



ESTUDIO TEÓRICO COMPARATIVO DE ACETILACIÓN DE ETILAMINA CATALIZADA POR IONES Zn^{2+} y Mn^{2+}

Silvana Caglieri; Héctor Macaño; Mariángeles Pagnan

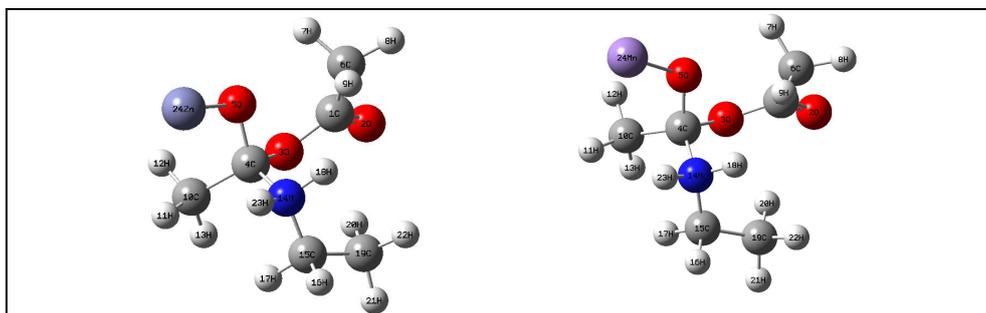
CIQA-Centro de Investigación y Transferencia en Ingeniería Química Ambiental.
Universidad Tecnológica Nacional - Facultad Regional Córdoba. Avenida Cruz Roja
Argentina esquina Maestro López. Córdoba, Argentina.
scaglieri@quimica.frc.utn.edu.ar

La acetilación de aminas es de gran interés por la utilidad de sus productos de reacción dentro de la industria química y porque constituye una de las transformaciones más usadas en síntesis orgánica, ya que proporciona un medio eficiente para la protección de grupos amino en un proceso sintético. La acetilación de aminas con anhídrido acético es una reacción de sustitución nucleofílica sobre carbono insaturado, siendo el nucleófilo la propia amina. Esta reacción puede ser catalizada por ácidos de Lewis, como por ejemplo iones metálicos. Se han realizado estudios de acetilación de aminas empleando ácidos de Lewis (Farhadi y Panahandehjoo, 2010).

El objetivo de este trabajo es comparar mediante un estudio teórico el comportamiento de la reacción de acetilación de etilamina, catalizada por iones Zn^{2+} y Mn^{2+} .

Se diseñaron, optimizaron y determinaron los parámetros geométricos de todos los compuestos que intervienen en ambas reacciones, incluidos los intermediarios. Para realizar los cálculos mencionados se emplearon los métodos DFT basado en la teoría de funcionales de densidad y dentro de este se utilizó el B3LYP, y MP2, basado en la teoría perturbativa de Møller-Plesset. Se optó por la función de base 6-31G*. Para el cálculo de las correspondientes energías se emplearon el método UFF. Para ambas reacciones, catalizadas por iones Zn^{2+} y Mn^{2+} , se calcularon las energías de activación y se obtuvieron valores de 9.59 y 17.45 kcal/mol respectivamente. La Figura 1 muestra las estructuras de ambos intermediarios.

Fig. 1: Intermediarios con Zn^{2+} y Mn^{2+}



Referencias bibliográficas

Farhadi, S. y S. Panahandehjoo; *Spinel-Type Zinc Aluminate ($ZnAl_2O_4$) Nanoparticles Prepared by the Co-Precipitation Method: A Novel, Green and Recyclable Heterogeneous Catalyst for the Acetylation of Amines, Alcohols and Phenols under Solvent-Free Conditions*, Appl. Catal., A.: 382, 293-302 (2010).