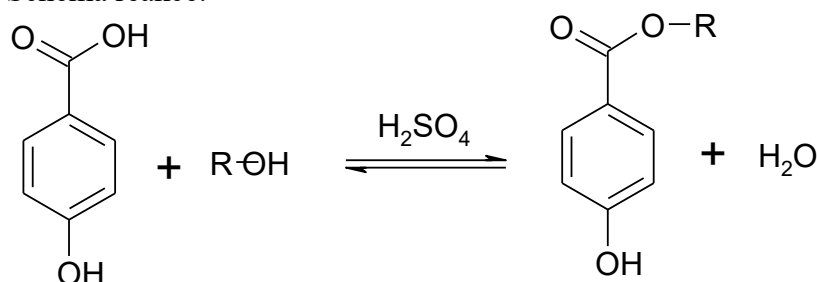


5. Estery kyseliny 4-hydroxybenzoové - parabeny

Chemický název: Alkyester kyseliny 4-hydroxybenzoové; alkyl-4-hydroxybenzoát

Připravují se esterifikací kyseliny 4-hydroxybenzoové za přítomnosti kys. sírové jako katalyzátoru a dehydratačního činidla.

Schéma reakce:



Chemikálie:

4-hydroxybenzoová kyselina 0,01 mol [138,12]

příslušný alkohol 25 ml

Příprava: V baňce opatřené zpětným chladičem se rozpustí kyselina 4-hydroxybenzoová v příslušném alkoholu, přidá se 0,4 g koncentrované kyseliny sírové a směs se zahřívá za míchání na mag. míchače k varu pod zpětným chladičem po dobu 4 hodin; u alkoholů s teplotou varu větší než 100°C (propanol, 2-methylpropanol) udržujeme v lázni teplotu asi 110°C. Po ochlazení se zneutralizuje reakční směs zředěným vodným roztokem amoniaku a nadbytečný alkohol i část vody se oddestiluje na rotační vakuové odparce. Sirupovitý zbytek v baňce se po ochlazení rozsuspoduje ve studené vodě, vzniklá sraženina se odsaje a dle potřeby překrystaluje z vhodného rozpouštědla (samotná horká voda, vodný ethanol; při dokonalém vysušení lze použít i heptan nebo petrolether, pak je ale nutno krystalizovat pod zpětným chladičem na lázni). *Tímto postupem lze pohodlně připravit methyl-, ethyl- a propylparaben. Pro přípravu rozvětvených derivátů, např. 2-propyl-, 2-methylpropyl-(tj. isobutyl)- nebo butan-2-yl-(tj. sek.-butyl) parabenů vznikne po rozsuspodování sirupovitého zbytku ve vodě emulze. Emulzi je vhodné vytřepat v malé dělicí nálevce 3x10 ml diethyletheru, spojené etherové výtřepky zpětně protřepat malým nožstvim vody, vysušit, roztok zahustit na odparce na malý objem a tento odparek nechat, pokud možno kvantitativně, překapat na předem zvažovanou Petriho misku. V tenké vrstvě, přikrytý víčkem Petriho misky nedzviženým kouskem filtračního papíru, se produkt nechá při pokojové teplotě stát do příštího praktika. Za 2 týdny se zbytky rozvětveného alkoholu odpaří a produkt ztuhne. K tenkovrstvé chromatografii na silikagelu, předepsané ke hrubému ověření čistoty daného produktu, lze použít mobilní fázi obsahující ethyl-acetát a petrolether ve vhodném poměru, porovnávacím roztokem je roztok výchozí 4-hydroxybenzoové kyseliny např. v ethanolu. Totožnost produktu ověříme po řádném vysušení teplotou tání a ¹H-NMR spektroskopii; na NMR navažujeme do ependorfky 15-20 mg.*

Teploty tání vybraných parabenů

Látka	T.t. [°C]	T.v. výchozího alkoholu [°C]
Methylparaben	131	64.7
Ethylparaben	116 - 118	78.3
Propylparaben	96 - 98	97.2
Isopropylparaben (propan-2-ylparaben)	86	82.3
Isobutylparaben (methylpropan-1-ylparaben)	72 - 73	107.7
Sek.-butylparaben (butan-2-ylparaben)	58 - 59	99

Parabeny se široce používají k antimikrobiální konzervaci léčivých a kosmetických přípravků, v potravinářství se někdy rovněž užívají i přes svůj slabý lokálně-anestetický účinek (oslabení chuti), jsou méně toxické a mají širší rozsah pH, v němž jsou účinné, než zde velmi rozšířená benzoová kyselina a její soli. V ČL jsou oficiální methyl- až butylparaben, a to jako takové (s volnou fenolickou skupinou – např. *Butylparabenum* ČL) a rovněž ve formě ve vodě dobře rozpustných sodných solí (fenolátů – např. *Methylparabenum natricum* ČL). V kosmetických přípravcích lze nalézt i rozvětvené deriváty, např. isobutylparaben.