Escala de reatividade de alguns compostos orgânicos voláteis para a cidade do Rio de Janeiro

Fernanda Reis Pagliares (IC), Sérgio Machado Corrêa (PQ)*

Departamento de Química e Ambiental, Faculdade de Tecnologia, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Estrada Resende Riachuelo s/n, Morada da Colina, Resende, RJ, 27523-000.

Palavras Chave: *simulação, modelagem, reatividade, ozônio, compostos orgânicos voláteis.*

Introdução

Este trabalho apresenta a continuação dos estudos de simulação de atmosfera urbana para a cidade do Rio de Janeiro, usando o modelo de trajetórias OZIPR[1] e o modelo químico SAPRC[2].

Porém, após a última atualização deste modelo pelo autor[2], diversos experimentos foram feitos por pesquisadores de diferentes grupos, propondo novas constantes de velocidade para as reações químicas, assim como nas estequiometrias e ainda novas reações.

Diante destes novos dados foi realizada uma atualização do modelo químico, onde cada dado inserido ou atualizado foi testado, para que o modelo continue sendo representativo para o conjunto de reações que acontecem na atmosfera.

O SAPRC disponível na literatura consta de 204 reações e 83 espécies, sendo 9 espécies constantes, 12 espécies inorgânicas reativas, 23 operadores e radicais, 23 espécies explicitas, 5 espécies pouco reativas e 12 agrupamentos.

Neste trabalho foram adicionadas mais 36 espécies explícitas e suas respectivas reações, em especial espécies com uma participação muito importante na química da atmosfera como diversos alcenos, alcinos, hidrocarbonetos cíclicos, ramificados, aldeídos, cetonas, ácidos carboxílicos, ésteres e monoaromáticos, todos da classe de compostos orgânicos voláteis (COVs).

Acredita-se que com este novo mecanismo tem-se um modelo mais representativo para a previsão de cenários de qualidade do ar das grandes cidades.

Resultados e Discussão

Basicamente os dados de entrada para uma simulação são os dados da localidade de estudo, a especiação e as concentrações iniciais dos COVs e dos poluentes legislados, dados meteorológicos, emissões primárias, localização geográfica e data (para se calcular o fluxo solar actínico), cobertura de nuvens, coeficientes de deposição seca e úmida e o modelo químico.

Os dados de saída são as concentrações horárias das espécies químicas.

Antes da inserção de novas espécies explícitas no mecanismo químico foi realizada a simulação do caso base da cidade do Rio de Janeiro, onde foram utilizados dados coletados na Avenida Presidente Vargas[3], sendo esta via um dos maiores corredores veiculares da cidade.

Para cada COV adicionado ao modelo, e que não estava presente na especiação dos COVs, foi adicionado 10 μg m^{-3} do poluente para fazer parte da mistura reacional. Este incremento de cada COV representa menos que 0,2% dos COVs totais da mistura, o que não afeta a química como um todo.

Como resultado tem-se a razão entre o incremento na concentração máxima de ozônio e o incremento do COV adicionado ao SAPRC, segundo a Figura 1.

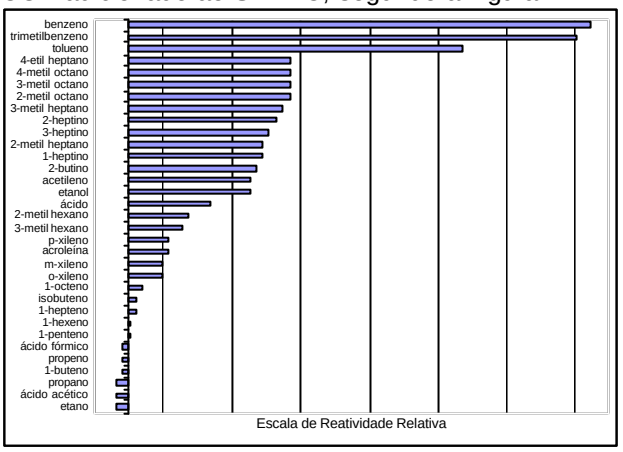

Figura 1 Variação da concentração de ozônio para cada um dos 36 COVs adicionado ao SAPRC.

Os resultados indicam que os COVs que mais influenciam na concentração de ozônio no Rio de Janeiro são os aromáticos e os insaturados, em função da reatividade destas ligações. Isto indica que um controle nas emissões destes compostos deve ser rigorosa, principalmente advinda do uso de combustíveis fósseis.

Conclusões

O estudo mostrou os 36 COVs inseridos no SAPRC, agora tratados na forma explícita, levam a um melhor ajuste do simulador, conduzindo a um detalhamento da química da troposfera. Outras moléculas importantes estão sendo alvo de estudo, visando uma melhor descrição da química da troposfera urbana.

[1] Carter, W. P. L. *Atmos. Environ.* 1990, 24 A, 481.

[2] Gery, M. W.; Crouse, R. R. *User's Guide for Executing OZIPR* , EPA-9D2196NASA, **1990**.

[3] Corrêa, S. M. *Tese de Doutorado em Química*, Instituto de Química, UFRJ, **2003**.