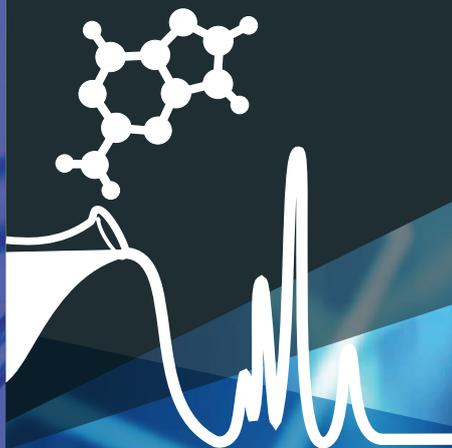


e-book ISBN 978-987-688-210-1



XX Congreso Argentino de Físicoquímica y Química Inorgánica

Néstor M. Correa y Luis A. Otero

Compiladores

16 al 19 de Mayo de 2017

Ciudad de Villa Carlos Paz, Córdoba, Argentina

UniRío
editora

DECAIMIENTO FOTOQUÍMICO DEL 4-AMINOTIOFENOL AISLADO EN MATRIZ

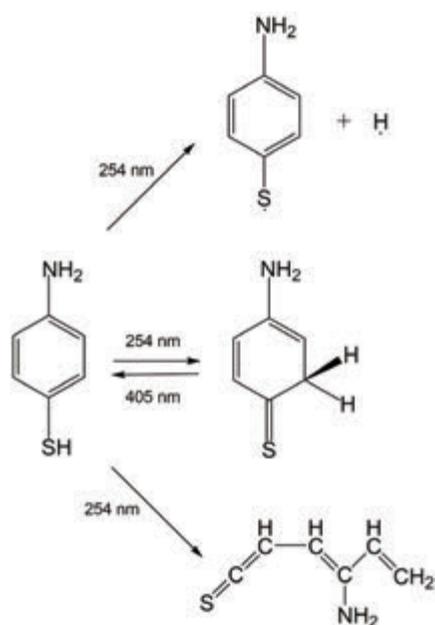
Páez Jerez Ana L.^a, Robles N. Lis^a y Sander Wolfram^b

^a INQUINOVA UNT CONICET. Facultad de Ciencias Exactas y Tecnología. Universidad Nacional de Tucumán. Av. Independencia 1800. Tucumán, República Argentina.

^b Lehrstuhl für Organische Chemie II. Ruhr Universität Bochum. Bochum, Germany.

nrobles@herrera.unt.edu.ar

Motivación: Nuestro proyecto es el de dilucidar aspectos importantes de la química del azufre, en particular de las especies reactivas de azufre (RSS) que se forman en procesos de importancia en la química y la biología (1). Con el objeto de entender la influencia que ejerce un sustituyente en las propiedades de las RSS y los factores que afectan la estabilidad del centro radicalario, como así también los productos generados por su interacción con otras moléculas, se presenta el estudio del 4-aminotiofenol.



Resultados: El espectro de IR del 4-aminotiofenol aislado en matriz de argón a bajas temperaturas se reportó por primera vez, junto con la posterior irradiación de la matriz a diferentes longitudes de onda. Los cambios más importantes tuvieron lugar bajo irradiación a 254 nm, dando lugar a diversos fotoproductos: el radical 4-aminotiofenol, una tiona cíclica y una tioquetena conjugada (ver esquema). Un mecanismo tentativo para la formación de estas especies involucra la escisión del átomo de H del grupo tiol, con la consecuente migración del hidrógeno a una nueva posición en el anillo aromático y la apertura del anillo. Los productos formados fueron identificados por comparación de los espectros experimentales con los calculados usando la aproximación B3LYP/aug-cc-pVTZ.

Conclusiones: A partir del análisis de los resultados se puede concluir que la presencia del grupo amino produce efectos opuestos en la especie radical formada y en su precursor. Por un lado, provoca un alargamiento del enlace S–H, haciéndolo más débil, en el 4-aminotiofenol que en el tiofenol, y por otro, un acortamiento del enlace C–S, que adquiere mayor carácter de doble enlace en el radical 4-aminotiofenol que en el radical del tiofenol sin sustituir. Estos efectos combinados favorecen la eliminación del átomo de hidrogeno del grupo tiol y la formación de un radical más estable.

Referencias

- 1) Gruhlke, M.C.H., Slusarenko, A. J., *Plant Physiology and Biochemistry*, **2012**, 59, 98-107.