



**SOCIETÀ CHIMICA ITALIANA**  
Divisione di Chimica dell'Ambiente e dei Beni Culturali

**Modellizzazione delle reazioni fotochimiche nelle acque superficiali: Trasformazione degli inquinanti e mappatura della fotoreattività degli ambienti acquatici**

*Davide Vione [davide.vione@unito.it](mailto:davide.vione@unito.it), Marco Minella, Elisa De Laurentiis, Claudio Minero*  
*Dipartimento di Chimica, Università di Torino, Via P. Giuria 5, 10125 Torino*

## 1. Introduzione

Le reazioni fotochimiche nelle acque superficiali costituiscono importanti processi di degradazione di inquinanti biorefrattari e si dividono di solito in fotolisi diretta, in cui l'assorbimento di radiazione solare da parte dell'inquinante ne determina la trasformazione, ed in processi di fotolisi indiretta o sensibilizzata. In quest'ultimo caso la radiazione solare è assorbita da composti detti fotosensibilizzatori, quali ad esempio la materia organica disciolta cromoforica (CDOM) e gli ioni nitrito e nitrate. L'assorbimento di radiazione determina la produzione di specie reattive quali i radicali ossidrilici ( $\cdot\text{OH}$ ) e carbonato ( $\text{CO}_3^{\cdot-}$ ), l'ossigeno singoletto ( $^1\text{O}_2$ ) e gli stati di tripletto della CDOM ( $^3\text{CDOM}^*$ ). Tali specie sono in grado di reagire con varie molecole disciolte, tra cui gli inquinanti, causandone la trasformazione. I processi descritti svolgono un ruolo importante nell'autodepurazione dei corpi idrici ma possono talvolta produrre intermedi più pericolosi dell'inquinante di partenza [1,2].

Di recente, con lo sviluppo di un software in grado di modellizzare con successo i processi fotochimici nelle acque naturali (APEX: Aqueous Photochemistry of Environmentally-occurring Xenobiotics [3]), è stato possibile prevedere le reazioni di trasformazione degli inquinanti in funzione delle caratteristiche dell'ambiente acquatico (composizione chimica, profondità, stagione) ed iniziare a correlare i processi fotochimici con le conseguenze dei cambiamenti climatici [4].

## 2. Relazione

Il presente lavoro descrive una serie di applicazioni della modellizzazione fotochimica, inclusi il destino fotoindotto degli inquinanti e la mappatura della fotoreattività delle acque superficiali.

### 2.1. Processi di fototrasformazione

Le reazioni fotochimiche possono contribuire alla degradazione degli inquinanti ed alla inattivazione di microrganismi patogeni, tra cui i virus presenti nelle acque superficiali. Nel caso degli inquinanti è possibile prevedere non soltanto il tempo di semivita dei composti disciolti ma anche i processi prevalenti (fotolisi diretta e/o reazioni fotosensibilizzate dalle diverse specie reattive). Tutto questo è importante, poiché le varie reazioni fotochimiche portano alla formazione di intermedi con diverso impatto ambientale. Anche se non sempre un certo intermedio di reazione è specifico per un determinato processo fotoindotto, ogni reazione tende a produrre una miscela di intermedi con rese diverse e legate al processo stesso. Ad esempio, i pesticidi della famiglia delle feniluree producono specie tossiche per reazione con  $\cdot\text{OH}$  ma non con  $^3\text{CDOM}^*$ ; le condizioni ambientali che favoriscono il primo processo tendono dunque ad aumentare l'impatto ambientale di questa classe di inquinanti [5]. Il ruolo delle diverse reazioni fotochimiche (dirette ed indirette) ha anche importanza nel caso della fotoinattivazione dei virus, poiché processi diversi tendono a prevalere in acque caratterizzate da differente profondità e composizione chimica [6].

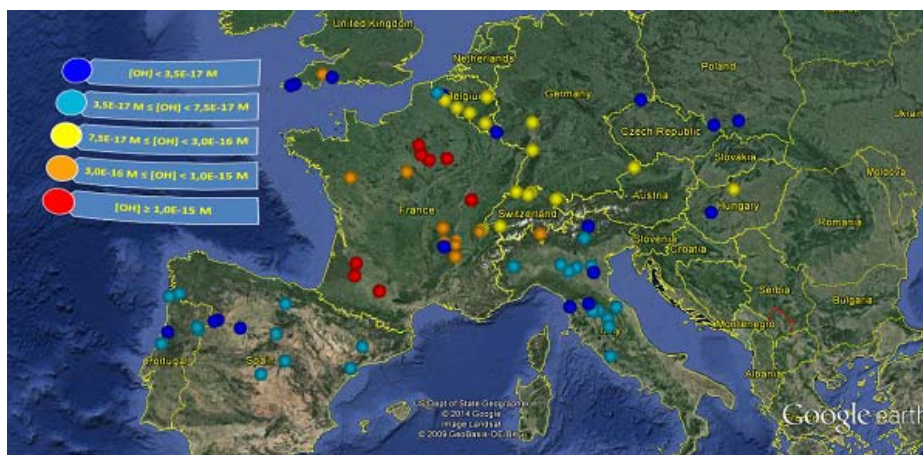
### 2.2 Mappatura della fotoreattività delle acque superficiali

A partire dai dati di composizione chimica delle acque è possibile prevedere l'importanza delle reazioni fotochimiche. A livello europeo, dati piuttosto estesi di composizione chimica sono



**SOCIETÀ CHIMICA ITALIANA**  
Divisione di Chimica dell'Ambiente e dei Beni Culturali

disponibili sul sito del *Global Environment Monitoring System* ([www.GEMStat.org](http://www.GEMStat.org)) e possono essere utilizzati per la modellizzazione fotochimica. La Figura 1 mostra un esempio dei risultati del lavoro di modellizzazione nel caso di  $\bullet\text{OH}$ , in condizioni estive e per valori di latitudine compresi tra 40 e 50°N (allo scopo di limitare la variabilità dell'irradianza solare). Dalla figura si evince che i livelli più alti di concentrazione di  $\bullet\text{OH}$  si riscontrano in Europa centrale (soprattutto in Francia) ed i livelli più bassi in Europa meridionale (Italia, Spagna). Tali risultati hanno implicazioni interessanti, per la fotodegradazione degli inquinanti che reagiscono prevalentemente con  $\bullet\text{OH}$  e per la formazione di intermedi tossici attraverso il medesimo processo (ad es. nel caso delle feniluree).



**Fig. 1** – Mappatura delle concentrazioni di  $\bullet\text{OH}$  (le più basse in blu, le più alte in rosso)

### 3. Conclusioni

Il lavoro di ricerca descritto permette di valutare i processi di trasformazione fotochimica degli inquinanti e di individuare le condizioni in cui essi possono essere più o meno persistenti, oppure in cui è favorita la formazione di intermedi pericolosi.

Gli sviluppi futuri riguarderanno la possibilità di correlare con crescente efficacia le modificazioni dei corpi idrici indotte dai cambiamenti climatici con i processi indotti dalla radiazione solare.

### Bibliografia

- [1] **K. Fenner, S. Canonica, L.P. Wackett, M. Elsner**: "Evaluating pesticide degradation in the environment: Blind spots and emerging opportunities", *Science*, 341, 752-758, 2013.
- [2] **K. McNeill** (guest editor): "Themed issue on aquatic photochemistry", *Environ. Sci.: Processes Impacts*, 16, 626-878, 2014.
- [3] **M. Bodrato, D. Vione**: "APEX (Aqueous Photochemistry of Environmentally occurring Xenobiotics): a free software tool to predict the kinetics of photochemical processes in surface waters", *Environ. Sci.: Processes Impacts*, 16, 732-740, 2014.
- [4] **D. Vione, M. Minella, V. Maurino, C. Minero**: "Indirect photochemistry in sunlit surface waters: Photoinduced production of reactive transient species", *Chemistry - Eur. J.*, 20, 10590-10606, 2014.
- [5] **D. Fabbri, M. Minella, V. Maurino, C. Minero, D. Vione**: "Photochemical transformation of phenylurea herbicides in surface waters: A model assessment of persistence, and implications for the possible generation of hazardous intermediates", *Chemosphere*, 119, 601-607, 2015.
- [6] **M. J. Mattle, D. Vione, T. Kohn**: "Conceptual model and experimental framework to determine the contributions of direct and indirect photoreactions to the solar disinfection of MS2, phiX174, and adenovirus", *Environ. Sci. Technol.*, 49, 334-342, 2015.