

Acetilación de Aminas Alifáticas y Aromáticas: Estudio Teórico

Silvana C. Caglieri y Héctor R. Macaño

CIQA-Centro de Investigación y Transferencia en Ingeniería Química Ambiental,
Facultad Regional Córdoba, Universidad Tecnológica Nacional, Córdoba - Argentina
(e-mail: scaglieri@quimica.frc.utn.edu.ar; hmacano@quimica.frc.utn.edu.ar)

Recibido Sep. 1, 2015; Aceptado Nov. 4, 2015; Versión final Nov. 19, 2015, Publicado Abr. 2016

Resumen

Se realizó un estudio teórico comparativo de reactividad de metilamina, anilina, difenilamina, p-nitroanilina y p-metil-anilina, frente a la reacción de acetilación, a través del análisis de los intermediarios de reacción correspondientes. La acetilación de aminas es una de las transformaciones más frecuentemente usadas en síntesis orgánica, ya que proporciona un medio eficiente y económico para proteger el grupo amino en un proceso sintético. Las energías de activación y las energías de los intermediarios de reacción se calcularon con dos niveles de teoría: teoría funcional de densidad (DFT) con el estándar B3LYP y la teoría de perturbación de Møller-Plesset (MP2) combinados con el conjunto de base 6-31G*. Los valores obtenidos se compararon con datos de literatura. La metilamina presentó la mayor reactividad frente a la acetilación y el método DFT reportó los valores más bajos de energía.

Palabras clave: acetilación; amina; teoría funcional de densidad (DFT); teoría de perturbación de Møller-Plesset (MP2)

Aliphatic and Aromatic Amines Acetylation: Theoretical Study

Abstract

A comparative theoretical study of reactivity of methylamine, aniline, diphenylamine, p-nitroaniline and p-methylaniline acetylation, through the analysis of the corresponding reaction intermediates was carried out. The acetylation of amines is one of the most frequently used transformations in organic synthesis since it provides an efficient and inexpensive means for protecting amino group in a synthetic process. The activation energies and the reaction intermediates energies were calculated with two levels of theory: density functional theory (DFT) with the standard B3LYP and the Møller-Plesset perturbation theory (MP2) combined with the basis set 6-31G*. The calculated values were compared with literature data. The methylamine presented the higher reactivity in the acetylation reaction and the DFT method gave the lower energy values.

Keywords: acetylation; amine; density functional theory (DFT); Møller-Plesset perturbation theory (MP2)

