

## TALLER Y LABORATORIO

## TALLER DE REACTIVIDAD DE MOLÉCULAS ORGÁNICAS EN REALIDAD AUMENTADA

## INTRODUCCIÓN

Las orientaciones espaciales de los átomos en las moléculas orgánicas juegan un papel esencial en su reactividad y por supuesto son la clave de la estereoisomería. Para los estudiantes de química es a veces complicado visualizar esta orientación y así comprender conceptos importantes en química orgánica. El avance de la tecnología y la computación han permitido el desarrollo de la Realidad Aumentada (RA) que en el contexto de las ciencias puede sin duda reforzar los procesos de aprendizaje de las mismas. La realidad aumentada (RA) se define como el conjunto de tecnologías que permiten crear nuevos objetos mediante el diseño gráfico por ordenador en 3D para añadirlos a una realidad existente y ser capaz de manipularlos. La RA tiene gran potencial como herramienta pedagógica en el campo de las ciencias. Hoy en día hay ya muchos ejemplos en la enseñanza de las ciencias experimentales que usan RA como herramienta pedagógica.[1]

En el campo de la química existen ya varios proyectos que utilizan la realidad aumentada en las aulas.[2],[3],[4] Uno de los ejemplos más sencillos de RA en el campo de la química orgánica es el proyecto desarrollado por Kyle Plunkett[2] en la Universidad

del Sur de Illinois, E.E.U.U. (SIU). Para ayudar al estudio de los mecanismos de reacción, cada reacción tiene una ficha con un código BIDI que con ayuda de la aplicación HP™ reveal que reconoce estos códigos BIDI y abre unos videos explicativos de los mecanismos de reacción. Para realizar este taller de RA, en primer lugar, se realizará el experimento en el laboratorio y después se visualizarán los productos de reacción mediante otras apps móviles como ModelAR[5] y MoleculAR[6] y para ello solo es necesario un teléfono móvil o una tableta. En la segunda parte del taller se generarán las tarjetas con códigos BIDI y se grabará el video asociado con explicaciones de los mecanismos de reacción. ModelAR[5] es una app de gran utilidad ya que sustituye a los modelos moleculares físicos que tanto han ayudado a comprender la estructura y reactividad de los compuestos orgánicos

Empezaremos por proponer un experimento de química orgánica general que se realizará en el laboratorio. En este caso la síntesis estereoespecífica de glicoles[7], en este caso el *trans*-1,2-ciclohexanodiol. La ruta sintética a realizar es la siguiente:

Se trata de una ruta multietapa en la que la primera reacción es la formación de una bromohidrina por ataque *anti* al doble enlace que por tratamiento con base, sufre una eliminación de ácido bromhídrico (HBr) para formar un epóxido que por apertura en medio ácido produce de forma estereoselectiva el (1*R*,2*R*)-ciclohexano-1,2-diol. La RA nos ayudará a comprender el mecanismo de las reacciones.

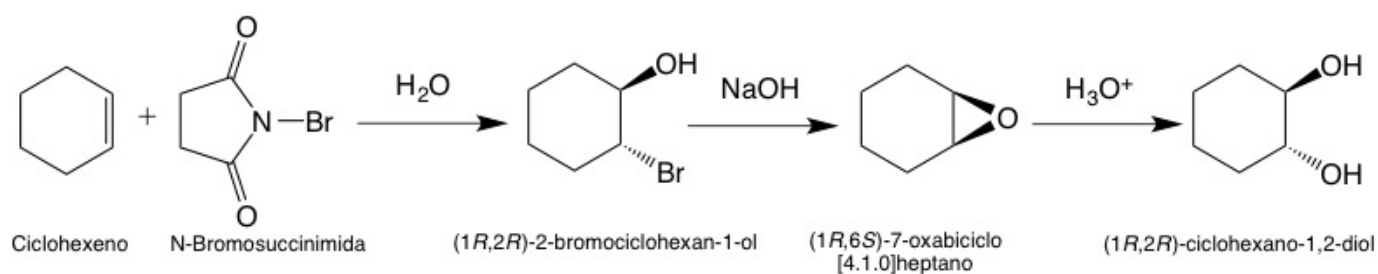


Figura 1. Ruta sintética para la obtención del *trans*-1,2-ciclohexanodiol.

## PRÁCTICA DE LABORATORIO

Reactivos:	Material de Laboratorio
Ciclohexano	Erlenmeyer de 100 mL
H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> 96-94%	Cristalizador 500 mL
Acetato de etilo	Dos jeringuillas de vidrio de 50 mL
N-Bromosuccinimida	Placa calefactora y agitadora
Tetrahidrofurano (THF)	Una pieza de agitación
Dietil éter	Un embudo de separación de 250 mL
2-Bromociclohexan-1-ol	Dos tubos de RMN
(1R,2R)-ciclohexano-1,2-diol	Pipetas Pasteur
1,2-Epoxiciclohexano	Dos matraces de fondo redondo 100 mL, refrigerante, matraz de 2 bocas de 250 mL, aparato de destilación
NaOH	Placa filtrante y kitasato

### Síntesis del 2-bromociclohexan-1-ol:

En un matraz Erlenmeyer de 100 mL equipado con una pieza de agitación, se añaden siguiendo este orden: 7.6 mL de ciclohexano, 20 mL de agua destilada, y 25 mL de THF. Se coloca en un bato de hielo y se somete a agitación en la placa agitadora hasta que todo esté bien mezclado. A esta mezcla de reacción se le añade una disolución de 14.7 g de NBS disueltos en 40 ml de THF, en pequeñas durante 20 minutos cuidando que la temperatura de la reacción no exceda los 30 °C. Se deja agitar unos 30 minutos más. Una vez finalizado el tiempo se vierte la mezcla en un embudo de separación al que se le añaden 30 mL de dietil éter y 30 ml de disolución saturada de NaCl. Se agita y se separa la fase orgánica (superior) y la fase acuosa se devuelve la embudo y se vuelve a extraer con 20 ml de dietil éter. Se recoge la fase orgánica y se combina con la recogida en el paso anterior. Se seca sobre Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, y se decanta en un embudo de adición para ser usada en el siguiente paso.

### Síntesis del 7-oxabicyclo[4.1.0]heptano:

En un matraz de fondo redondo de dos bocas equipado con una pieza de agitación, se añaden 25 mL de una disolución acuosa de NaOH 5M. Se coloca un refrigerante en una de las bocas y en la segunda boca se coloca el embudo de adición con la disolución en éter del 2-bromociclohexan-1-ol preparado en el paso

anterior y se adiciona lentamente durante 40 minutos, con agitación y manteniendo la temperatura de reacción a 40 °C. Una vez acabada la adición se agita en las mismas condiciones unos 30 minutos adicionales. Después, se vierte la mezcla de reacción en un embudo de separación, se agita y se dejan separar las fases, se recoge la fase orgánica sobre Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, se evapora el disolvente en el rotavapor, se destila el residuo a presión atmosférica (124-134 °C). Calcular el rendimiento pesando previamente el producto destilado.

### Síntesis del *trans*-ciclohexano-1,2-diol (1R,2R)-ciclohexano-1,2-diol:

En un matraz de fondo redondo de 100-ml se colocan 2 mL (1.95 g, 15 mmol) 7-oxabicyclo-[4.1.0]heptano, a los que se añaden 10 mL de agua y 1 ml de H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, se agita vigorosamente durante una hora, tapando el matraz y se observará que la mezcla de reacción se calienta y se vuelve transparente.

Se deja agitar 1 hora, y se ajusta el pH a 7 con una disolución de NaOH. Se extrae con acetato de etilo (15 mL). Se recoge la fase orgánica sobre sulfato de sodio, se decanta y se elimina el disolvente hasta dejar un tercio del volumen. Se introduce el matraz en un baño de hielo hasta que aparezca un sólido que se filtra a vacío, se seca al aire, se pesa y se calcula el rendimiento y su punto de fusión. En un vial se depositan 5-10 mg del *trans*-ciclohexano-1,2-diol y se disuelven en 0.6 ml de cloroformo deuterado. Una vez disuelto se deposita en el tubo de RMN para registrar su espectro.

### REALIDAD AUMENTADA

Para la visualización de moléculas orgánicas en RA hay actualmente varias apps en el mercado disponibles para Android y IOS, entre ellas podemos destacar, ModelAR<sup>TM5</sup> y MoleculAR<sup>TM6</sup> ambas disponibles para los dos sistemas operativos. La primera nos permite editar nuestras propias moléculas, genera los renders de RA y nos permite guardarlas en la aplicación y hacer capturas de pantalla para su posterior visualización. Pueden ser giradas, rotadas, los enlaces pueden rotarse, moverse etc.. La segunda MoleculAR, nos permite acceder a una serie de imágenes en un documento pdf y visualizarlas en RA.

1. Visualización de las moléculas implicadas en la reacción

Utilizaremos la app ModelAR™ que se puede descargar gratis de Google play o Apple App store. Una vez instalada en nuestro teléfono móvil o tableta con el editor dibujaremos la molécula de ciclohexeno. La molécula de ciclohexeno no es plana sino que presenta la siguiente conformación (confórmero más estable calculado con la herramienta de dinámica molecular de Marvin Sketch) ( Figura 1)

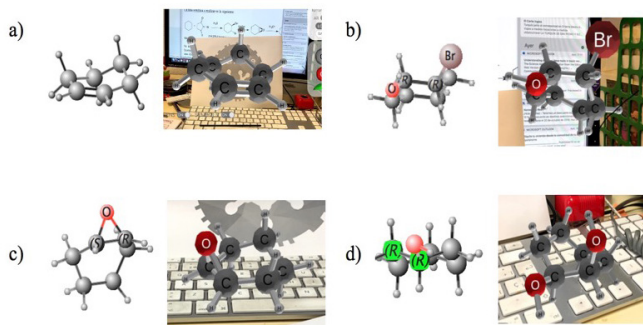


Figura 2. Moléculas empleadas en el experimento y sus imágenes de RA en 3D generadas en Marvin Sketch 3D y modelAR.

El mecanismo de la apertura del epóxido es el más importante en este esquema de reacción (Figura 3) y ocurre del siguiente modo

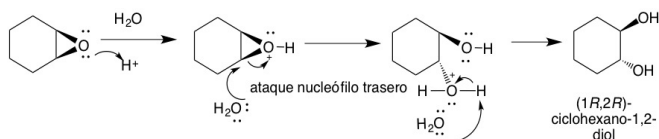


Figura 3. Mecanismo de reacción de apertura del epóxido.

Primero se protona el epóxido con lo que se vuelve más reactivo al tener una carga positiva en el átomo de oxígeno, que sufre a su vez un ataque nucleófilo por parte de una molécula de agua por la parte trasera. A continuación, una molécula de agua toma un protón del ión oxonio el ciclo, para dar el trans-1,2-ciclohexanol. Este mecanismo visto en 3D lo podemos ver en la figura 4.

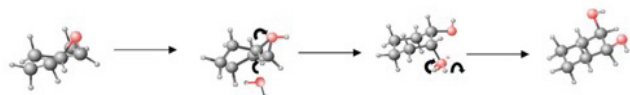


Figura 4. Mecanismo de reacción de apertura del epóxido en 3D.

Con ayuda de la página web <https://app.qr-code-generator.com/create/new/> se pueden generar códigos BIDI de manera que al reconocer la cámara del teléfono móvil o Tablet el código BIDI se abre un documento en este caso, un archivo pdf con el mecanismo de reacción de apertura del epóxido. Del mismo modo, pueden generarse videos con los mecanismos e incluso con información sobre los pasos a realizar en el laboratorio.

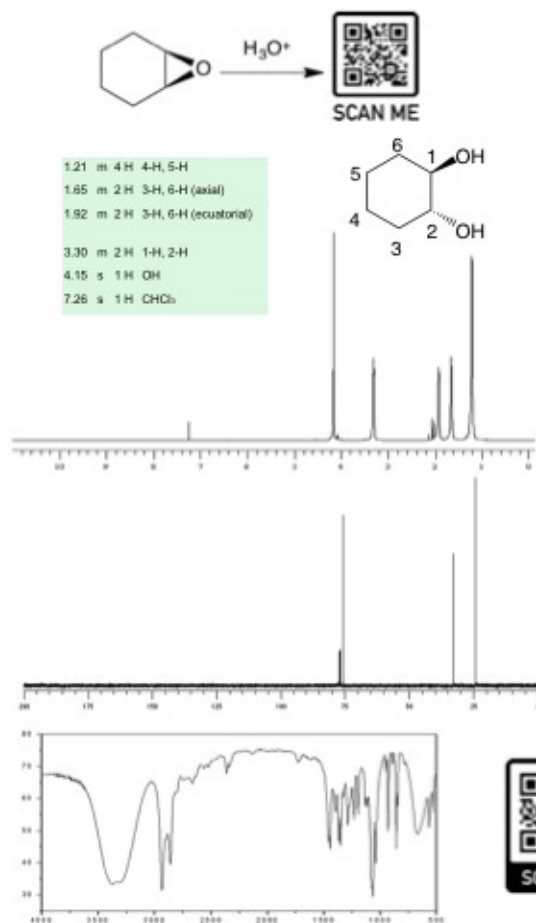


Figura 5. Código BIDI para el mecanismo de reacción de apertura de un epóxido.

Una vez realizada la síntesis, si disponemos de la instrumentación adecuada en el laboratorio podremos proceder a la determinación estructural de nuestro producto final, si no es así, con ayuda de la RA podemos generar un código BIDI que albergue los datos espectroscópicos del trans-ciclohexano-1,2-diol. En la figura 5 podemos ver los datos espectroscópicos y el código BIDI

## CONCLUSIONES

La RA está siendo y va a ser una herramienta de muchísima utilidad en la didáctica de las ciencias experimentales. En esta actividad, hemos visto que con unos pocos recursos disponibles en internet podemos visualizar todas las moléculas implicadas en las reacciones del experimento llevado a cabo en el laboratorio. En este caso, al tratarse de estereoisómeros, la RA ayuda a comprender la disposición espacial que da lugar a dicha estereoisomería y el ataque de los reactivos implicados en cada etapa de la reacción. También el uso de la RA puede ayudar a complementar el experimento si no disponemos de la instrumentación adecuada en nuestro laboratorio. En el futuro tanto la RA como la Realidad Virtual (RV) van a jugar sin duda un papel esencial en la enseñanza de la química.

## BIBLIOGRAFIA

- [1] Cheng K, Tsai C-C (2013). Affordances of Augmented Reality in Science Learning: Suggestions for Future Research. *Journal of Science Education and Technology* **22** (4), 449-462.
- [2] Kyle PA (2018). *Simple and Practical Method for Incorporating Augmented Reality into the Classroom and Laboratory*, <https://doi.org/10.26434/chemrxiv.7137827.v1>
- [3] Maier P, Klinker G (2013). In *Augmented chemical reactions: An augmented reality tool to support chemistry teaching*, 2013 2nd Experiment@ International Conference (exp.at'13), 18-20 Sept, 164-165.
- [4] Huwer J, Seibert J (2018). A New Way to Discover the Chemistry Laboratory: The Augmented Reality Laboratory-License. *World Journal of Chemical Education* **6** (3), 124-128.
- [5] Model AR disponible en [www.apple.com/appstore](http://www.apple.com/appstore) [www.googleplay.com](http://www.googleplay.com). (consultada 18 de Octubre).
- [6] Coster M. Molecul AR <https://organicchemexplained.com/molecular-augmented-reality-app/>. (consultada 18 de Octubre).
- [7] Isac-García J. *Experimental organic chemistry: laboratory manual*. 2016.

M<sup>a</sup> Ángeles Farrán Morales  
Dpto. de Química Orgánica y Bio-Orgánica