

XX Congreso Argentino

FÍSICOQUÍMICA Y
QUÍMICA INORGÁNICA

Carlos Paz, Córdoba

16 al 19 de Mayo de 2017

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

Caglieri Silvana C. y Macaño Héctor R.

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

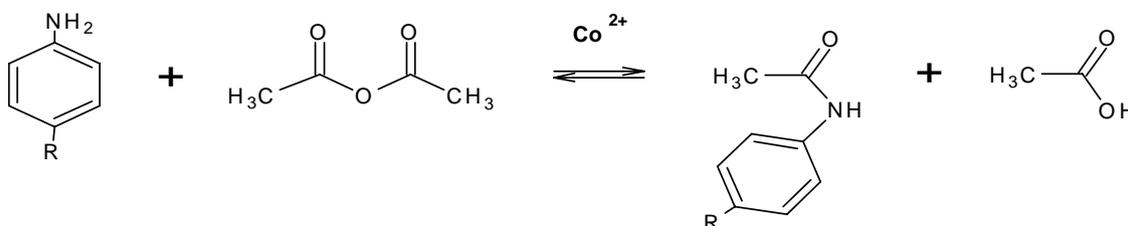
Introducción

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 es una reacción de sustitución nucleofílica sobre carbono insaturado, siendo el nucleófilo la propia amina. Esta reacción puede ser catalizada por ácidos de Lewis. Se han llevado a cabo estudios experimentales de acetilación de aminas empleando iones metálicos [1].

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

La Figura muestra la reacción general de acetilación de anilina ($\text{R}=\text{H}$) y p-metil-anilina ($\text{R}=\text{CH}_3$) con anhídrido acético, catalizada por iones Co^{2+} , cuyos productos de reacción son: ácido acético y las amidas N-fenilacetamida y N-p-metilfenilacetamida respectivamente.



Resultados y Conclusiones

Para llevar a cabo el estudio teórico se emplearon los métodos DFT basado en la teoría de funcionales de densidad y dentro de este se utilizó el B3LYP. Se optó por la función de base 6-31G*. Para el cálculo de las correspondientes energías se empleó el método UFF - Universal Force Field, útil para sistemas inorgánicos.

Se obtuvieron energías de activación de 21.63 kcal/mol y 16.47 kcal/mol para la reacción de acetilación de anilina y de p-metil-anilina respectivamente. La mayor reactividad de la p-metil-anilina frente a la acetilación en comparación con la anilina se puede asociar al efecto dador de electrones ejercido por el grupo metilo sobre el anillo aromático, debido al efecto inductivo por diferencia de hibridación ($\text{sp}^3 \rightarrow \text{sp}^2$), que favorece la disposición electrónica por parte del nitrógeno de la amina, aumentando su nucleofilidad.

Referencias

- 1) Kour Sodhi, R., Kumar, V. and Satya, P., The Open Catal. J. India, **2013**, 6, 1-7.