

Alquilación de Friedel-Crafts y Práctica 8

Química III · U1 RAP2 — Benceno y aromaticos (12 sesiones de 1h)

Generado por PDF Project

Objetivos de la sesión

RAP
2

Logros de la clase

- Explicar la alquilación de Friedel-Crafts como SEA que introduce una cadena alquílica en el benceno.
- Describir el papel del cloruro de aluminio (AlCl_3) generando el carbocatión (o complejo equivalente) como electrófilo.
- Reconocer la limitación de la alquilación (rearrreglos y polialquilación) y la toxicidad asociada.
- Conocer el diseño de la Práctica 8 oficial del manual.

Activación de conocimientos previos

REP
ASA

Base

- Las SEA vistas: halogenación (Br^+), sulfonación (SO_3), nitración (NO_2^+).
- Un ácido de Lewis (AlCl_3 , FeCl_3) polariza enlaces C-X para generar electrófilos.
- Un carbocatión es una especie con carbono con solo 6 electrones de valencia: altamente electrofílico.

Docente: pregunte "¿Cómo meteríamos un grupo metilo $-\text{CH}_3$ o etilo $-\text{CH}_2\text{CH}_3$ en el benceno? ¿Qué electrófilo necesitamos?" Déjeles deducir que se requiere un carbocatión o equivalente.

Desarrollo riguroso

Alquilación de Friedel-Crafts

FC

Introduce un grupo alquilo (R) en el anillo usando un haloalcano (R-X) y un ácido de Lewis, típicamente cloruro de aluminio AlCl_3 (o FeCl_3). El AlCl_3 acepta el par del halógeno y genera un carbocatión (o un complejo polarizado $\text{R}^+ - \text{AlCl}_4^-$) que actúa como electrófilo: $\text{R-X} + \text{AlCl}_3 \rightarrow \text{R}^+ + [\text{AlCl}_4]^-$ (o complejo $\text{R}^+ / \text{AlCl}_4^-$) Ejemplo con clorometano ($\text{R} = \text{CH}_3$, $\text{X} = \text{Cl}$): $\text{CH}_3\text{Cl} + \text{AlCl}_3 \rightarrow \text{CH}_3^+ + [\text{AlCl}_4]^-$ (electrófilo metilio)

Mecanismo

MEC

1. Ataque del anillo al carbocatión $\rightarrow$ catión arenio: $C_6H_6 + CH_3^+ \rightarrow [C_6H_6CH_3]^+$ 2. Desprotonación y regeneración del catalizador: $[C_6H_6CH_3]^+ + [AlCl_4]^- \rightarrow C_6H_5CH_3 + HCl + AlCl_3$ Global: $C_6H_6 + CH_3Cl \xrightarrow{-(AlCl_3)} C_6H_5CH_3$ (tolueno) + HCl

LIM

Limitaciones importantes

- Rearreglo de carbocatión: con haluros primarios/ secundarios el catión puede reorganizarse (ej. isopropilo en vez de n-propilo), dando producto no esperado.
- Polialquilación: el grupo alquilo es activante, así que el producto (ej. tolueno) reacciona más rápido que el benceno y da dialquilbencenos.
- No funciona con anillos desactivados (con $-NO_2$, $-SO_3H$, $-CHO$): el $AlCl_3$ se coordina y el anillo es pobre en electrones.

Errores comunes

- Creer que el electrófilo es el haloalcano neutro: es el carbocatión (o su equivalente polarizado) generado por $AlCl_3$.
- Ignorar el rearreglo: alquilar con 1-cloropropano da mayormente cumeno (isopropilbenceno) por rearreglo.
- Olvidar que el producto es más reactivo que el benceno (polialquilación).

Ejercicio resuelto

Alquilación con cloroetano

Tip aplicado: primero genere el electrófilo con $AlCl_3$

Enunciado: Escriba la ecuación global de la alquilación del benceno con cloroetano (CH_3CH_2Cl) en presencia de $AlCl_3$. Indique el electrófilo y explique por qué puede formarse también dietilbenceno. Resolución: 1. Generación del electrófilo: $CH_3CH_2Cl + AlCl_3 \rightarrow CH_3CH_2^+ + [AlCl_4]^-$ (catión etilio; puede rearreglarse a isopropilo en condiciones fuertes) 2. Ataque y catión arenio: $C_6H_6 + CH_3CH_2^+ \rightarrow [C_6H_6CH_2CH_3]^+$ 3. Desprotonación: $[C_6H_6CH_2CH_3]^+ + [AlCl_4]^- \rightarrow C_6H_5CH_2CH_3$ (etilbenceno) + HCl + $AlCl_3$ 4. Global: $C_6H_6 + CH_3CH_2Cl \xrightarrow{-(AlCl_3)} C_6H_5CH_2CH_3 + HCl$ El etilbenceno (y el etilo en general) es un grupo activante que dona electrones al anillo por efecto hiperconjugativo/inductivo, por lo que el anillo sustituido es más reactivo que el benceno original y sufre una segunda alquilación para dar dietilbenceno. Por eso se usan exceso de benceno para minimizar la polialquilación.

Práctica 8 — Reacción de alquilación del benceno

OBJ
P8

Objetivo de la práctica

Observar la formación de etilbenceno (o cumeno) por alquilación de Friedel-Crafts y el papel del AlCl_3 .

MAT
P8

Material y sustancias (demostración)

- Campana de extracción, tubo de ensaye, pinzas, baño de hielo, vaso.
- Benceno (C_6H_6) 1 mL carcinógeno; cloroetano o cloruro de isopropilo 1 mL (tóxico, inflamable).
- AlCl_3 anhidro, punta de espátula (~30 mg) corrosivo e higroscópico.
- Goggles, bata, guantes nitrilo.

PRO
C P8

Procedimiento

- Paso 1: Bajo campana, coloque 1 mL benceno en tubo seco.
- Paso 2: Añada el haloalcano (1 mL). Observe: sin catalizador no hay reacción.
- Paso 3: Agregue AlCl_3 anhidro; agite. Notará desprendimiento de HCl (humos blancos al aire) y calentamiento.
- Paso 4: Vierta sobre hielo; fase orgánica (alquilbenceno) separa. Neutralice con NaHCO_3 .

OBS
P8

Observaciones

Sin AlCl_3 : mezcla homogénea, sin reacción. Con AlCl_3 : efervescencia/ HCl , formación de fase orgánica más densa o similar, olor característico. El AlCl_3 se hidroliza violentamente con agua (¡usar seco!).

EC
P8

Ecuación



SEG
P8

Seguridad

Campana encendida; AlCl_3 reacciona con agua liberando HCl : manténgalo seco. Goggles y guantes. El benceno carcinógeno: sin exposición cutánea.

RES
P8

Disposición

Residuos orgánicos (alquilbenceno + benceno) y AlCl_3 gastado: contenedor de residuos peligrosos (NOM-052). Neutralice HCl con NaHCO_3 antes de disposición autorizada.

Cuestionario resuelto (Práctica 8)

Cuestionario P8

Tip aplicado: relacione AlCl_3 con el electrófilo

Enunciado: 1) ¿Qué electrófilo genera el AlCl_3 ? 2) ¿Por qué la reacción no ocurre sin catalizador? 3) ¿Qué es la polialquilación y cómo evitarla? Resolución: 1) El AlCl_3 , como ácido de Lewis, polariza el enlace C-Cl y genera el carbocatión alquílico R^+ (o su equivalente polarizado $\text{R}^+[\text{AlCl}_4]^-$), que es el electrófilo. 2) Porque el haloalcano neutro no es suficientemente electrofílico para atacar el anillo aromático estable; se requiere el catión alquílico creado por AlCl_3 . 3) La polialquilación es la segunda (o tercera) sustitución porque el alquilbenceno es más reactivo que el benceno. Se evita usando un gran exceso de benceno respecto al haloalcano, de modo que la probabilidad de que otro benceno reaccione antes que el producto es alta.

Cierre de la sesión

CIE
RRA

Síntesis

- Friedel-Crafts alquila el benceno vía carbocatión generado por AlCl_3 .
- Limitaciones: rearrreglos, polialquilación, no funciona en anillos desactivados.
- Producto: alquilbenceno (tolueno, etilbenceno, cumeno).

Tarea: investigue un uso industrial del etilbenceno (estireno/poliestireno) y del cumeno (fenol/acetona). La próxima y última sesión de este RAP tratará el impacto ambiental y la normatividad de estos compuestos.