

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

**ESTUDIO DE REACCIONES SÓLIDO-LÍQUIDO MEDIANTE MÉTODOS ESPECTROSCÓPICOS PARA LA SÍNTESIS DE COMPUESTO NOVELES**

Peluas, Melina Gisella

Carlos O. Della Védova (Dir.), Rosana M. Romano (Codir.)

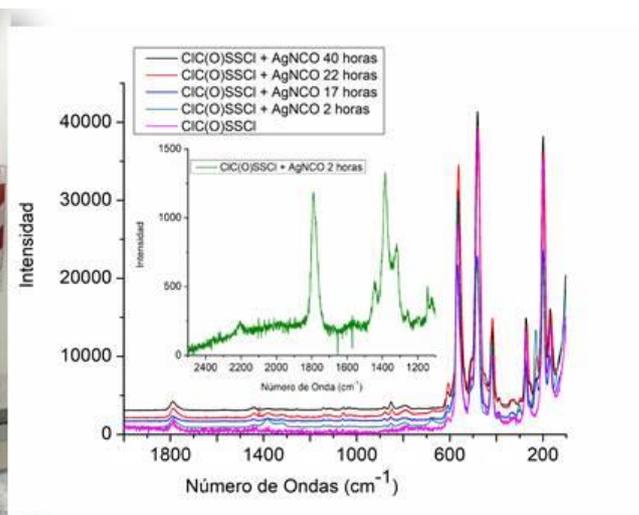
Centro de Química Inorgánica "Dr. Pedro J. Aymonino" (CEQUINOR)  
mpeluas@quimica.unlp.edu.ar

PALABRAS CLAVE: espectroscopia infrarroja, espectroscopia raman

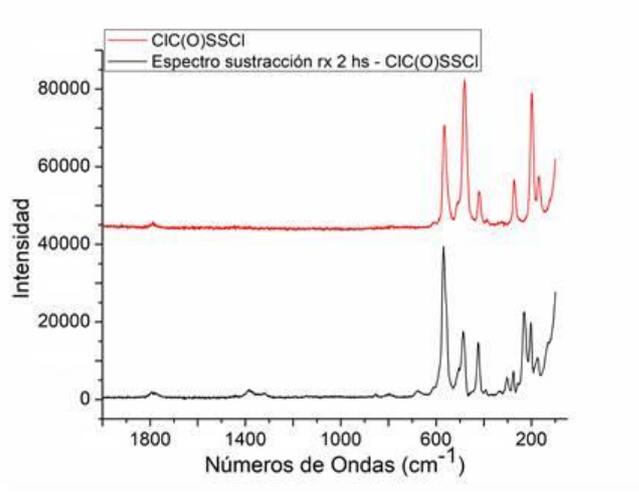
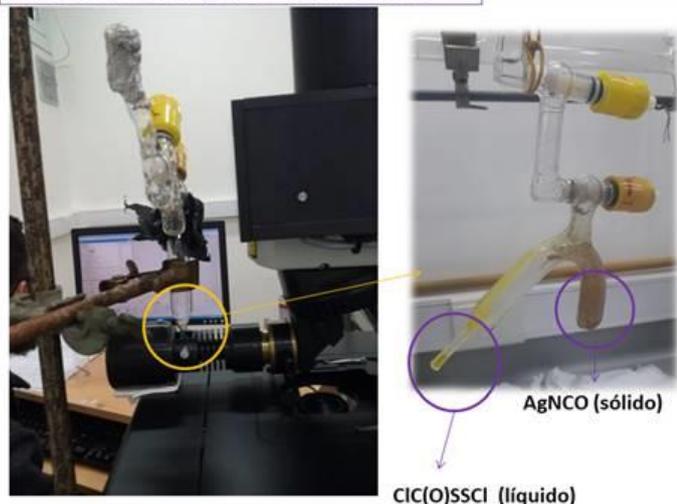
**STUDY OF SOLID-LIQUID REACTIONS BY SPECTROSCOPIC METHODS FOR THE SYNTHESIS OF NOVEL COMPOUNDS**

KEYWORDS: infrared spectroscopy, raman spectroscopy

Resumen gráfico



Reacciones heterogéneas líquido-sólido





## Resumen

En este trabajo se emplearon diferentes estrategias para el seguimiento de reacciones entre  $\text{CIC(O)SSCl}$  y la sal isocianato de plata,  $\text{AgNCO}$ , para la obtención del compuesto novel  $\text{CIC(O)SSNCO}$ . El  $\text{CIC(O)SSCl}$  fue sintetizado de acuerdo a la referencia [1], mientras que la sal  $\text{AgNCO}$  se obtuvo siguiendo el procedimiento descrito en la referencia [2]. Las reacciones se llevaron a cabo en condiciones de vacío, previa purificación y secado de los reactivos. Se ensayó la síntesis del compuesto buscado por dos métodos alternativos, con seguimiento por espectroscopías vibracionales. Los espectros IR y Raman experimentales obtenidos se compararon con los simulados por métodos teóricos.

Las reacciones heterogéneas líquido-sólido llevadas a cabo en una trampa, previamente evacuada, entre el  $\text{CIC(O)SSCl}$  líquido y la sal  $\text{AgNCO}$  sólida, fueron analizadas por espectroscopia FTIR en fase gaseosa, previa separación de las fracciones obtenidas. Esta metodología permitió

obtener información sobre los productos de reacción secundarios formados como  $\text{OCS}$ ,  $\text{SO}_2$  y  $\text{HNCO}$ . Cuando las mismas reacciones se realizaron en una celda especialmente diseñada, que permite monitorear la evolución de la reacción mediante la medida de espectros Raman a diferentes tiempos de reacción, se observó la disminución de las señales del reactivo líquido y la aparición de nuevas bandas, en baja proporción, que pueden ser atribuidas a la formación de la especie buscada. Se prevé la continuación de estos estudios mediante la realización de reacciones “en vuelo”, en matrices de gases criogénicas de gases inertes. La identidad de los productos, productos secundarios y/o intermedios de reacción se analizaron por comparación con espectros IR y Raman de especies conocidas y con la simulación computacional para el caso de sustancias no reportadas.