

### III. JUSTIFICACIÓN

La reacción de acoplamiento cruzado de Heck es una reacción que genera enlaces carbono-carbono entre haluros bencílicos, vinílicos y arílicos y alquenos. Esta reacción es de amplia aplicación en la industria y los productos generados consisten en intermediarios farmacéuticos, materiales conductores, productos naturales, etc. Llevados por un concernimiento individual y social de métodos sintéticos más amigables al medio ambiente, la síntesis orgánica ha tomado nuevas rutas que pretenden ser lo menos dañinas, económicamente y tecnológicamente viables.

Una alternativa a las reacciones llevadas a cabo generalmente en solventes orgánicos contaminantes, es desarrollar las reacciones en un medio acuoso. Por lo que este estudio se basa en la optimización de las reacciones de acoplamiento cruzado de Heck de cinco bromoarenos en un medio acuoso. La selección de bromoarenos se debe a su gran versatilidad en la síntesis orgánica y su gran compatibilidad con distintos grupos funcionales.

Lo anterior será logrado por medio del uso de un surfactante no iónico anfifílico benigno al medio ambiente y de bajo costo económico. Con éste se logra llevar a cabo reacciones de substratos orgánicos en medio acuoso por la química de micelas. Así mismo se busca desarrollar las reacciones a la menor temperatura posible, ya que aplicar altas temperaturas a nivel industrial es uno de los aspectos más complicados de realizar y monitorear, por su toda su consecuencia económica y simplificación del proceso.

La síntesis orgánica en Guatemala puede ser posible al emplear tecnologías simples, económicas y benignas al medio ambiente, la reacción en estudio cumple lo anterior. Por lo que el estudio de rutas sintéticas puede abrir las puertas a una nueva industria.

## IV. OBJETIVOS

### A. Objetivo general

Optimizar el acoplamiento cruzado de Heck para 5 bromoarenos en un medio de reacción acuoso empleando PTS como agente micelar.

### B. Objetivos específicos

- Identificar los catalíticos de paladio disponibles de mayor actividad acorde a la reacción de Heck entre el yodoanisol y el *ter*-Butil Acrilato.
- Determinar la concentración ideal del surfactante PTS como agente micelar a la cual las reacciones de Heck tienen su máxima conversión.
- Identificar los aditivos que promuevan la reacción de Heck para los bromoarenos en estudio.
- Determinar la temperatura y el tiempo mínimo en los cuales las reacciones de Heck de los bromoarenos presentan una elevada conversión.
- Determinar las condiciones de reacción ideales para cada bromoareno en las cuales presenten su mayor conversión.
- Determinar la influencia de los grupos funcionales de los bromoarenos en la reacción de Heck.
- Determinar los rendimientos de masa de producto aislado en la reacción de Heck de mayor conversión para cada bromoareno.
- Aplicar la Cromatografía de Gases y la Resonancia Magnética Nuclear para determinar los porcentajes de conversión de las reacciones de Heck.
- Aplicar la Resonancia Magnética Nuclear y Cromatografía de Gases con Espectrometría de Masas para caracterizar la identidad de los productos sintetizados aislados.

## V. HIPÓTESIS

**El acoplamiento cruzado de Heck para los bromoarenos en estudio es posible con un elevado porcentaje de conversión en un medio de reacción acuoso de micelas.**

## VI. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La síntesis orgánica de nuevos compuestos, así como de rutas sintéticas ya conocidas, presenta una innumerable cantidad de aplicaciones en la vida diaria. Sin embargo, también presenta grandes retos en lo que refiere a procesos más amigables al medio ambiente, uso de tecnologías simples, simplificación del proceso, entre otros. Por lo que idealmente esta disciplina sería un proceso "verde" y empleando condiciones suaves como, reacciones a temperatura ambiente, uso de agua como solvente, una sencilla separación de los productos y la reutilización de los solventes orgánicos y los catalíticos empleados.

Actualmente la realidad de la síntesis organometálica se encuentra lejos de su idealidad, pero se han realizado esfuerzos para acercarse al objetivo. Un acercamiento de amplia popularidad en los últimos años es el uso de un medio acuoso de reacción al emplear agua como solvente en un alto porcentaje. Lo novedoso de esta técnica es que es amigable al medio ambiente al reducir el uso de solventes orgánicos, su alta disponibilidad y bajo costo, y el medio de reacción es *pseudo*-homogéneo que permite la fácil recuperación de los productos y el reciclaje de los catalíticos y solventes orgánicos.

Se sabe que la mayoría de compuestos orgánicos son hidrofóbicos y el hecho de llevar a cabo una reacción orgánica en un medio acuoso pareciera ser algo poco probable. Sin embargo, el desarrollo de surfactantes para la formación de micelas y por ende, la disolución de los compuestos orgánicos en el medio permite llevar a cabo varias reacciones orgánicas. Por lo que dicho concepto fue aplicado en este estudio y lo que se buscó fue optimizar la reacción de acoplamiento cruzado de Heck en un medio acuoso entre los bromoarenos; bromoanisol, bromobenzonitrilo, bromonaftaleno, metil 3-bromobenzoato y bromobenzofenona, con el alqueno *t*-butil acrilato.

### A. Naturaleza del medio de reacción

En la reacción de acoplamiento cruzado de Heck entre los bromoarenos propuestos y el alqueno se buscó un medio de reacción acuoso que permitiera la acción catalítica del paladio sin degradarlo y empleando la menor temperatura de reacción posible. La reacción es posible llevarla a cabo en un medio acuoso al emplear un surfactante que solubilice los compuestos