

ESTUDIO TEÓRICO COMPARATIVO DE SÍNTESIS DE ACETANILIDA

Caglieri, Silvana C.^{1*} y Pagnan, Mariángeles¹

1: CIQA - Centro de Investigación y Transferencia en Ingeniería Química Ambiental
Facultad Regional Córdoba
Universidad Tecnológica Nacional
Avenida Cruz Roja Argentina esquina Maestro López- Ciudad Universitaria (X5016ZAA),
Córdoba, República Argentina
scaglieri@quimica.frc.utn.edu.ar

Resumen. *Se llevó a cabo un estudio teórico comparativo de la síntesis de acetanilida, mediante la acetilación de anilina por un procedimiento convencional y por un método alternativo “síntesis verde”, a través del análisis y comparación de los intermediarios correspondientes, cuya formación se considera la etapa determinante de la velocidad de reacción, promoviendo de esta manera la generación de procesos ambientalmente más favorables. 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 y económico para la protección de grupos amino en un proceso sintético. En el procedimiento convencional, la acetilación de anilina se realiza con anhídrido acético, en presencia de piridina, cuyos productos de reacción son el ácido acético y acetanilida. El método alternativo emplea ácido acético en presencia de Zn^{+2} que actúa como ácido de Lewis, obteniéndose como productos de reacción acetanilida y agua. Para el diseño y optimización de las estructuras de todas las especies que intervienen en ambas reacciones y para el cálculo de sus energías mínimas, 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*. Todos los cálculos se realizaron empleando el programa Gaussian '09. El mismo procedimiento se llevó a cabo para identificar los parámetros geométricos y calcular la energía de los intermediarios correspondientes. Se reportó energías de activación de 17.57 kcal/mol y 18.97 kcal/mol para la reacción convencional y para la “síntesis verde” respectivamente, siendo esta última una alternativa viable, con ahorro atómico y minimización de subproductos.*

Palabras clave: Acetanilida, Acetilación, Anilina, MP2, DFT