

Erreakzio atmosferikoen dinamika

Garazi Andonegi Beristain

Elhuyar

atmosferak Eguzkitik babesten gaitu eta babes hori, besteak beste, ozono-geruzari zor diogu. Ozono-geruza Lurretik 19-48 km-ra dago, estratosferan, eta duen ozono-kontzentrazio handiari zor dio izena.

Ozonoa hiru oxigeno-atomoz osatutako molekula da eta estratosferan bertan sortzen da. Azkenaldian, ordea, estratosferan dagoen ozono-maila nabarmen txikiagotzen ari da gizakiaren ekintzek sortutako molekulen ondorioz. Izan ere, ozonoaren desagertze-abiadura bizkortu egin da eta, beraz, ozono gehiago desagertzen da sortzen dena baino. Hori dela eta, ozonoaren eta molekula horien arteko erreakzioen xehetasunak argitu nahi dituzte.

Hain zuzen ere, Gasteizko Farmazia Fakultateko Kimika Fisikoa Sailean erreakzio kimikoen dinamika ikertzen ari dira. Ikertzaileek, besteak beste, OH erradikalaren eta hidrogeno kloruroaren (HCl) arteko erreakzioa aztertu dute.



Ezkerrean, atmosferan gertatzen den HCl-aren eta OH erradikalaren arteko erreakzioa ikus daiteke pausoz pauso.

Erreakzio horretan ura (H_2O) eta kloro-atomoak (Cl) sortzen dira, eta kloroa da ozonoa desagerrarazten duen eragile garrantzitsuenetakoa.

Bestalde, kloro-atomoen (Cl) eta metanoaren (CH_4) arteko erreakzioa ere ikertu dute, kloro-atomoak neutralizatzen dituen erreakzioa eta, beraz, ozonoa babesten duena.

Erreakzio kimikoen dinamika molekularra


Atmosferan gertatzen diren erreakzioen abiadura indarren arabera askatu behar da. Izan ere, atmosferan ez dago oreka termikorik eta ezin da zinetika aplikatu erreakzioen abiadura ikertzeko; esaterako, ozonoaren desagertze-abiadura ikertzeko. Erreakzio horiek dinamika molekularra erabili aztertu behar dira, hau da, molekulen talka-energiaren, biraketa-energiaren eta bibrazio-energiaren arabera askatu behar dira.

Azterketa dinamikoan, lehenik, energia horiek guztiak funtzio matematiko batean irudikatzen dira: energia potentzialaren gainazalean, PES (Potential Energy Surface). Funtzio matematiko hori energia potentzialaren eta atomoen posizioaren menpe dago.

Ondoren, energia potentzialaren gainazal hori ezagututa, molekulen arteko talkak simulatzen dituzte ikertzaileek. Horretarako, molekulentzat hasierako energia bat, orientazio bat eta abiadura bat aukeratzen dira. Ondoren, Newton-en indarren ekuazioa aplikatu eta erreakzioaren abiadura, produktuen egoera energetikoa, molekulen bibrazio-egoera eta beste hainbat aldagai askatzen dira simulazioetatik.

Simulazio horiek milioika hasierako kondiziotan egin behar dira eta, gainera, kontuan izan behar da hasierako kondizio horien arabera batzuetan atomoek erreakzionatu egingo dutela eta beste batzuetan ez.

Lan horretarako superordenagailu birtual bat darabilte Gasteizko Fakultatean. Superordenagailua campuseko ehunka ordenagailuk osatzen dute, eta guztiak batera lan egiten dute gauean zehar ikergai dituzten aldagaiak askatzeko.

Azkenean lortuko diren emaitzak ezinbestekoak dira errekontzaren kimikan, astrofisikan, izarrarteko azterketetan eta espazioko ikerkuntzan, eta, nahiz eta erreakzio sinpleak diruditen, garrantzi izugarria dute, adibidez, ozonoaren sorreran eta desagertzean. 

Proiektuaren izenburua

Erreakzio poliatomikoen egitura elektronikoa, dinamikoa eta zinetikoa.

Helburua

Atmosferako prozesuetan parte hartzen duten erreakzio bimolekular poliatomikoak ikertzeko metodo teoriko konputazionalak garatzea.

Ikertzaile nagusia

Ernesto Garcia Para.

Ikerketa-taldea

M. Martinez, C. Sanchez, A. Saracibar.

Saila

Kimika Fisikoa.

Fakultatea

Farmazia Fakultatea (Ingurumen Zientziak).

Finantziak

MCyT, EHU/UPV, COST Europako Programa.