

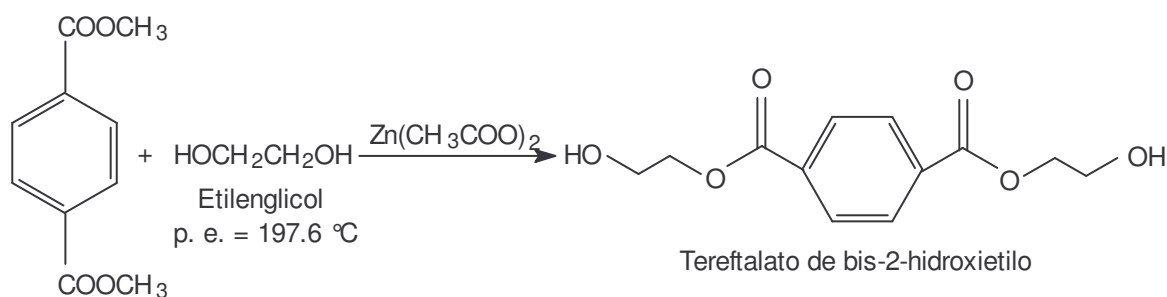
EXPERIMENTO VIII

TRANSESTERIFICACIÓN. OBTENCIÓN DE TEREFTALATO DE BIS-2-HIDROXIETILO. (PRECURSOR DE DACRÓN)

OBJETIVOS

- Ejemplificar la reacción de transesterificación y su uso en la industria para obtener fibras sintéticas.
- Obtener tereftalato de bis-2-hidroxi etilo (TBHE) precursor en la elaboración de un Poliéster (Dacrón), a partir de dos compuestos comerciales: Tereftalato de dimetilo y etilenglicol.
- Determinar la cantidad mínima necesaria de etilenglicol para obtener el valor máximo de conversión en la reacción de transesterificación.

REACCIÓN



Tereftalato de dimetilo
p. f. = 140.6 °C

MATERIAL

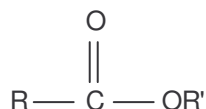
Matraz pera de 1 boca	1	Anillo metálico	1
Columna de Vigreux	1	Tela de asbesto	1
Refrigerante c/mangueras	1	Mechero	1
"T" de destilación	1	Espátula	1
Colector	1	Pinzas de tres dedos	1
Probeta 25 mL	1	Trozo de papel aluminio	1
Vidrio de reloj	1		

SUSTANCIAS

Tereftalato de dimetilo	10 g	Acetato de Zinc	10 mg
Etilenglicol	4.5 mL		

INFORMACIÓN

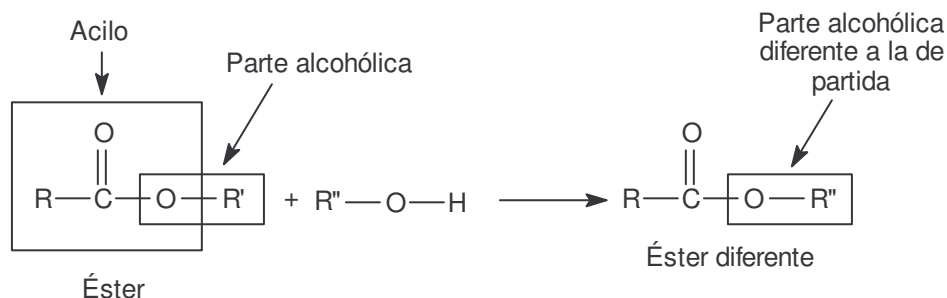
Los compuestos que contienen el grupo funcional



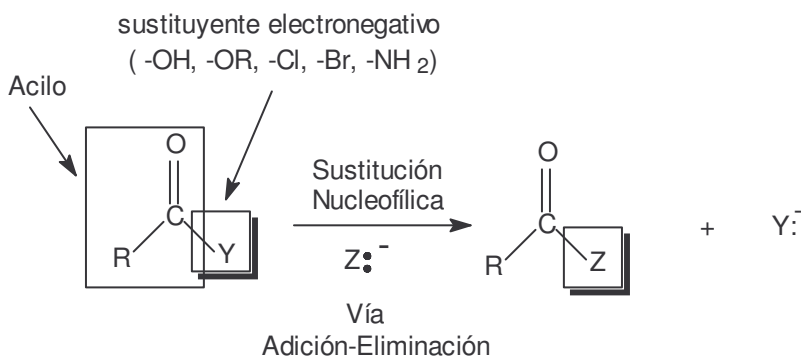
se conocen como ésteres, R puede ser hidrógeno, alquilo o arilo y R' puede ser alquilo o arilo.

Los ésteres reaccionan con los alcoholes para producir un nuevo éster y un nuevo alcohol. Estas reacciones pueden efectuarse catalizadas por ácidos o por bases y reciben el nombre de *transesterificación*.

Como ya se sabe un éster consta de una parte que proviene de un ácido carboxílico llamada acilo y una parte derivada de un alcohol. La reacción de un éster con un alcohol en presencia de un catalizador, para generar un éster con un grupo alcóxido diferente es llamada reacción de *transesterificación*.

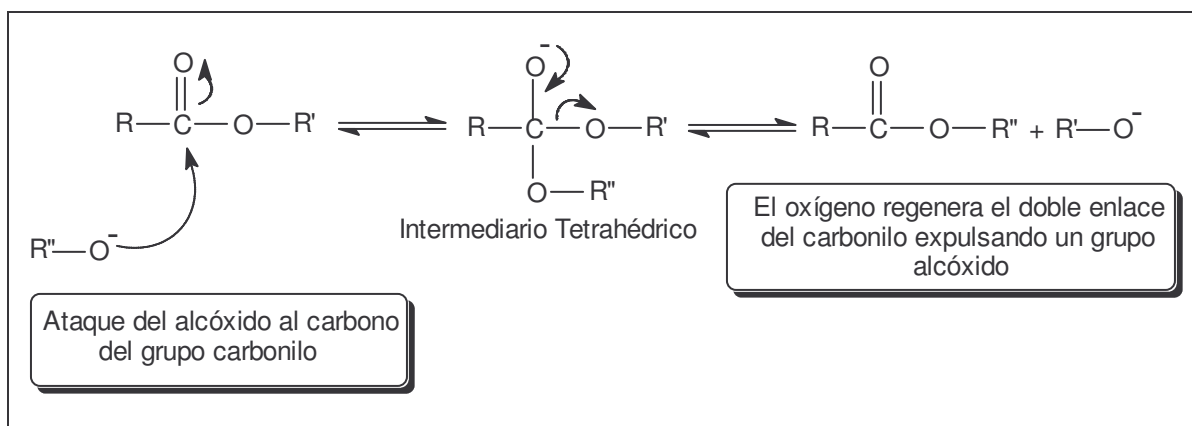


Mecanísticamente los ésteres son considerados como derivados de acilo (RCOY) donde el grupo acilo está unido a un sustituyente electronegativo que puede actuar como grupo saliente en una reacción de sustitución (Sustitución Nucleofílica de Acilo).



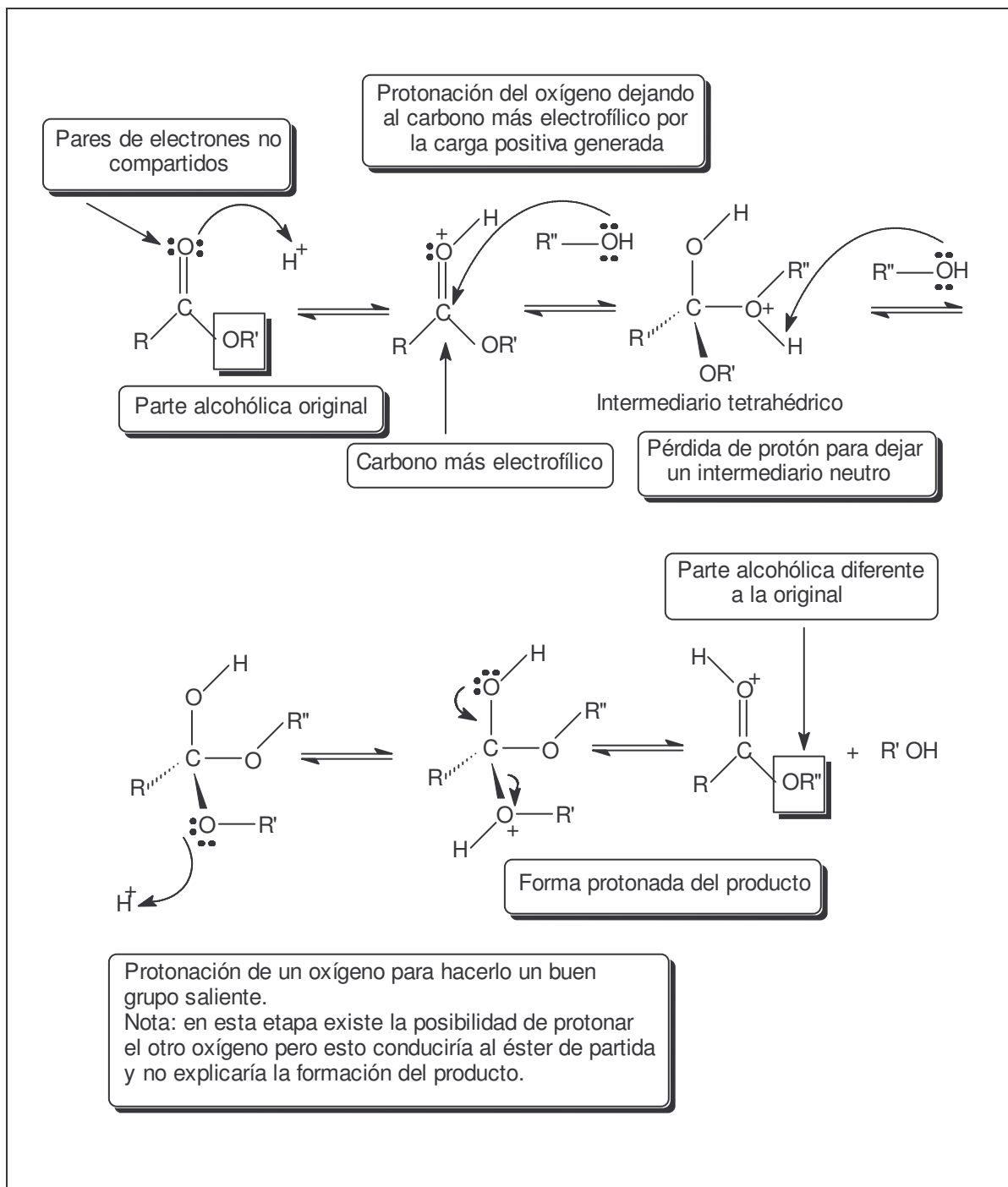
La transesterificación puede ser catalizada por ácidos o por bases. Como es de esperarse la reacción resulta en un equilibrio, el cual puede ser desplazado hacia el éster deseado usando un gran exceso del alcohol apropiado o bien removiendo del medio de reacción el otro alcohol. *La transesterificación catalizada por base es un ejemplo clásico de una sustitución nucleofílica de acilo* mediante un mecanismo de *adición-eliminación*. El ion alcóxido es suficientemente nucleofílico para atacar el carbono del grupo carbonilo del éster. La expulsión del ion alcóxido que originalmente se encontraba en el éster, proporciona el producto de transesterificación.

MECANISMO DE REACCIÓN EN MEDIO BÁSICO



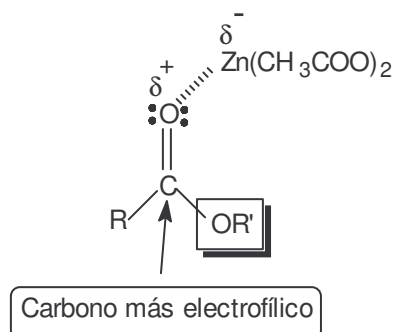
La reacción catalizada por ácido sigue un mecanismo similar, pero es un poco más complicado, debido a la transferencia de protón adicional. El alcohol es menos nucleofílico, por lo que la primera etapa es la protonación del oxígeno del grupo carbonilo, el cual con sus pares de electrones libres se comporta como una base de Lewis. De esta manera la protonación del oxígeno deja al carbono mucho más electrofílico para el ataque de un alcohol. Con esto se forma un intermediario tetrahédrico el cual es desprotonado por otra molécula de alcohol. Una subsecuente protonación del oxígeno apropiado, hace que este grupo sea mejor grupo saliente que el no protonado. Cuando el oxígeno introduce su par de electrones expulsa una molécula de alcohol dejando una versión protonada del producto final.

MECANISMO DE REACCIÓN EN MEDIO ÁCIDO



En algunos casos se utilizan ácidos de Lewis para catalizar la reacción y el mecanismo mediante el cual procede dicha reacción es esencialmente el mismo.

Los pares electrónicos no compartidos del oxígeno del grupo carbonilo forman un complejo con el ácido de Lewis, generando una carga positiva parcial sobre este átomo y haciendo al carbono más electrofílico.



PROCEDIMIENTO

La reacción se llevará a cabo utilizando

- a) Cantidades estequiométricas
- b) 2.0 mL de etilenglicol
- c) 5.5 mL de etilenglicol
- d) 7.0 mL de etilenglicol

En un matraz pera de una boca, (pesado previamente), coloque 10 g de tereftalato de dimetilo, () mL de etilenglicol y 10 mg de acetato de Zinc. Agregue cuerpos de ebullición y adapte un sistema de destilación fraccionada.

Inicie el calentamiento lentamente a través de la tela de asbesto hasta fundir todo el tereftalato de dimetilo; continúe el calentamiento hasta que la destilación del metanol sea muy lenta (durante la destilación mantenga el extremo del colector dentro de la probeta). Desmonte el aparato de destilación lo más rápido posible y vierta el contenido del matraz pera en un recipiente elaborado con papel aluminio, (pese el matraz pera para conocer la cantidad de producto que se quedó adherida a él). Mida el volumen de metanol obtenido y de acuerdo a su densidad (0.792 g/mL), calcule el porcentaje de conversión de la reacción tomando en cuenta una pérdida promedio de 0.3 mL de metanol por evaporación y/o escurrimiento.

$$\% \text{ de conversión} = \frac{\text{Gramos de metanol obtenido}}{\text{Gramos de metanol teóricos}} \times 100$$

ANTECEDENTES

- a) Reacciones de transesterificación en medio ácido y básico.
- b) Realice los cálculos necesarios para conocer en qué relación molar se encuentran las cantidades de los reactivos que va a utilizar.
- c) Compuestos bifuncionales y su polimerización.
- d) Polimerización por condensación o por pasos.

CUESTIONARIO

1. ¿Cómo calcula la cantidad necesaria de etilenglicol para obtener un valor elevado del porcentaje de conversión?
2. ¿Cómo calcula el grado de polimerización del producto?
3. ¿Cuál es la razón de destilar el metanol?
4. ¿Cómo afecta al porcentaje de conversión la cantidad de etilenglicol adicionado a la reacción?
5. Tomando en consideración los resultados del grupo identifique el volumen de etilenglicol necesario, para asegurar que la reacción ha sido cuantitativa (100% de rendimiento).
6. ¿Qué significa que una molécula sea bifuncional?
7. ¿Qué otro tipo de alcoholes podría utilizar para obtener una polimerización similar a la indicada?
8. ¿Qué tipo de contaminación genera el producto obtenido, cómo se puede tratar si fuera un desecho?
9. ¿El producto obtenido es un polímero?
10. ¿Se podría usar glicerina en lugar de etilenglicol?. Si la respuesta es positiva ¿qué estructura tendría el producto?
11. ¿Cuales son los usos del polímero formado por el tereftalato de dimetilo y etilenglicol?

BIBLIOGRAFÍA

Ferdinand Rodríguez. *Principles of Polymer Systems*. Mc Graw-Hill. Estados Unidos, 1970.

A. S. Windrove y R. L. Caret. *Química Orgánica*. Harper & Row Latinoamericana. México, 1984.

R. J. Fessenden y J. S. Fessenden. *Organic Chemistry*. Brooks/Cole Publishing Company, 5ta. edición. Estados Unidos, 1994.

Raymond B. Seymour *Polymers are Everywhere*. Journal of Chemical Education. Volumen 65, Número 4, Abril 1988, pp. 327-334.

Wallace Hume Carothers y George B. Kauffman. *Nylon, the first completely Synthetic Fiber*. Journal of Chemical Education, Volumen 65, Número 9, Septiembre 1988, pp. 803-808.

OBTENCIÓN DE TEREFTALATO DE BIS-2-HIDROXIETILO (Precursor del Dacrón)

