



**XXII**  
**CAFOI**

**VIRTUAL**

**Congreso Argentino de Fisicoquímica y  
Química Inorgánica - La Plata 2021**



## XXII CONGRESO ARGENTINO DE FÍSICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA LA PLATA 2021

### ESTUDIO TEÓRICO-EXPERIMENTAL DE LA REACCIÓN DE OXIDACIÓN DE ALIL METIL SULFURO POR PERÓXIDO DE HIDRÓGENO

Mario G. Díaz<sup>1</sup>, Gabriela Ferrari<sup>2,3</sup>, Matías Andrada<sup>1,3</sup>, Paulina Montaña<sup>2,3</sup>, Juan C. Garro Martínez<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup> Instituto Multidisciplinario de Investigaciones Biológicas (IMIBIO-SL), <sup>2</sup> Instituto de Química de San Luis (INQUISAL), Avenida Ejército de los Andes 950, San Luis. <sup>3</sup> Área de Química Física, Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia, UNSL, Chacabuco 917, San Luis.

Email: [mgd\\_169@hotmail.com](mailto:mgd_169@hotmail.com)

#### Introducción

Alil metil sulfuro (AMS) muestra un especial interés como agente antioxidante. Las investigaciones actuales sobre los compuestos antioxidantes que previenen el estrés oxidativo, se centran particularmente en la reducción de las conocidas especies reactivas de oxígeno (EROs) tales como el anión radical superóxido, el radical hidroxilo y/o el peróxido de hidrógeno (H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>). Aquí realizamos un estudio teórico-experimental de la reacción de oxidación de AMS por peróxido de hidrógeno.

#### Metodología

Los experimentos se realizaron por fotólisis aeróbica, usando una solución acuosa del sensibilizador Riboflavina (Rf), capaz de fotogenerar H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> y otras EROs [1]. Por otro lado, mediante cálculos mecano-cuánticos usando la metodología IRC (coordenadas intrínsecas de reacción) se analizaron diferentes vías de reacción entre AMS y H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> [2].

#### Resultados y Conclusiones

Los resultados de la fotólisis seguida por espectroscopia de absorción UV-Vis evidenciaron las interacciones tanto del sensibilizador como del sustrato con EROs fotogeneradas. La posible desactivación de las EROs fue evaluada a través del consumo de oxígeno en presencia de los desactivadores específicos: azida de sodio (NaN<sub>3</sub>) y catalasa (CAT). De estos perfiles es posible asegurar que AMS interacciona tanto con O<sub>2</sub>(<sup>1</sup>Δ<sub>g</sub>) como con H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>. El consumo de oxígeno se incrementa en presencia de CAT, lo que puede deberse a la competencia de la enzima y de AMS por la especie H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>. Se analizaron tres posibles vías de reacción entre AMS y H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, hidrogenación, sulfoxidación y epoxidación. Los resultados indicaron que la vía de hidrogenación es un proceso termodinámicamente no espontáneo, mientras que los mecanismos de sulfoxidación y epoxidación son procesos espontáneos. Sin embargo, los bajos valores de la constante de velocidad ( $k \approx 10^{-10}$  a  $10^{-30}$ ) indicarían que el H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> no es la especie dominante en el proceso fotosensibilizado global.

#### Referencias

- 1) Montaña MP et al. Vitamin B2-sensitized photooxidation of structurally related dihydroxyflavonoids, *Dyes & Pigm.* 58: 113–120, 2003.
- 2) Díaz, M. et al. Scavenging of Hydrogen Peroxide by Allyl Methyl Sulfide and Diallyl Sulfide, Two Garlic Active Compounds: A Theoretical Study. DOI: 10.1002/slct.201904725

Fernández	Mariela	258, 616
Fernandez	Mauricio	368
Fernández	Ricardo	352, 392, 472
Fernández	Wanda	381
Fernández Albanesi	Luisa	120
Fernández Lorenzo	Mónica	563, 581
Ferrari	Gabriela	222, 228
Ferraris	Ma. Del Pilar	166
Ferreira	Larissa	190
Ferrer	Evelina	61, 64, 80, 83, 494
Ferreyra	Joaquin	34
Ferreyra	Nancy	147, 189, 197, 198
Ferullo	Ricardo	523
Fidelio	Gerardo	346
Fierro	Anabella	87
Filippin	Francisco	385
Finelli	Zunilda	71, 322
Fioravanti	Federico	108, 163, 164
Fiorini	Guillermo	152, 165
Flamini	Daniel	391, 406
Flexer	Victoria	81, 141, 402, 409
Foi	Ana	77
Fonrouge	Sergio	479
Fonseca	José	225
Fonticelli	Mariano	33, 195, 196, 273
Fornero	Esteban	283, 296, 348
Fornés	Magalí	73
Franca	Carlos	65
Franceschini	Esteban	329, 354, 365, 366, 384, 412, 489
Franchetti	Ma. Claudina	166
Franco	Vanina	146
Frechero	Marisa	564, 603, 630, 637
Frias	María	28, 49
Friedrich	Malena	382
Frontodona	Xavier	60
Fuchs	Vanesa	597
Fuente	Silvia	470, 480, 523
Fuentes	Rodolfo	612
Fuentes	Silvina	385
Funes	Alejandro	78
Funes	Camila	474, 475
Fungo	Fernando	332, 333, 393
Fungo	Florencia	369
Gadea	Esteban	116, 436
Galante	Micaela	556