

Mechanism for the S_NAr reaction of atrazine with endogenous thiols: experimental and theoretical study

Por: [Calfuman, K](#) (Calfuman, K.)^[1]; [Gallardo-Fuentes, S](#) (Gallardo-Fuentes, S.)^[1]; [Contreras, R](#) (Contreras, R.)^[1]; [Tapia, RA](#) (Tapia, R. A.)^[2]; [Campodonico, PR](#) (Campodonico, P. R.)^[3]
[Ver ResearcherID y ORCID](#)

NEW JOURNAL OF CHEMISTRY

Volumen: 41

Número: 21

Páginas: 12671-12677

DOI: 10.1039/c7nj02708g

Fecha de publicación: NOV 7 2017

Tipo de documento: Article

[Ver impacto de la revista](#)

Resumen

The reaction mechanism in aromatic nucleophilic substitution reactions is discussed using kinetic study complemented with quantum chemical calculations. The model system is the reaction of a series of biothiols toward atrazine (ATZ) in aqueous media. The proposed reaction mechanism discloses a non-catalyzed pathway and the presence of a deprotonated (thiolate) nucleophile in water suggests that the reaction mechanism is borderline between a stepwise route and a concerted process. The full analysis of the potential energy surface reinforces the addition/elimination mechanism. Despite numerous attempts to locate transition structures associated with the leaving group departure, they were unsuccessful, presumably because this step is extremely fast.

Palabras clave

KeyWords Plus: [AROMATIC-SUBSTITUTION REACTIONS](#); [ACETONITRILE](#); [PROTEIN](#); [SITES](#); [RINGS](#); [IONS](#); [PATH](#)

Información del autor

Dirección para petición de copias: Calfuman, K (autor para petición de copias)

+ Univ Chile, Fac Ciencias, Dept Quim, Casilla 653, Santiago, Chile.

Direcciones:

+ [1] Univ Chile, Fac Ciencias, Dept Quim, Casilla 653, Santiago, Chile

+ [2] Pontificia Univ Catolica Chile, Fac Quim, Dept Organ, Casilla 306, Santiago 6094411, Chile

+ [3] Clin Alemana Univ Desarrollo, Fac Med, Ctr Quim Med, Codigo Postal 771-0162, Santiago, Chile

Direcciones de correo electrónico: karlacalfuman@gmail.com

Financiación

Entidad financiadora	Número de concesión
Nucleo Milenio	CILIS-RC-130006
Fondo de Innovación para la Competitividad, del Ministerio de Economía, Fomento y Turismo, Chile	
FONDECYT	3150170 1150759

[Ver texto de financiación](#)

Editorial

ROYAL SOC CHEMISTRY, THOMAS GRAHAM HOUSE, SCIENCE PARK, MILTON RD,
CAMBRIDGE CB4 0WF, CAMBS, ENGLAND

Información de la revista

- Impact Factor: [Journal Citation Reports](#)

Categorías / Clasificación

Áreas de investigación: Chemistry

Categorías de Web of Science: Chemistry, Multidisciplinary

Información del documento

Idioma: English

Número de acceso: **WOS:000413526200036**

ISSN: 1144-0546

eISSN: 1369-9261