

Córdoba, 18 de agosto de 2021

Prof. Dr. Gustavo Chiabrando
Decano
Facultad de Ciencias Químicas
Universidad Nacional de Córdoba

De nuestra mayor consideración:

Nos dirigimos a Usted, y por su intermedio a las Comisiones de Posgrado a los efectos de elevar la propuesta del curso “**“QUÍMICA ATMOSFÉRICA. MEDICIONES DE CAMPO, LABORATORIO Y MODELOS COMPUTACIONALES”** como curso de doctorado específico de currícula fija.

El presente curso, cuya dirección estará a cargo de los profesores María B. Blanco, Maximiliano Burgos, Gustavo G. Palancar, y la coordinación de los profesores Mariano A. Teruel, Luis Olcese y Fabio E. Malanca, posee una duración de 40 h en total, y tiene como propósito brindar los conceptos y fundamentos de los procesos químicos y dinámicos que ocurren en la atmósfera.

Se adjunta a la presente el programa del curso, docentes que participan de él y la bibliografía correspondiente.

Sin otro particular, saluda atentamente.

Prof. Dr. Fabio E. Malanca
Prof. Dpto. de Fisicoquímica
Facultad de Ciencias Químicas
Inv. Independiente INFIQC (CONICET)
Universidad Nacional de Córdoba

Con el Visto Bueno del Consejo Departamental
(Dpto. de Fisicoquímica, FCQ-UNC)

Dr. Fernando GARAY
Director
Dpto. Fisicoquímica
FCQ-UNC

CURSO DE CURRÍCULA FIJA:
“QUÍMICA ATMOSFÉRICA. MEDICIONES DE CAMPO, LABORATORIO Y MODELOS COMPUTACIONALES”

Objetivo

Brindar los conceptos y fundamentos de los procesos químicos y dinámicos que ocurren en la atmósfera. Se abordarán además los aspectos más avanzados del conocimiento actual sobre el tema, presentando tanto las técnicas como los modelos de última generación para el monitoreo de especies químicas relevantes en la atmósfera.

Dirigido a:

Alumnos de carreras doctorales o graduados de Química, Biología, Geología, Biotecnología, Física, Ingeniería, Geomática y disciplinas afines.

Organiza

Departamento de Fisicoquímica (FCQ - UNC).

Modalidad

Curso Teórico-Práctico. 40 h. Virtual (clases sincrónicas/simuladores).

Fecha/hora: 12 al 28 de Octubre de 2021. 9 a 12 h.

Directores

Profesores Dres: María B. Blanco, Maximiliano Burgos y Gustavo G. Palancar.

Coordinadores

Profesores Dres: Mariano A. Teruel, Fabio E. Malanca y Luis Olcese,

Colaboradores

Dr. Raúl Taccone, Dr. Rodrigo Gibilisco, Dra. Elizabeth Gaona Colmán, Dr. Guido Rimondino, Dra. Anabella Ferral y Dr. Rafael Fernández.

Plantel docente

Luis Olcese, Gustavo G. Palancar, Mariano Teruel, María B. Blanco, Maximiliano Burgos Paci, Fabio E. Malanca, Raúl Taccone, Rodrigo Gibilisco, Elizabeth Gaona Colmán, Guido Rimondino, Anabella Ferral y Rafael Fernández.

Correos de contacto (por favor, en caso de enviar un correo, enviarlo simultáneamente a los tres coordinadores).

fabio.malanca@unc.edu.ar

mariano.teruel@unc.edu.ar

luisolcese@unc.edu.ar

Aranceles e inscripción

A fijar por posgrado FCQ.

Examen

Evaluación mixta (resolución de caso integrador con exposición oral y cuestionario múltiple opción). Dia, 9 de Noviembre de 2021.

PROGRAMA

Capítulo 1: La atmósfera terrestre

- Introducción. Génesis y evolución de la atmósfera. Estructura física y composición química de la atmósfera terrestre. Balance energético.
- Transferencia de masa. Movimientos del aire: gradiente adiabático. Advección y convección. Estabilidad e inestabilidad vertical. Inversiones.
- Difusión de contaminantes. Deposición seca y húmeda.
- Perfil de radiación que llega a la atmósfera. Reacciones fotoquímicas en la atmósfera.
- Emisiones biogénicas y antropogénicas.

Capítulo 2: Química troposférica

- Mecanismos generales de reacción. Fuentes, sumideros y transporte de gases.
- Degradación oxidativa de compuestos orgánicos volátiles. Tiempos de vida.
- Ciclos y rol de los radicales libres en la atmósfera.
- La importancia del radical OH. Secuestro de radicales y formación de reservorios.
- Contaminantes: definición, clasificación, fuentes, difusión. Smog fotoquímico. Lluvia ácida. Aerosoles. Formación de aerosoles orgánicos secundarios, precursores naturales y antropogénicos.
- Procesos heterogéneos. Formación de particulado.

Capítulo 3: Química estratosférica

- Composición de la estratosfera y ciclos catalíticos.
- Ozono estratosférico. Mecanismo de Chapman. Ciclos catalíticos y nulos. Compuestos reservorios. Disminución de la capa de ozono. El agujero de ozono. Tendencias y proyecciones.
- Clorofluorocarbonos (CFC) y halones (tiempos de vida atmosféricos, fotólisis, potencial de disminución de ozono, etc.). Reemplazantes y su impacto ambiental. Concentraciones atmosféricas: tendencias.

Capítulo 4: Mediciones de campo de contaminantes

- Mediciones de contaminantes: aerosoles, CO, SO₂, O₃, VOC, NO_x, compuestos orgánicos persistentes, pesticidas. Monitoreo activo y pasivo.
- Teledetección y mediciones satelitales de contaminantes: alcances y limitaciones.

Capítulo 5: Técnicas estáticas. Cámaras de simulación y de smog

- Técnicas dinámicas: tubo de descarga en flujo.
- Técnicas estáticas vs. técnicas dinámicas. Métodos absolutos y relativos.
- Sistemas dinámicos con detección en tiempo real. Ventajas y limitaciones de las técnicas de fotólisis.

- Técnicas láser.

Capítulo 6: Modelos computacionales en la atmósfera

- Análisis de los modelos y mecanismos más usados de acuerdo al medio de propagación: modelos de dispersión y turbulencia en la atmósfera.
- Modelo de caja y de trayectoria. Requerimientos meteorológicos e inventarios de emisión para la implementación de los mismos.
- Modelos a escala regional y global.
- Comparación de resultados de modelos con mediciones de campo.

Bibliografía

General

- Brasseur, G. P.; Orlando, J. J.; Tyndall, G. S. (1999). Atmospheric chemistry and global change. Oxford University Press, New York.
- Finlayson-Pitts B.; Pitts J. Jr. (2000). Chemistry of the Upper and Lower Atmosphere- Theory, Experiments and Applications. ACADEMIC Press.
- Jacob D.J. (2004). Introduction to atmospheric chemistry, 2nd Edition, Princeton University Press
- Seinfeld J. H.; Pandis S. N. (2006). Atmospheric Chemistry and Physics. John Wiley& Sons, New York.
- Solomon, S.; Ivy, D.J.; Kinnison, D.; Mills, M.J.; Neely, R.R.; Schmidt, A. (2016). Emergence of healing in the Antarctic ozone layer. Science, 353, 269-274.
- Wayne R. (1998). Chemistry of Atmospheres, 2nd Edición, Oxford University Press.
- Jacobson, M. (2005). Fundamentals of Atmospheric Modeling (2nd ed.). Cambridge: Cambridge University Press. doi:10.1017/CBO9781139165389

Específica

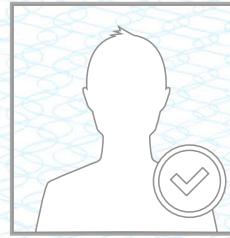
- Atkinson, R.; Arey, J. (2003). Atmospheric degradation of volatile organic compounds. Chemical Reviews, 103, 4605-4638.
- Bai, L.; Wang, J; Ma, X.; Lu, H. (2018) Air Pollution Forecasts: An Overview. International Journal of Environmental Research and Public Health, 15, 780. <https://doi.org/10.3390/ijerph15040780>
- Barnes I. and Rudzinski K. I. (2004) Simulation and Assessment of Chemical processes in a Multiphase Environment- NATO-OTAN book series C.
- Calvert, J., Mellouki, A., Orlando, J., Pilling, M., Wallington, T. Mechanisms of Atmospheric Oxidation of the Oxygenates. Editorial: Oxford University Press (2011).
- Cavalli, F. (2000). Atmospheric Oxidation of Selected Alcohols and Esters. Thesis. The Bergische Universität – Gesamthochschule Wuppertal, Alemania.
- Chen, X., Hopke, P. K., Carter, W. P. L. (2011) Secondary Organic Aerosol from Ozonolysis of Biogenic Volatile Organic Compounds: Chamber Studies of Particle and Reactive Oxygen Species Formation. Environ. Sci. Technol. 45 , 276-282 (2011).
- Gaffney, J. S.; Marley, N. A. (2021) The Earth and Space Chemistry. <https://doi.org/10.1021/acsearthspacechem.1c00143>
- Heard, D. (2006). Analytical Techniques for Atmospheric Measurement. Ed. Blackwell Publishing Ltd.
- Gibilisco, R. G., Barnes, I., Bejan, I., Wiesen, P. (2020) Atmospheric fate of two relevant unsaturated ketoethers: kinetics, products and mechanisms for the reaction of hydroxyl

- radicals with (E)-4-methoxy-3-buten-2-one and (1E)-1-methoxy-2-methyl-1-penten-3-one. *Atmos. Chem. Phys.*, 20, 8939-8951.
- Jiménez, E.; Cabañas, B.; Lefebvre, G. (2015) Environment, energy and climate change I. Environmental chemistry of pollutants and wastes. Springer
 - Kumar, A., Patil, R. S., Dikshit, A. K. and Kumar, R. (2017). Application of WRF Model for Air Quality Modelling and AERMOD - A Survey. *Aerosol Air Qual. Res.* 17: 1925-1937. <https://doi.org/10.4209/aaqr.2016.06.0265>.
 - Mahiba, S.; Harner, T. (2002) Characterization and comparison of three passive air samplers for persistent organic pollutants. *Environ. Sci. Technol.*, 36, 4142-4151.
 - Mellouki A.; Le Bras G.; Sidebottom H. (2003). Kinetics and Mechanisms of the Oxidation of Oxygenated Organic Compounds in the Gas Phase. *Chemical Reviews*, 103, 5077-5096.
 - Mellouki, A.; Wallington, T. J.; Chen, J. (2015). Atmospheric Chemistry of Oxygenated Volatile Organic Compounds: Impacts on Air Quality and Climate. *Chemical Reviews*, 115, 3984 - 4014.
 - Pilling M. J.; Seakings P. W. (1995). Reaction Kinetics. Oxford University Press, Oxford.
 - NIST Chemical Kinetics Database/Standard Reference Database 17, Version 7.0 (Web Version), Release 1.6.5. Data Version 2012.02. A compilation of kinetics data on gas-phase reactions.
 - Straccia C., V.G., Lugo, P.L., Rivela, C.B., Blanco, M. B., Wiesen, P., Teruel, M.A. (2021). OH-initiated degradation of methyl 2-chloroacetoacetate and ethyl 2-chloroacetoacetate: Kinetics, products and mechanisms at 298 K and atmospheric pressure. *Chemosphere* 274, 129659.

Signature Certificate

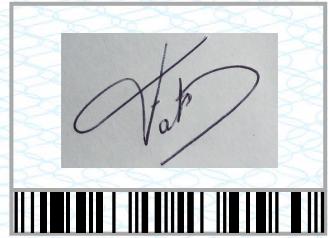
Document Ref.: E83QH-KR4EQ-VRQNY-PP6CU

Document signed by:

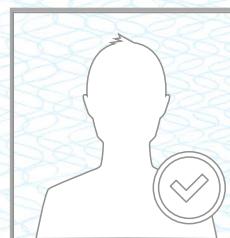


Fabio Malanca

Verified E-mail:
fabio.malanca@unc.edu.ar



IP: 190.31.158.115 Date: 19 Aug 2021 11:53:06 UTC



Fernando Garay

Verified E-mail:
fgaray@unc.edu.ar



IP: 200.16.16.13 Date: 19 Aug 2021 13:38:52 UTC

Document completed by all parties on:

19 Aug 2021 13:38:52 UTC

Page 1 of 1



Signed with PandaDoc.com

PandaDoc is a document workflow and certified eSignature solution trusted by 25,000+ companies worldwide.

