

# INFLUENCIA DE SOLVENTES POLARES APRÓTICOS EN LA ACETILACIÓN DE ETILAMINA CATALIZADA POR ÁCIDO: ESTUDIO TEÓRICO

**Cagliari S, Belbruno A, V. Serra**

CIQA - Centro de Investigación y Transferencia en Ingeniería Química Ambiental, Universidad Tecnológica Nacional - Facultad Regional Córdoba. Avenida Cruz Roja Argentina esquina Maestro López. Ciudad Universitaria (5016), Córdoba, República Argentina. scagliari@quimica.frc.utn.edu.ar

Se realizó un estudio teórico de la acetilación de etilamina catalizada por ácido en presencia de diferentes solventes polares apróticos: acetonitrilo, acetona y dimetilsulfóxido, a través del análisis del intermediario correspondiente, cuya formación se considera la etapa determinante de la velocidad de reacción.

El estudio de 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 frecuentemente usadas en síntesis orgánica, ya que proporciona un medio eficiente para la protección de grupos amino en un proceso sintético.

La acetilación de etilamina con anhídrido acético es una reacción de sustitución nucleofílica sobre carbono insaturado, siendo el nucleófilo la propia amina. El aumento de la velocidad de reacción se puede conseguir, con el agregado de una base, un ácido de Brønsted o un ácido de Lewis como catalizador. El mecanismo de esta reacción involucra iones, por lo que es necesario el empleo de disolventes polares.

Para el diseño y optimización de las estructuras de todas las especies que intervienen en la reacción y para el cálculo de las energías mínimas de todas las moléculas que participan en la misma, se emplearon los métodos DFT basado en la teoría de funcionales de densidad y dentro de este se empleó el B3LYP, y MP2, basado en la teoría perturbativa de Møller-Plesset, con la función de base 6-31G\*. El mismo procedimiento se llevó a cabo para identificar los parámetros geométricos y calcular la energía del intermediario. Para estudiar la influencia de los diferentes solventes en la reacción de acetilación se utilizó el modelo IEFPCM.

El dimetilsulfóxido, debido a su elevada constante dieléctrica y polaridad, resultó ser el solvente más óptimo para la reacción de acetilación de etilamina, reportando una energía de activación de 9.14 Kcal/mol.