítica y/o térmica de especies contaminantes emitidas tanto de fuentes naturales como antropogénicas.
La identificación, cuantificación y monitoreo de los gases traza, utilizando técnicas como las satelitales (Vea Fig.1), espectroscópicas (DOAS) u otras herramientas, son la base de la Modelización Química de la Atmósfera; cuya robustez y trascendencia requiere de información fiable y precisa de parámetros quimico-físicos de reacciones que involucran gases traza. Varias de estas reacciones son novedosas, controvertidas, poco esclarecidas o con escasa información experimental. En este contexto la Química Computacional es una herramienta clave que permite abordar tales procesos. Cálculos mecano-cuánticos usando metodologías (DFT, ab-initio) al más alto nivel se requieren para optimizar estructuras moleculares, determinar propiedades de estabilidad termodinámica,1 abordar estados electrónicos excitados2 o dilucidar caminos reaccionales. Toda esta información permite proponer mecanismos y modelos novedosos para explicar el efecto de los gases traza sobre fenómenos atmosféricos diversos.3

1. J.Z. Dávalos, R. Notario, C.A. Cuevas, J.M. Oliva, A. Saiz-Lopez. Comp. Theor. Chem. 1099 (2017) 36 -44.
2. S.P. Sitkiewicz, J.Z. Dávalos, R. Notario, J.M. Oliva, A. Saiz-Lopez, D.R. Alcoba, O.B. Oña, D. Roca-Sanjuán. J. Chem. Phys. 145 (2016) 244304 (1-14).
3. A. Saiz-Lopez, R.P. Fernandez, Geophys. Res. Lett. 43 (2016) 1-8. doi:10.1002/2015GL067608

Presenter(s) : Dr DAVALOS, Juan (Instituto de Química-Física “Rocasolano”, España)

Session Classification : keynote talks