

ESTUDIO TEÓRICO DEL MECANISMO DE LA HIDRÓLISIS ÁCIDA DE N-METIL ACETAMIDA

Silvana C. Caglieri, Héctor R. Macaño y Mariángeles Pagnan

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.
E-mail: scaglieri@quimica.frc.utn.edu.ar

Introducción

El estudio de la hidrólisis de amidas alifáticas, es de gran interés, por la utilidad de sus productos de reacción dentro de la industria química y porque dicha reacción constituye una vía para la degradación de poliamidas. El objetivo de este trabajo consiste en un estudio teórico del mecanismo de reacción de la hidrólisis, catalizada por ácido, de N-metil acetamida, cuyos productos de reacción son ácido acético y metil amina. Se han llevado a cabo estudios teóricos [1] y experimentales [2] sobre dicha hidrólisis, coincidiendo en que la misma transcurre a través de la formación de un intermediario tetraédrico.

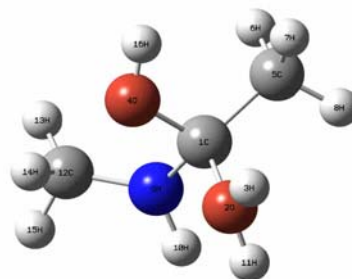
Metodología

Para llevar a cabo este estudio se diseñaron y optimizaron las estructuras de todas las especies que intervienen en la reacción, determinándose los parámetros geométricos óptimos correspondientes, calculando además las energías mínimas de todos los compuestos, reactivos y productos, como así también la energía del intermediario, etapa determinante de la velocidad de reacción. Los cálculos teóricos se realizaron mediante el empleo del método de estructura electrónica DFT, basado en la teoría de funcionales de densidad, el cual incluye efectos de correlación electrónica y dentro de este se empleó el B3LYP. Para calcular las energías mínimas de todas las moléculas que intervienen en la reacción se utilizó el método semiempírico AM1 que usa parámetros derivados de resultados experimentales.

Resultados y Conclusiones

En la figura se muestra la estructura del intermediario de la reacción y en la tabla se reportan algunos de sus parámetros geométricos. Para esta reacción se obtuvo una energía de activación de 19.93 kcal/mol.

Longitud	Valor	Angulo	Valor
r (C ₁ -O ₄)	1.40 Å	θ (C ₁ -N-C ₁₂)	120.84 °
r (C ₁ -N)	1.46 Å	θ (C ₁ -N-H)	117.25 °
r (C ₁ -C ₅)	1.52 Å	θ (O ₄ -C ₁ -C ₅)	107.33 °
r (N-H)	1.02 Å	θ(O ₂ - C ₁ -N)	104.09 °
r (C ₁ -O ₂)	1.42 Å	θ (C ₅ -C ₁ -O ₂)	112.77 °



Referencias

1. D. Zahn, J.Phys. Chem.B. 107 (2003) 12303.
2. A. Saika, J. Am. Chem. Soc.82 (1960) 3540.