



# XI Congreso Argentino **QUÍMICA ANALÍTICA**

Corrientes / Argentina 2021

## **LIBRO DE RESÚMENES**

XI Congreso Argentino de Química Analítica  
30 de Noviembre al 03 de Diciembre 2021  
Corrientes - Argentina  
Modalidad Virtual

Congreso Argentino de Química Analítica

XI Congreso Argentino de Química Analítica : libro de resúmenes / compilación de Sergio Sebastián Samoluk ; César Adrián Lezcano ; coordinación general de Juan Daniel Ruíz Díaz ; dirigido por Roberto Gerardo Pellerano ; editado por Melisa Jazmin Hidalgo; Roxana María Itatí Goyechea ; Adriana Lucía Moresi ; Diana Corina Fechner y Michael Pérez Rodríguez ; ilustrado por Romina Paola Romero. - 1a ed compendiada. - Paso de la Patria : Roberto Gerardo Pellerano, 2022.

Libro digital, PDF

Archivo Digital: descarga y online

ISBN 978-987-88-5110-5

1. Química Analítica. I. Samoluk, Sergio Sebastián, comp. II. Lezcano, César Adrián, comp. III. Ruíz Díaz, Juan Daniel, coord. IV. Pellerano, Roberto Gerardo, dir. V. Hidalgo, Melisa Jazmin, ed. VI. Romero, Romina Paola, ilus. VII. Título.

CDD 543.1

# Detección y caracterización de enlaces de halógeno por medio de espectrofotometría UV-Vis y modelado molecular

Matias O. Miranda<sup>a\*</sup>, Carlos Galarza<sup>a</sup>, Javier I. Miranda<sup>a</sup> y Dario J.R. Duarte<sup>ab</sup>

a. IQUIBA-NEA (UNNE-CONICET) Avenida Libertad 5460 (3400) Corrientes.

b. FACENA-UNNE Avenida Libertad 5460 (3400) Corrientes.

\* e-mail: matorly@hotmail.com

Los enlaces de halógeno (EXs) son interacciones de tipo  $R-X\cdots B$  siendo R un átomo o grupo de átomos unido covalentemente a un halógeno X (I, Br, Cl y en menor medida F) y B una base de Lewis<sup>1,2</sup>. Este tipo de interacciones está presente prácticamente en cualquier sistema que incluya una especie halogenada y una base de Lewis, por lo que su detección experimental podría ser de importancia analítica<sup>3</sup>. En este trabajo realizamos un estudio teórico/experimental para detectar y caracterizar los EXs formados entre el bromo molecular y la acetona, por medio de Espectrofotometría UV-Vis y modernas técnicas Modelado Molecular. Por medio de estas técnicas, se optimizaron las geometrías de distintos complejos bromo-acetona. Luego se calcularon los espectros UV-Vis empleando la teoría del funcional de la densidad dependiente del tiempo (TD-DFT).

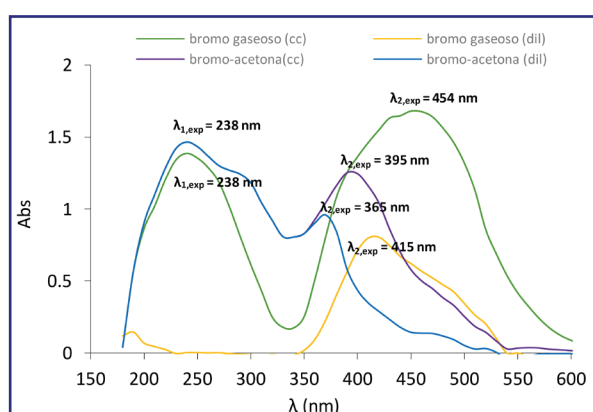


Figura 1. Espectro UV-Vis experimental del Br<sub>2</sub> gaseoso y mezclas de Br<sub>2</sub>-acetona.

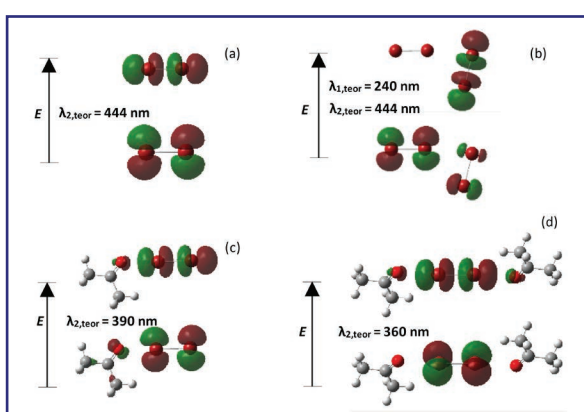


Figura 2. Orbitales Moleculares Canónicos HOMO y LUMO del Br<sub>2</sub> (a) y de los complejos Br<sub>2</sub>·Br<sub>2</sub> (b), Br<sub>2</sub>·Acetona (c) y Acetona·Br<sub>2</sub>·Acetona (d), con sus respectivos  $\lambda_{abs}$ .

Experimentalmente se observa que el bromo gaseoso concentrado (Br<sub>2</sub> (cc)) muestra dos picos de absorción  $\lambda_{1,exp} = 238$  nm y  $\lambda_{2,exp} = 454$  nm (fig 1 - línea verde), mientras que a bajas concentraciones (Br<sub>2</sub> (dil)) se observa solo uno  $\lambda_{2,exp} = 415$  nm (fig 1 - línea amarilla). Las soluciones de bromo en acetona (Br<sub>2</sub> (Ac)) muestran que el pico de máxima absorción del bromo ( $\lambda_{2,exp}$ ) se desplaza hacia menores longitudes de onda a medida que la dilución aumenta (fig 1 - líneas púrpura y azul). En la figura 2 se representan los orbitales moleculares correspondientes a las transiciones electrónicas características del Br<sub>2</sub> (fig 2a) y de los complejos complejos Br<sub>2</sub>·Br<sub>2</sub>, Br<sub>2</sub>·Ac y Ac·Br<sub>2</sub>·Ac (fig 2b, 2c y 2d, respectivamente), con sus respectivos máximos de absorción ( $\lambda_{teor}$ ). Los resultados teóricos muestran que la presencia del  $\lambda_{1,exp}$  en el espectro del Br<sub>2</sub> (cc) (fig 1 - línea verde) se debe a la formación de EXs entre moléculas del mismo gas (fig 2b). Además, el desplazamiento del  $\lambda_{2,exp}$  está íntimamente relacionado al número de EXs que forma el Br<sub>2</sub> con la acetona, siendo  $\lambda_{2,teor} = 444$  nm para los complejos que no poseen EXs ( $\lambda_{2,exp} = 454$  nm para el Br<sub>2</sub> (cc)),  $\lambda_{2,teor} = 390$  nm para los que presentan 1 EX ( $\lambda_{2,exp} = 395$  nm para el Br<sub>2</sub> (Ac) concentrado), y  $\lambda_{2,teor} = 360$  nm para aquellos que presentan 2 EXs ( $\lambda_{2,exp} = 365$  nm para el Br<sub>2</sub> (Ac) diluido). En otras palabras, el  $\lambda_2$  se desplaza hacia longitudes de onda menores a medida que aumenta el número de EXs entre el Br<sub>2</sub> y la acetona. Finalmente, se observan muy buenas correlaciones entre los resultados experimentales y teóricos, por lo que esta metodología podría ser aplicada para la detección y caracterización de algunos EXs que se presentan tanto en fase gas como en solución acuosa.