### LABORATORIO DE QUIMICA ORGANICA I. LQ-213

Practica No 7.

## TEMA: AROMATICOS, SINTESIS DE ACIDO PICRICO

### **Objetivos:**

- Conocer el benceno como principal representante de los compuestos hidrocarburos aromáticos.
- Aplicar propiedades físicas al benceno y sus derivados para ver su comportamiento, como ser solubilidad y oxidación.
- Sintetizar ácido pícrico.

# INTRODUCCIÓN

En los inicios de la química orgánica, la palabra aromáticos se usaba para describir sustancias fragantes como ser: Benzaldehído (sabor de las cerezas, durazno, y almendras).

En la actualidad el término aromático se emplea al referirse al benceno y a los compuestos relacionados estructuralmente con él.

El benceno sufre relativamente pocas reacciones y estas proceden lentamente y requieren con frecuencia de calor y catálisis.

En 1825, Faraday aisló un compuesto puro que presentaba un punto de ebullición de 80°C, a partir de una mezcla aceitosa que condensaba del gas del alumbrado, que era el combustible que se empleaba en las lámparas de gas.

Posteriormente Mitscherlich sintetizó el mismo compuesto, calculo la densidad de vapor, lo que le permitió obtener el peso molecular que era aproximadamente 78, el cual corresponde a una fórmula molecular de C6H6. Como dicho compuesto se había obtenido a partir de la goma benjuí, se le denomino bencina y a partir de ahí derivó el nombre a benceno como actualmente se le conoce.

Ya a finales del siglo XIX se fueron descubriendo muchos otros compuestos que parecían estar relacionados con el benceno pues tenían bajas relaciones de hidrógeno a carbono y despedían aromas agradables, además presentaban la peculiaridad de que se podían convertir en benceno o compuestos afines. A este grupo de compuestos se le llamo aromáticos por presentar aromas agradables. Posteriormente el estudio de la estabilidad que presentaban estos compuestos, llevo consigo que el término aromático se utilizara para designar a compuestos que presentaban una estabilidad muy similar, independientemente de su olor.

August kekule propuso en 1866 la estructura del benceno, la cual se derivó así:

El Benceno se emplea para la producción de medicinas y de otros derivados importantes como la anilina y el fenol. El benceno y sus derivados se encuentran incluidos en el grupo químico conocido como compuestos aromáticos. En Europa era frecuente añadir el benceno mezclado con tolueno y otros compuestos asociados al combustible de los motores. Recientemente se ha tenido en cuenta la condición de agente cancerígeno.

El benceno puro arde con una flama humeante debido a su alto contenido de carbono. Mezclado con grandes proporciones de gasolina constituye un combustible aceptable.

En general, podemos decir que los compuestos aromáticos están constituidos por el benceno y todos aquellos compuestos que presentan un comportamiento químico similar y que dan lugar a la *serie aromática*, la cual se construye a partir del benceno. Los compuestos aromáticos tienen las siguientes características:

- 1. Son cíclicos, anillo aromático.
- 2. Hibridación sp2
- 3. Planos
- 4. Conjugados.
- 5. Presentan estabilidad inusual.
- 6. Reaccionan con electrófilos para dar productos de sustitución.
- 7. Cumplen la regla de Huckel 4n + 2

Las reacciones de los compuestos orgánicos son reacciones donde el anillo sirve de fuente electrónica a reactivos que buscan electrones (electrófilos) y debido a la estabilidad por resonancia, estas reacciones conducen a la sustitución, algunas de las reacciones son:

- a) Sulfonación
- b) Nitración
- c) Halogenación
- d) Alquilación
- e) Acilación

Los Hidrocarburos Aromáticos más importantes se encuentran en todas las hormonas animales o vegetales y vitaminas; prácticamente todos los condimentos, perfumes y tintes

orgánicos, tanto sintéticos como naturales; los alcaloides que no son alicíclicos (ciertas bases alifáticas como la putrescina a veces se clasifican incorrectamente como alcaloides), y sustancias como el trinitrotolueno (TNT) y los gases lacrimógenos. Por otra parte los hidrocarburos aromáticos suelen ser nocivos para la salud, como los llamados *BTEX*: benceno, tolueno, etilbenceno y xileno por estar implicados en numerosos tipos de cáncer o el alfa-benzopireno que se encuentra en el humo del tabaco, extremadamente carcinogénico igualmente, ya que puede producir cáncer de pulmón.

Muchos compuestos aislados de fuentes naturales son aromáticos. Además del benceno, el benzaldehído y el tolueno, compuesto como la hormona esteroidal (estroma) y la morfina, analgésico bien conocido, tiene anillos aromáticos. Muchos fármacos sintéticos también son aromáticos en parte; tranquilizante como El Diazepam.

La exposición prolongada del benceno puede producir Leucemia.

## Ácido Pícrico

$$O_2N$$
 $NO_2$ 
 $NO_2$ 

El ácido pícrico es un compuesto químico orgánico altamente nitrado cuyo nombre IUPAC es 2,4,6-trinitrofenol. Su fórmula molecular es  $C_6H_2(NO_2)_3OH$ .

Es un sólido de un fuerte sabor de amargo, y de allí deriva su nombre, de la palabra griega 'prikos', que significa amargo. Se encuentra como cristales amarillos húmedos.

El ácido pícrico se emplea como base para la síntesis de colorantes permanentes de tono amarillo. Algunos patólogos e investigadores lo emplean en la fijación o tinción de secciones de tejidos y otros procesos de inmunohistoquímica.

Es muy útil en la elaboración de productos farmacéuticos. Además, se utiliza en la elaboración de fósforos o cerillos y de explosivos. También se emplea para grabar metales, para fabricar vidrio coloreado, y en la determinación colorimétrica de parámetros biológicos como la creatinina.

#### Fenol ácido

Es por esta razón que este compuesto es un ácido excepcionalmente fuerte (y reactivo), aún más que el propio ácido acético. Sin embargo, el compuesto realmente se trata de un fenol cuya acidez sobrepasa la de los otros fenoles; debido, como acaba de mencionarse, a los sustituyentes NO<sub>2</sub>.

Por lo tanto, al tratarse de un fenol el grupo OH tiene prioridad y dirige la enumeración en la estructura. Los tres NO<sub>2</sub> se ubican en los carbonos 2, 4 y 6 del anillo aromático respecto al OH. De aquí deriva la nomenclatura IUPAC para este compuesto: 2,4,6-Trinitrofenol (TNP, por sus siglas en inglés).

Si no estuvieran los grupos NO<sub>2</sub>, o si hubiera un número menor de ellos en el anillo, el enlace O-H se debilitaría menos, y por tanto el compuesto tendría menor acidez.

#### **Solubilidad**

Es un compuesto moderadamente soluble en agua. Esto se debe a que sus grupos OH y NO<sub>2</sub> pueden interactuar con las moléculas de agua mediante puentes de hidrógeno; aunque el anillo aromático es hidrofóbico, y por eso perjudica su solubilidad.

#### Inestabilidad

El ácido pícrico se caracteriza por poseer propiedades inestables. Constituye un riesgo para el medio ambiente, es inestable, explosivo y tóxico.

Se debe almacenar bien cerrado para evitar su deshidratación, ya que el ácido pícrico es muy explosivo si se deja secar. Se debe tener mucha precaución con su forma anhidra, porque es muy sensible a la fricción, a los golpes y al calor.

El ácido pícrico se debe guardar en sitios ventilados, frescos, lejos de materiales oxidables. Es irritante al contacto con la piel y las mucosas, no se debe ingerir, y resulta tóxico para el organismo.

Por otro lado, el ácido pícrico es irritante al entrar en contacto con la piel, con la mucosa respiratoria, la ocular y la digestiva. Además de lesionar la piel, puede afectar gravemente los riñones, la sangre y el hígado, entre otros órganos.

### Síntesis del Ácido Pícrico

Inicialmente se sintetizaba a partir de compuestos naturales como derivados de cuerno animal, resinas naturales, entre otros. A partir de 1841, se ha usado el fenol como precursor del ácido pícrico, siguiendo varias rutas o mediante varios procedimientos químicos.

Como ya se ha dicho, es uno de los fenoles más ácidos. Para sintetizarlo se requiere primero que el fenol sufra un proceso de sulfonación, seguido de un procedimiento de nitración.

La sulfonación del fenol anhidro se realiza al tratar el fenol con ácido sulfúrico fumante, ocurriendo sustituciones electrofílicas aromáticas de H por grupos sulfonatos, SO<sub>3</sub>H, en la posición -orto y -para respecto al grupo OH.

A este producto, ácido 2,4-fenoldisulfónico, se le efectúa el proceso de nitración, tratándolo con ácido nítrico concentrado. Al hacerlo, los dos grupos SO<sub>3</sub>H se sustituyen por los grupos nitro, NO<sub>2</sub>, y entra un tercero en la otra posición nitro.