

CO, HO[•] e O₃: Estimativa de Suas Quantidades via Mecanismo de Decomposição de NMHC's Oriundos de Emissões Automotivas

Edilton de Souza Barcellos^{1*} (PQ), Márcia Miguel Castro Ferreira² (PQ).

¹ Departamento de Química/UFV, ² Instituto de Química/Unicamp - *barcello@ufv.br.

Palavras Chave: poluição atmosférica, alifáticos, aldeídos, monóxido de carbono, radicais hidroxila, ozônio.

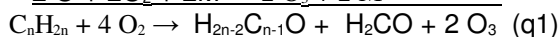
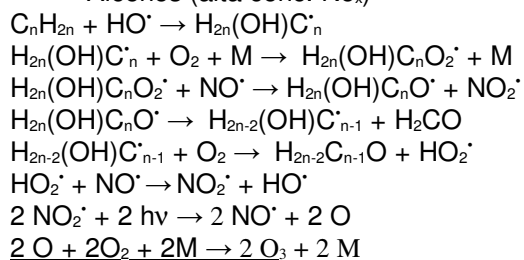
Introdução

Na região Metropolitana de São Paulo (RMSP), a principal fonte de emissão é automotiva. O ozônio no nível solo, nessa região, ocorre por produção fotoquímica direta na própria troposfera, estando presentes uma fonte de carbono (hidrocarbonetos), óxidos de nitrogênio (NO, NO₂) e luz solar^{1,2,3}. Com base nos poluentes de partida (apenas NMHC's) alifáticos (olefinas), com até 8 átomos de carbono, em fase gasosa (estudos em câmaras de "smog")⁴, e de mecanismos⁵ para a degradação desses compostos no nível solo, estimou-se quantidades de CO, HO[•] e O₃. O estudo considera cenário de alta concentração de NO_x, no qual produz-se o formaldeído mais um aldeído genérico (n átomos de carbono) e ozônio.

Resultados e Discussão

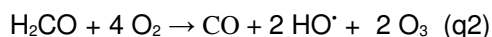
Abaixo, mecanismo para a degradação de um alceno de fórmula C_nH_{2n} por radicais hidroxila com a produção de um aldeído genérico, formaldeído e dois O₃.

Alcenos (alta conc. NO_x)



Os dois aldeídos formados, em presença de luz solar, produzem (via ciclo de eliminação formil⁶) CO, HO[•] e O₃.

O formaldeído na equação q1 é o composto inicial de uma sequência de reações cuja equação total pode ser representada pela sua reação com quatro moléculas de oxigênio para formar monóxido de carbono, radicais hidroxila e ozônio:



Por outro lado, o aldeído genérico de fórmula geral H_{2n-2}C_{n-1}O, produz um aldeído contendo um

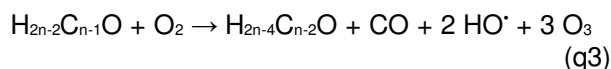
átomo de carbono a menos (H_{2n-4}C_{n-2}O), um CO, 2 HO[•] e 3 O₃.

Para o bloco de reações considerado, se n (número de átomos de carbono no alceno inicial) for igual a dois, o hidrocarboneto de partida é o etileno. Este produz duas moléculas de formaldeído. Cada uma destas produz um CO, dois radicais 2 HO[•] e duas moléculas de ozônio.

Assim, cada molécula de etileno inicial produzirá o dobro das quantidades expressas na equação q2, isto é, 2 CO, 4 HO[•] e 4 O₃.

Estendendo-se o cálculo para os casos nos quais o hidrocarboneto possui até oito átomos de carbono, obtém-se como resultado a equação geral q1.

O aldeído formado (H_{2n-2}C_{n-1}O) é o composto inicial da sequência de reações que pode ser representada pela equação total:



Conclusões

Os resultados obtidos segundo os mecanismos propostos permitem estimar as quantidades de monóxido de carbono, de radicais hidroxila e de ozônio que se formam na atmosfera poluída com NMHC's da classe dos alcenos. Assim, para n igual a **dois** são produzidos **1 n** CO, **2 n** HO[•] e **2 n** O₃. Por outro lado, quando n é maior do que **dois**, são gerados **3 n** CO, **2 n** HO[•] e **3 n** O₃.

Agradecimentos

A Jesuino Romano e Massayuki Kuromoto, da CETESB, pelo acesso ao Banco de Dados.

¹Baird, C. *Environment Chemistry*. W. H. Freeman and Company, New York, 1995..

²Jacob, D. J. *Atmospheric Environment*. 2000, 34, 2131.

³Jenkin, M. E.; Hayman, G. D. *Atmospheric Environment*, 1999, 22, 487.

⁴Manahan, E. S. *Environment Chemistry*. 6th ed. Lewis Publishers, CRC Press, Inc. 1994.

⁵Barcellos, E. S. *Tese de Doutorado*, 2003, Instituto de Química, Unicamp, Campinas, SP