

Síntesis del sabor artificial a fresas y frambuesas (2-butoxy-naftaleno) a partir de 2-naftol por medio de una reacción de sustitución bimolecular.

Autor: Luis F. Quezada Carné: 18028 Correo: que18028@uvg.edu.gt

Compañeros/as: Estaban del Valle & Jennifer Sandoval

Auxiliar: Leonel Guerra

Universidad del Valle de Guatemala

Ingeniería en Bioinformática

Laboratorio de Química Orgánica 1 Sección 30 Práctica 10

Fecha de realización: 7 de mayo de 2019

Abstract

En la práctica se sintetizó 2-butoxy-naftaleno a partir de 2-naftol por medio de una reacción SN2 con el objetivo de obtener el sabor artificial de fresas y frambuesas. Asimismo, fue posible comparar el procedimiento con el de una SN1 y observar las condiciones de reacción adecuadas para poder llevar a cabo esta síntesis. Se obtuvo que la cantidad final de cera fue 0.669g con un rendimiento de 24%. La principal fuente de error fue la pérdida de producto final recrystallizado durante la filtración por vacío ya que su punto de fusión es muy bajo y se solubilidad con facilidad. Se concluye que Fue posible sintetizar el sabor con las características esperadas; sin embargo, el rendimiento fue bajo indicando que es difícil recuperar todo el producto que realmente se formó. Se recomienda realizar la práctica bajo condiciones climáticas favorables y asegurarse de mantener fríos los cristales finales para evitar que se fundan de nuevo.

Palabras Clave: reacción de sustitución bimolecular, nucleófilo y condiciones de reacción

Introducción

Una reacción de sustitución es aquella en la donde un grupo en un compuesto es sustituido por otro grupo. Las reacciones de sustitución estudiadas son las monomoleculares (SN1) y las biomoleculares (SN2). Cada una de ellas tiene sus propias condiciones de reacción y factores que la afectan. En la práctica se realiza una SN2 y es por eso por lo que hay que tener en cuenta la información de esta para poder llevarla a cabo correctamente.

Los solventes adecuados para una reacción SN2 son apróticos; como el DMSO y DMF. Un buen grupo saliente sería un haluro de alquilo (base débil). Para el sustrato de una SN2 se favorecen los que presenten menos impedimento estérico; por lo tanto, se favorecen los haluros primarios, luego los secundarios y de último los terciarios (no reaccionan). Para este tipo de sustitución, el nucleófilo debe ser fuerte ya que se da por golpe (1 fase). Durante los estados de transición, los enlaces se muestran a la hora en que entra el ataque nucleofílico y se libera el grupo saliente. Con respecto a la configuración de la molécula final ocurre una inversión de

Walden la cual invierte los sustituyentes (Wade & Simek, 2017).

Para la reacción a realizar, el nucleófilo sería el 2-naftol ya que es quien desplazará al halógeno del yodobutano. Es importante remarcar que el 2-naftol debe ser desprotonado para ser un nucleófilo fuerte, por lo cual se utiliza hidróxido de sodio el inicio de la reacción.

Metodología

Primero hay que asegurarse que toda la cristalería a utilizar este limpia y sin residuos de agua o contaminantes. Añadir en un balón 25mL de NaOH, 2g de naftol y 10mL de etanol. También, adjuntar un frijol magnético y perlas de ebullición. Luego se procede a montar el sistema de reflujo para calentar por ~15 min hasta que se disuelva el sólido. Una vez líquida toda la solución, enfriar a temperatura ambiente y agregar 2mL de yodobutano y dejar reflujo por 45 min a 1 hora aproximadamente. Alistar un baño de hielo, transferir la muestra a un beaker de 250mL y colocarla en el baño de hielo. Con una varilla de vidrio raspar las paredes del beaker para impulsar la

cristalización del producto. Luego se procede a armar el sistema de filtración por vacío. Luego con un papel filtro previamente pesado se filtra el producto haciendo continuos lavados con agua fría para evitar que se solubilice de nuevo. Pesas de nuevo el papel filtro y obtener la cantidad de producto final (Esteb, J., Magers, J., McNulty, A., Morgan, P. & Wilson, A., 2009).

Resultados

Cuadro 1. Resultados cualitativos de la cera final obtenida.

Característica	Observado/Percibido	Esperado
Olor	A fresa suave	Sí
Color	Cristales blancos brillantes	Sí
Textura/Composición	Material suave y ceroso	Sí

Cuadro 2. Cantidad inicial de 2-naftol utilizada y la final de 2-butoxy-naftaleno obtenida comparada con la cantidad de producto final esperada.

2-naftol inicial (g)	Producto final (g)	Producto esperado (g)	% rendimiento
2.008	0.669	2.79	24%

Discusión

Luego de llevar a cabo los procesos experimentales fue posible afirmar que los objetivos se cumplieron ya que las características del producto fueron las esperadas lo cual indica que sí se lograron dar las condiciones de reacción adecuadas para favorecer una reacción de sustitución SN2; sin embargo, el rendimiento de la reacción se presentó bajo (24%).

Como se puede observar en el Cuadro 2, fue posible recuperar 0.669g de producto final a partir de 2.008g de 2-naftol utilizados. Las características del producto sí fueron las esperadas (Cuadro 1 & Figura 1), al tocarlo este presentó una textura y composición como de "cera", la cual rápidamente se deshizo y solubilizó en la mano dejando un olor persistente a fresa suave. La desventaja es que el producto formado tiene un punto de fusión entre 31-35°C (por eso al tener contacto con la

piel se derritió), lo cual dificultó el proceso de filtración por vacío haciendo que porciones del mismo se perdieran.

Es importante remarcar que el solvente de la reacción (etanol) no es aprótico por lo que se usa en reacciones SN1. A pesar de eso, esta es una excepción ya que, si se apega a la teoría, el solvente adecuado para una reacción donde el reactivo es un alcóxido es el alcohol del mismo; entonces el solvente hubiera sido el mismo 2-naftol y eso no se puede dar. La reacción que compete con esta es la SN1, es por eso que se realiza el reflujo a altas temperaturas para favorecer la SN2. Por otro lado, es necesario hacer uso del hidróxido de sodio en el inicio de la reacción para poder convertir (desprotonar) el 2-naftol es un nucleófilo fuerte (parte de las condiciones de reacción de una SN2).

Se recomienda realizar la práctica bajo condiciones climáticas favorables y asegurarse de mantener fríos los cristales finales para evitar que se fundan de nuevo.

Conclusiones

Se obtuvo que el rendimiento del proceso fue de 24% con una cantidad final de cera con sabor artificial a fresa de 0.669g. La mayor fuente de error provino de la pérdida de producto final recrystallizado durante la filtración por vacío ya que su punto de fusión es muy bajo y se solubilidad con facilidad.

Anexos

Cálculo 1. Cantidad final de 2-butoxy-naftaleno esperada.

$$\frac{2.008g \text{ } C_{10}H_8O}{1 \text{ mol } C_{10}H_8O} \times \frac{1 \text{ mol } C_{10}H_8O}{144.2 \text{ g}} \times \frac{200.3 \text{ g}}{1 \text{ mol } C_{14}H_{16}O} = 2.79g \text{ } C_{14}H_{16}O$$

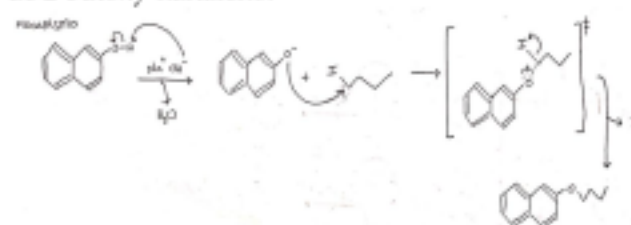
Cálculo 2. Porcentaje de Rendimiento de la reacción SN2 para la síntesis del sabor artificial a fresa.

$$\frac{0.669g \text{ } C_{14}H_{16}O}{2.79g \text{ } C_{14}H_{16}O} = 24\%$$

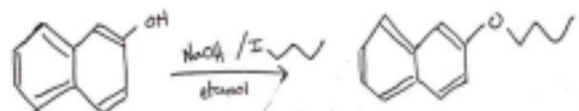
Figura 1. Producto final obtenido (cera con el olor y sabor artificial a fresa y frambuesa).



Figura 2. Mecanismo de reacción para la síntesis de 2-butoxy-naftaleno.



Reacción 1. Síntesis de 2-butoxy-naftaleno a partir de 2-naftol con hidróxido de sodio y yodobutano, con etanol como solvente.



Referencias

1. Wade, L., Simek, J. (2017). Organic Chemistry. 9 ed., California: Pearson. Pg. 262-265
2. A Simple SN2 Reaction for the Undergraduate Organic Laboratory; John J. Esteb, John R. Magers, Lu Anne McNulty, Paul Morgan and Anne M. Wilson; Department of Chemistry, Butler University, Indianapolis; J. Chem. Educ., 2009, 86 (7), p 850;

