



## PROYECTO - *QUÍMICA ORGÁNICA COMPUTACIONAL: ESTUDIO TEÓRICO DE ACILACIÓN DE AMINAS*

**Director:** Prof. Ing. Silvana Caglieri

**Co-Director:** Prof. Ing. Héctor Macaño

**Investigadores Integrantes:** Ing. Mariángeles Pagnan; Ing. Gustavo Servetti; Ing. Pamela Zanel

**Becarios Alumnos:** Vanina Serra; Milagros Di Paola

**Lugar donde se desarrolla:** CIQA – Centro de Investigación y Transferencia en Ingeniería Química Ambiental. Facultad Regional Córdoba. Universidad Tecnológica Nacional

### RESUMEN

El estudio de la acilación 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 y económico para la protección de grupos amino en un proceso sintético. La acilación de una amina es una reacción de sustitución nucleofílica sobre carbono insaturado, siendo el nucleófilo la propia amina. Se han llevado a cabo estudios teóricos (Tong et.al, 2012) y trabajos experimentales (Naik et al., 2004) sobre esta reacción y coinciden en que la misma transcurre a través de la formación de un intermediario tetraédrico.

El objetivo de este proyecto consiste en estudiar la acilación de diferentes aminas alifáticas y aromáticas, estableciendo un orden de reactividad de las mismas frente a dicha reacción, empleando como herramienta la química teórica computacional y comparando los resultados teóricos con datos experimentales.

El estudio teórico se lleva a cabo empleando el programa Gaussian'09 - Gauss View 5.0. y los siguientes métodos de estructura electrónica: DFT/B3LYP base 3-21G\* y base 6-31G\*; MP2 y AM1, mediante los cuales se optimizan las geometrías y estructuras de todos los compuestos orgánicos que intervienen en la acilación, a saber: aminas y anhídrido acético (reactivos) y ácido acético y amidas (productos), incluyendo el cálculo de las correspondientes energías. Además se diseñan y modelan las geometrías y las estructuras de los intermediarios de reacción de cada acilación, incluyendo el cálculo de las correspondientes energías.

Como complemento del estudio teórico se lleva a cabo en el laboratorio de CIQA la acilación de las siguientes aminas: propilamina, hexilamina, isopropilamina, anilina y difenilamina. Los reactivos y productos se analizan y cuantifican en un cromatógrafo gaseoso y los resultados se expresan en conversión mol%.

El orden de reactividad reportado por el estudio teórico coincide con los resultados experimentales. La propilamina presenta la mayor reactividad frente a la acilación en comparación con las demás aminas alifáticas y con respecto a las aminas aromáticas, la anilina muestra una mayor conversión en comparación con la difenilamina.

### REFERENCIAS

- Naik S., Bhattacharjya G., Talukdar B., Patel B.K., Chemoselective Acylation of Amines in Aqueous Media, European Journal Organic Chemistry: 6, 1254-1260 (2004).
- Tong, X., Z. Ren, X. Qü, Q. Yang and W. Zhang, Efficient amide formation from arylamines and esters promoted by AlCl<sub>3</sub>/Et<sub>3</sub>N: an experimental and computational investigation, Research on Chemical Intermediates: 38, 1961-1968 (2012).