ESPECTROSCOPIA Y ESTRUCTURA DE MOLÉCULAS DE INTERÉS ASTROQUÍMICO Y SUS AGREGADOS CON AGUA

Gutiérrez-Quintanilla Alejandro[2], Niedojadlo Ana[1], Pino Gustavo[1] y Noble Jennifer[3].

[1]INFIQC (CONICET, UNC), Dpto. de Fsicoquímica, Fac. de Ciencias Químicas, Centro Láser de Ciencias Moleculares, Universidad Nacional de Córdoba. Ciudad Universitaria, Pab. Argentina, Ala 1, (5000) Córdoba, Argentina.
[2]Universidad de Pau y Pays de l'Adour, Technopôle Helioparc, 2 avenue P. Angot, 64053 Pau, Francia.
[3]CNRS, Universidad de Aix-Marseille, Laboratorio PIIM, Saint Jérôme, Av. Escadrille Normandie Niemen, 13013 Marsella, Francia.
gpino@unc.edu.ar

Introducción: La primera detección de una molécula aromática en el espacio fue en 2001, cuando se identificó benceno en una nebulosa protoplanetaria. Muy recientemente, en 2018 y luego de décadas de búsqueda, la molécula de benzonitrilo fue el primer ciclo aromático nitrogenado detectado en el medio interestelar (MIE).[1] A principios de 2021, se informó la detección de 1- y 2-cianonaftaleno.[2] Estos hallazgos sugieren que los hidrocarburos policíclicos aromáticos nitrogenados (PANHs) podrían ser un componente importante del inventario aromático interestelar. Tanto en el MIE como en distintos entornos astronómicos, los PANHs pueden formar agregados con moléculas pequeñas como el agua, lo cual altera su espectroscopia y propiedades fotofísicas y fotoquímicas. Por tanto, el estudio en laboratorio de la espectroscopia, fotoquímica y fotofísica de este tipo de PANHs y sus agregados con H_2O es de gran interés para comprender y predecir la composición química del MIE. En tal sentido, en este trabajo se presenta un estudio de la espectroscopia de 1-cianonaftaleno (1CNN) y de agregados con 1 y 2 moléculas de H_2O en fase gaseosa bajo condiciones de presión y temperatura similares a las del MIE.

Resultados y Conclusiones: La generación de 1CNN y sus agregados con 1 y 2 moléculas de H_2O se llevó a cabo mediante una expansión supersónica en una cámara de vacío, alcanzando presiones y temperaturas del orden de 10^{-6} mbar y 30 K respectivamente. Se registraron los espectros REMPI (1+1') en el intervalo de 225-325 nm observando corrimientos a menores energías para el caso de los agregados con respecto al espectro del 1CNN, y signos de evaporación de una molécula de agua en el caso del agregado 1CNN:2H_2O. Se determinó la energía de ionización de los agregados estudiados: 1CNN:H_2O (8,47 eV) y 1CNN:2H_2O (8,42 eV). Los resultados experimentales mostraron buen acuerdo con cálculos de estructura electrónica a nivel CAM-B3LYP/aug-cc-pvdz-D3.
La pequeña disminución observada en la energía de ionización con el grado de solvatación indica que el efecto de la molécula de agua es similar en los estados neutro e iónico de 1CNN.

Referencias bibliográficas

1) McGuire, B. A., et al. *Sci.*, **2018**, 359.6372, 202-205.
2) McGuire, B. A., et al. *Sci.*, **2021**, 371.6535, 1265-1269.
3) Klasinc, L., et al. *Pure Appl. Chem.*, **1983**, 55.2, 289-298.