

ESTUDIO TEÓRICO COMPARATIVO DE ACETILACIÓN DE AMINAS CATALIZADA POR IONES Co^{2+}

Silvana Claudia Caglieri^a

^a CIQA - Centro de Investigación y Transferencia en Ingeniería Química Ambiental. Universidad Tecnológica Nacional - Facultad Regional Córdoba. Avenida Cruz Roja Argentina esquina Maestro López. X5016ZAA. Córdoba, Argentina. scaglieri@quimica.frc.utn.edu.ar

Resumen

Se llevó a cabo un estudio teórico comparativo de acetilación de etilamina y anilina catalizada por iones Co^{2+} , a través del análisis y comparación de los intermediarios de reacción correspondientes. El estudio de 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 frecuentemente usadas en síntesis orgánica, ya que proporciona un medio eficiente para la protección de grupos amino en un proceso sintético. Para el diseño y optimización de las estructuras de todas las especies que intervienen en ambas reacciones, se utilizó el método DFT, y para el cálculo de las correspondientes energías se empleó el método UFF. La acetilación de etilamina catalizada con iones Co^{2+} reporta una energía de activación 6.78 kcal/mol menor en comparación con la acetilación de anilina.

Introducción

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 llevado a cabo estudios experimentales de acetilación de aminas empleando ácidos de Lewis [1] y [2]. Los iones metálicos actúan como ácidos de Lewis catalizando la acetilación, debido a la formación de un complejo con el oxígeno del carbonilo, facilitando la polarización del mismo y favoreciendo de esta manera el ataque del agente nucleofílico (amina) al carbono del carbonilo.

El objetivo de este trabajo consiste en efectuar un estudio teórico comparativo de la reacción de acetilación de anilina y etilamina, catalizada por iones Co^{2+} , a través del análisis de los correspondientes intermediarios de reacción.

La Figura 1 muestra la reacción general de acetilación de etilamina ($\text{R}=\text{C}_2\text{H}_5$) y anilina ($\text{R}=\text{C}_6\text{H}_5$) con anhídrido acético, catalizada por iones Co^{2+} , cuyos productos de reacción son: ácido acético y las amidas N-etilacetamida y N-fenilacetamida respectivamente.

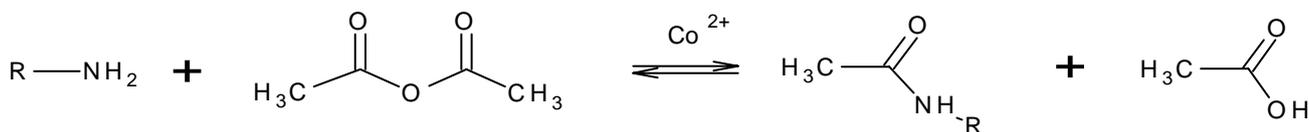


Figura 1. Esquema General de Acetilación de Aminas

