

DETERMINACIÓN DEL RENDIMIENTO CUÁNTICO DE DESCOMPOSICIÓN DE 2-BROMOTIOFENO EN ACETONITRILLO Y METANOL.

Rocío Vilches^a, Olga S. Herrera^a, Jorge D. Nieto^b y Silvia I. Lane^b

^aDepartamento de Química, F.C.N., U.N.P.S.J.B. Km 4, 9000, Comodoro Rivadavia, Chubut, Argentina. (susanah@unpata.edu.ar).

^bInstituto de Investigaciones en Fisicoquímica de Córdoba (INFIQC), Centro Laser de Ciencias Moleculares, Departamento de Fisicoquímica, U.N.C. Ciudad Universitaria, 5000, Córdoba, Argentina.

Introducción

Estudios previos de la reacción de fotodebromación de 2-bromotiofeno en solventes donores de H y de la reacción fotoinducida de 2-bromotiofeno en n-heptano, diclorometano, metanol y acetonitrilo muestran que el tiofeno es el producto principal en todos los solventes estudiados [1-5].

Los rendimientos cuánticos de descomposición de 2-bromotiofeno y de formación de tiofeno en ciclohexano, metanol y éter etílico determinados por Párkányi y colaboradores son del mismo orden, se encuentran en el intervalo 0,04-0,10 y prácticamente no se ven afectados por la presencia de oxígeno [1, 2].

Objetivos

Determinar el rendimiento cuántico de descomposición de 2-bromotiofeno en acetonitrilo y metanol a temperatura ambiente utilizando como actinómetro ferrioxalato de potasio [6, 7].

Resultados

La concentración inicial de las soluciones de 2-bromotiofeno en acetonitrilo y metanol fue variada entre $1,0 \times 10^{-4}$ M – $1,8 \times 10^{-4}$ M y la fotólisis se realizó hasta un 8,0 % de conversión utilizando la radiación proveniente de una lámpara de mercurio de baja presión ($\lambda=253,7$ nm).

La solución de ferrioxalato de potasio fue obtenida a partir de una solución de alumbre férrico y una solución ácida de oxalato de potasio siguiendo el procedimiento de Baxendale y Bridge [8].

A efectos de verificar que el procedimiento seguido en los experimentos realizados utilizando esta técnica es adecuado se comprobó la variación lineal del número de iones ferroso obtenidos por la fotorreacción del actinómetro químico con el tiempo de fotólisis y para validar la metodología utilizada se comparó el valor de rendimiento cuántico determinado para la descomposición de 2-bromotiofeno en metanol con resultados previamente obtenidos [1].

Los valores de rendimiento cuántico (Φ) de descomposición de 2-bromotiofeno en metanol y acetonitrilo en soluciones aireadas y en atmósfera de N₂ obtenidos en este trabajo se muestran a continuación y se comparan con los que en metanol se informan en literatura. Los valores que se informan corresponden a los promedios de los obtenidos en los experimentos realizados.

Solvente	Metanol		Acetonitrilo
Φ soluciones aireadas *(SD)	0,071 (0,006)	0,049 [1]	0,046 (0,006)
Φ soluciones en atmósfera de N ₂ *(SD)	0,063 (0,005)	0,047 [1]	0,043 (0,006)

*(SD) Desviación estándar

Conclusiones

La determinación de la concentración de 2-bromotiofeno en acetonitrilo y metanol por espectrofotometría UV-visible resultó adecuada en experimentos realizados a conversión inferior a 8,0 % para la determinación del rendimiento cuántico de descomposición de 2-bromotiofeno en los solventes estudiados.

El rendimiento cuántico de descomposición de 2-bromotiofeno determinado en este trabajo, utilizando como actinómetro ferrioxalato de potasio y siguiendo la metodología de Baxendale y Bridge, se encuentra en el intervalo informado en la literatura para distintos solventes.

No se observó diferencia significativa en el rendimiento cuántico de descomposición de 2-bromotiofeno en acetonitrilo y metanol en soluciones aireadas y en las estudiadas en atmósfera de N₂.

Referencias

- [1] A.T. Jeffries, C. Párkányi, *Z. Naturforsch.*, **31b**, 345, (1976).
- [2] C. Párkányi, *Pure & Appl. Chem.*, **55**, 331 (1983).
- [3] O.S.Herrera, M.C. Tiedemann, M.S. Díaz, J.D. Nieto, S.I. Lane. *XV Congreso Argentino de Fisicoquímica y Qca. Inorgánica*. AAIFQ. Tandil. Argentina (2007).
- [4] A. Alís, M. Gutiérrez, O. Herrera, J. Nieto, S. Lane. *XXVIII Congreso Argentino de Química y 4to. Workshop de Química Medicinal*. AQA Lanús, Argentina (2010).
- [5] O.S. Herrera, N.R. Rementería, J.D. Nieto y S.I. Lane. *XVII Congreso Argentino de Fisicoquímica y Qca. Inorgánica*. AAIFQ. Córdoba. Argentina (2011).
- [6] C.G. Hatchard, C.A. Parker, *Proc. Roy. Soc. A*, **278**, 518 (1956).
- [7] H.J. Kuhn, S.E. Braslavsky, R. Schmidt, *Pure & Appl. Chem.*, **76**, 2105 (2004).
- [8] J. H. Baxendale, N.K. Bridge, *J. Phys. Chem.*, **59**, 783 (1955).