

ESTUDIO TEÓRICO CONFORMACIONAL Y DETECCIÓN ESPECTROSCÓPICA DEL CIC(O)SSNCO

Melina G. Peluas, Carlos O. Della Védova, Rosana M. Romano

CEQUINOR (UNLP, CCT-CONICET La Plata, asociado a CIC-PBA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata. Blvd. 120 N°1465, La Plata (1900), Argentina.

Correo electrónico de contacto: mpeluas@quimica.unlp.edu.ar

En este trabajo se realizó el estudio teórico conformacional del CIC(O)SSNCO. Se calculó para esta molécula una superficie de energía potencial en función de dos ángulos diédros, $\tau_1 = \text{Cl-C-S-S}$ y $\tau_2 = \text{C-S-S-N}$ utilizando la aproximación HF/6-311++G(d). Se optimizaron los mínimos obtenidos en la superficie con la aproximación B3LYP/6-311++g(d). En todos los casos las estructuras optimizadas de los conformeros no presentaron frecuencias imaginarias. Los conformeros de menor energía son el syn-(+)gauche y syn(-)gauche, con poblaciones relativas a 25 °C del 57% y 42%, respectivamente. Por otra parte, los conformeros anti-(+)gauche y anti(-)gauche presentan entre ellos una diferencia de energía del orden de 0,17 Kcal/mol y una población muy baja. Además, se modelaron los espectros IR y Raman con la aproximación B3LYP/6-311++g(d) para cada uno de los conformeros y se realizó una asignación tentativa completa de los modos vibracionales. Asimismo, se obtuvieron evidencias experimentales de la formación de la nueva especie CIC(O)SSNCO a partir del seguimiento in-situ, mediante espectroscopia Raman, de las reacciones heterogéneas líquido-sólido entre el compuesto CIC(O)SSCI (sintetizado de acuerdo con la referencia [1]) y la sal isocianato de plata, AgNCO (sintetizada de acuerdo con la referencia [2]).

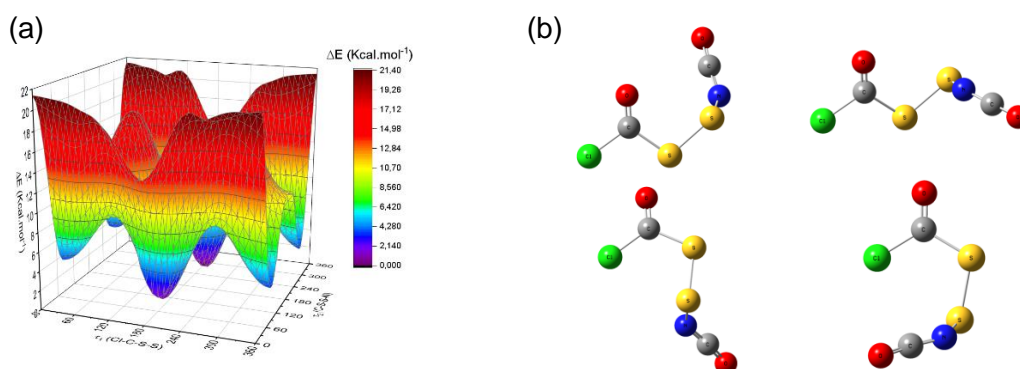


Figura 1: (a) Superficie de energía potencial calculado con la aproximación HF 6-311++G(d) en función de los ángulos diédros $\tau_1 = \text{Cl-C-S-S}$ y $\tau_2 = \text{C-S-S-N}$ del CIC(O)SSNCO. (b) Conformeros de CIC(O)SSNCO calculados con la aproximación B3LYP/6-311++G.

Agradecimientos. Al CONICET (PUE-17-BD20170173CO y PIP-342), la Facultad de Ciencias Exactas de la UNLP (11/X971) y la ANPCyT (PICT-2018-4355 y 2020-3746) por el apoyo financiero.

Referencias

[1] Tobón, Y. A.; Cozzarín, M. V.; Wang, W. G.; Ge, M. F.; Della Védova C. O.; Romano, R. M. *J. Phys. Chem. A*, **2011**, *115*, 10203-10210.

[2] Fan, S.; Chen, G.; Li, C.; Lv, C.; Han, Z.; Rao, J.; Hu, Y.; Zhang, C. *RSC Adv.*, **2015**, *00*, 1-3.