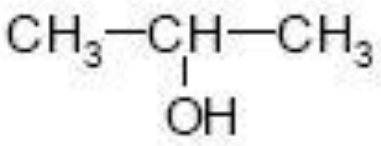
Alcoholes

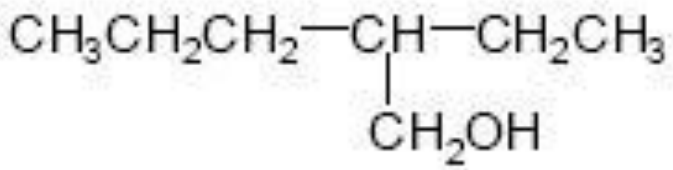
Dr. Cristian Valderas

Nomenclatura

- **Se elige la cadena más larga que contenga el grupo hidroxilo (OH)**
- **Se numera dando al grupo hidroxilo el localizador más bajo posible.**
- **El nombre de la cadena principal se obtiene cambiando la terminación –o del alcano por –ol.**



2-propanol



2-etil-1-pentanol

CH_3OH

Metan**ol**

(Alcohol Metílico)

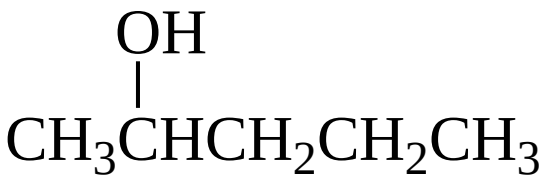
CH_3CH_2OH

Etan**ol**

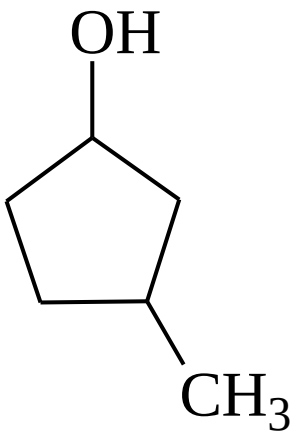
(Alcohol Etílico)

$CH_3CH_2CH_2CH_2OH$

1-Butan**ol**



2-Pentan**ol**



3-Metilciclopentan**ol**

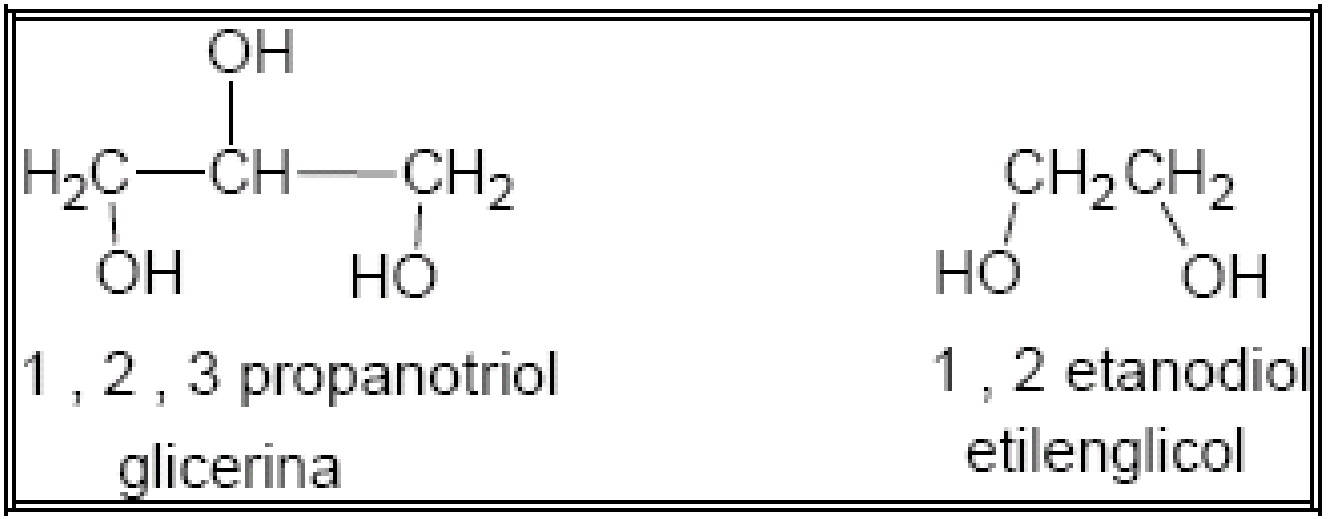
$HOCH_2CH_2OH$

1,2-Etan**odiol**

(Etilenglicol)

- El número de grupo hidroxilo (OH), determina el tipo de alcohol. Así, entonces:

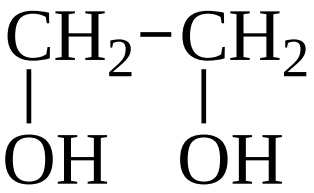
  - monoalcohol : un grupo — OH
  - dialcohol o diol : dos grupos — OH
  - trialcohol o triol : tres grupos — OH



Alcoholes polihídricos (polialcoholes)

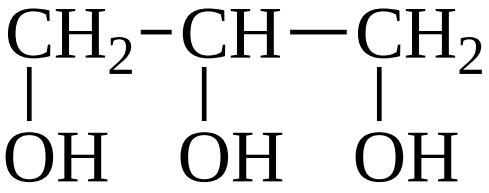
- Son alcoholes que presentan *más de un grupo hidroxilo.*

- Etilenglicol y Glicerol son ampliamente utilizados en la industria.



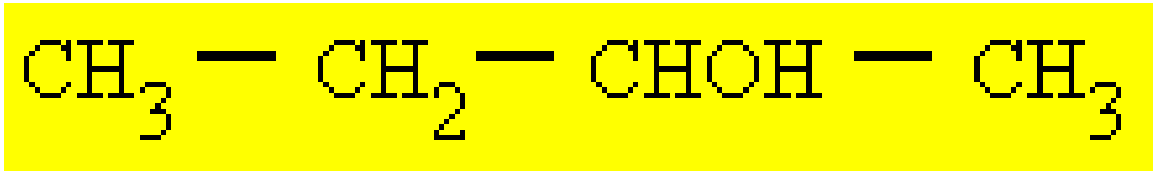
Etilenglicol

(1,2-Etanodiol)

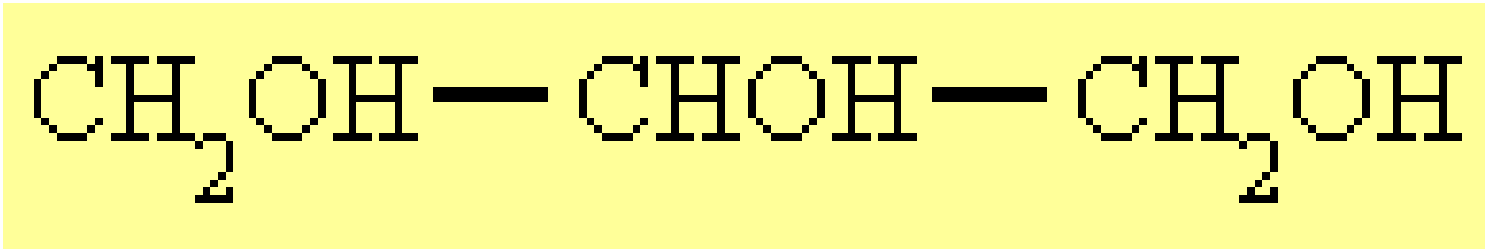


Glicerol

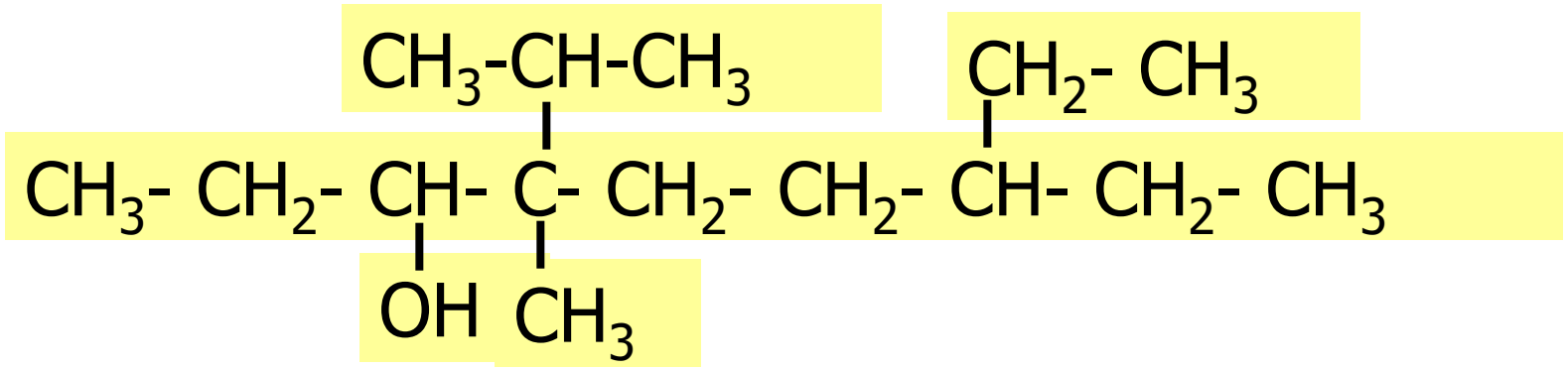
(1,2,3-Propanotriol)



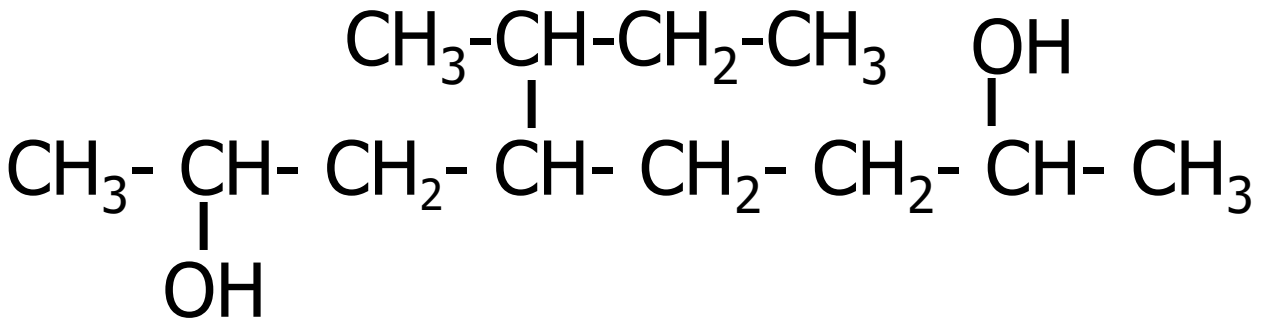
2-butan**ol**



1,2,3-propano**triol**
GLICEROL



7-etil-4-isopropil-4-metil-3-nonanol

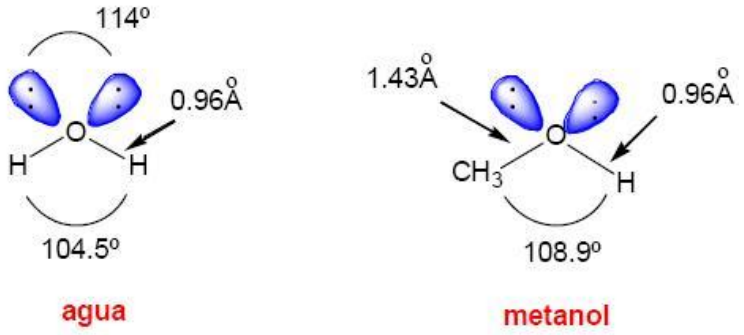


4-secbutil-2,7-octanodiol

Propiedades Físicas Alcoholes R-OH

- La porción funcional de un alcohol es el *grupo hidroxilo* unido a un grupo alquilo (R-OH). (-OH) unidos directamente al C

- Un alcohol puede ser considerado como un *derivado de agua* por sustitución de un átomo de hidrógeno por un grupo alquílico.



- Alcoholes de bajo molecular poseen propiedades similares al agua.

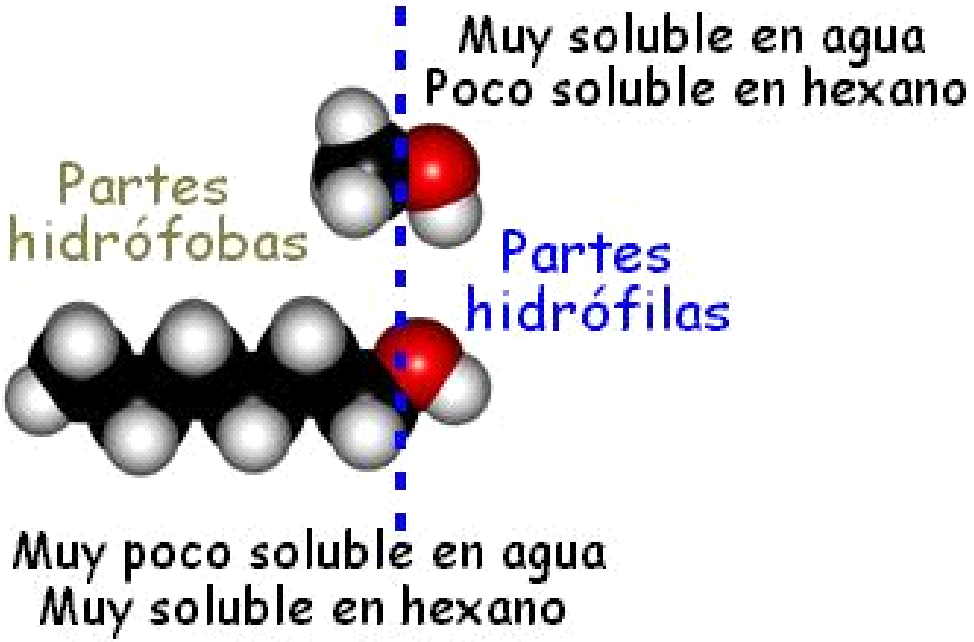
Propiedades físicas (Miscibilidad)

Nombre	**Fórmula**	**Miscibilidad g/100 g H_2O**
Metanol	CH_3OH	∞
Etanol	CH_3CH_2OH	∞
1-Propanol	$CH_3CH_2CH_2OH$	∞
2-Propanol	$(CH_3)_2CHOH$	∞
1-Butanol	$CH_3CH_2CH_2CH_2OH$	7,9
1-Pentanol	$CH_3(CH_2)_3CH_2OH$	insoluble

Miscibilidad

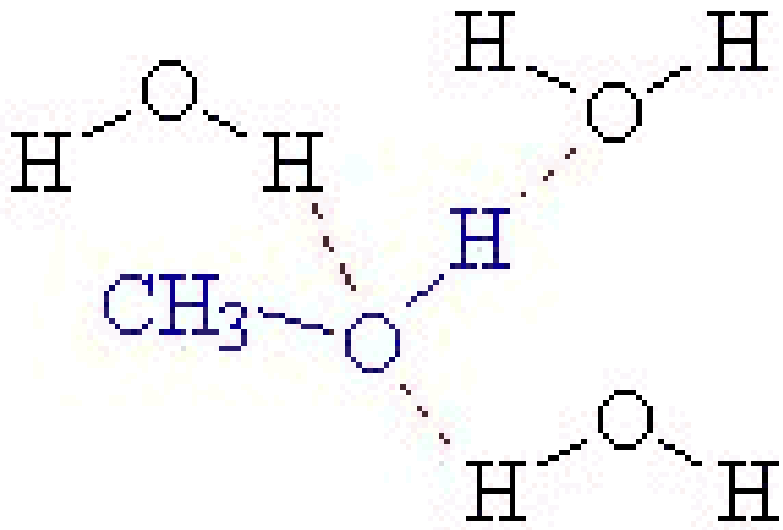
Los alcoholes más pequeños (C1-C3) son líquidos solubles en agua. Los de C5 en adelante son insolubles.

El grupo hidroxilo confiere polaridad a la molécula y posibilidad de formar puentes de hidrógeno. La parte carbonada es apolar y resulta hidrófoba. Cuanto mayor es la longitud del alcohol su solubilidad en agua disminuye y aumenta en disolventes poco polares.



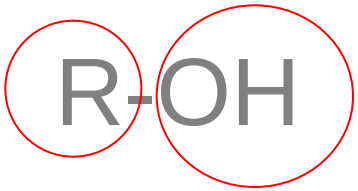
Los alcoholes de menor peso molecular interaccionan con puentes de hidrógeno con las moléculas de agua y forman parte de la red de puentes de hidrógeno, siendo totalmente miscibles en agua

Sin embargo, a medida que la cadena hidrocarbonada se hace mayor (parte apolar), el alcohol se va pareciendo más a un hidrocarburo, disminuyendo su solubilidad en agua.



El metanol (azul) es atraido por las moléculas de agua (negro) mediante puentes de hidrógeno.

Relación estructura alcohol y Polaridad



No polar	polar
Hidrofóbica	Hidrofílico
lipofílica	lipofóbico

Mayor radical R ⟶ Menor polaridad

Mayor nº de OH ⟶ Mayor polaridad

Para predecir la solubilidad de polialcoholes en agua, en general una buena aproximación es asumir que un alcohol (-OH) puede solubilizar hasta 4 átomos de carbono

Propiedades físicas (estados de agregación)

Nombre	Fórmula	p.f. °C	p.eb. °C
Metanol	CH_3OH	-94	65
Etanol	CH_3CH_2OH	-117	79
1-Propanol	$CH_3CH_2CH_2OH$	-127	97
2-Propanol	$(CH_3)_2CHOH$	-90	82
1-Butanol	$CH_3CH_2CH_2CH_2OH$	-90	117
1-Pentanol	$CH_3(CH_2)_3CH_2OH$	-115	138

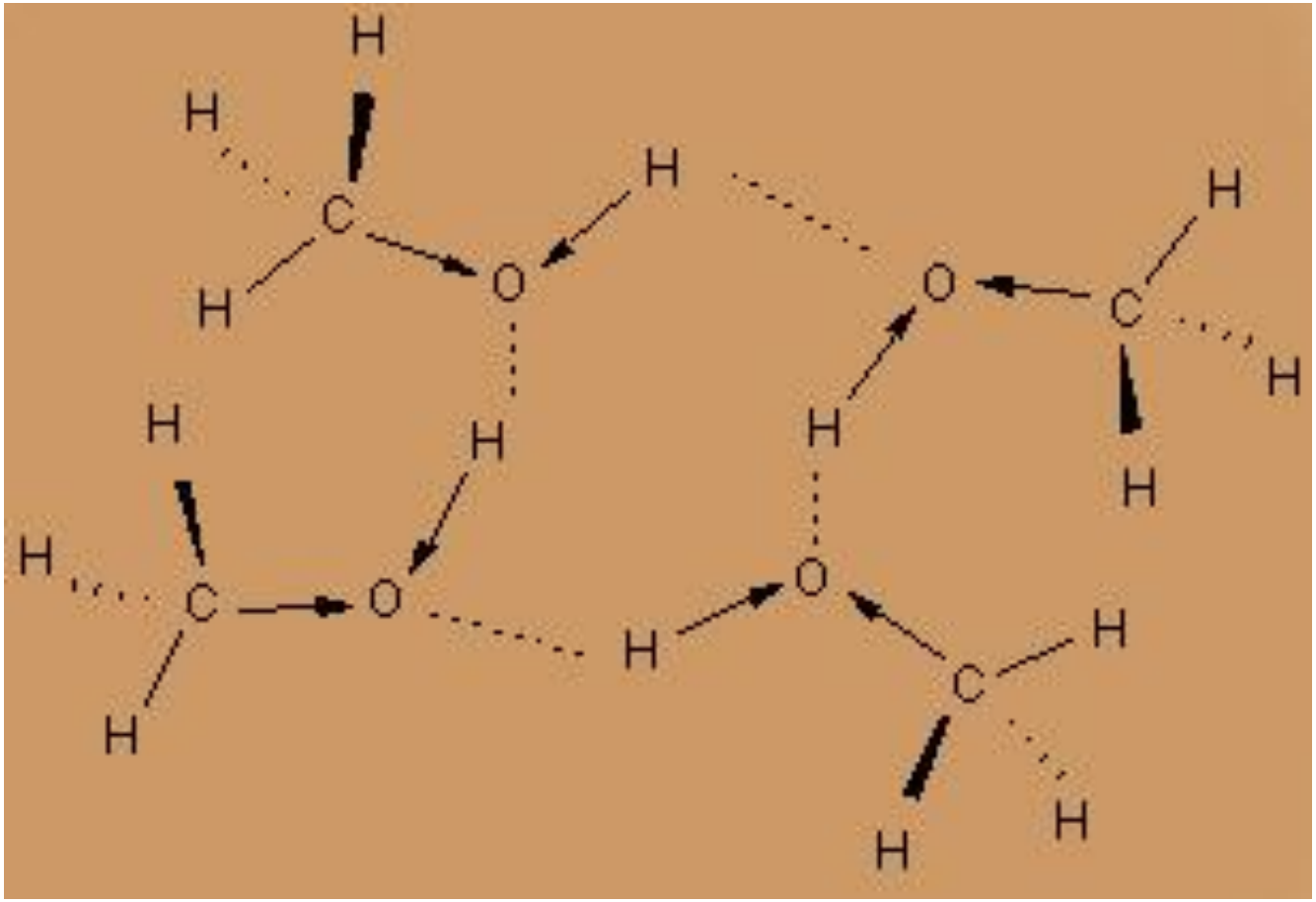
Propiedades físicas

Puntos de Ebullición

- Los alcoholes tienen puntos de ebullición relativamente elevados, en comparación con otros compuestos de peso molecular semejante

- Los alcoholes se caracterizan por la formación de puentes de hidrógeno, que es una fuerza intermolecular de gran magnitud, por tanto, tienen puntos de fusión y ebullición elevados, en comparación con otros compuestos orgánicos de similar peso molecular

Puentes de hidrógenos en el metanol



Puntos de Ebullición

CH_3CH_2-OH
PM = 46
p.e.=78,3°C

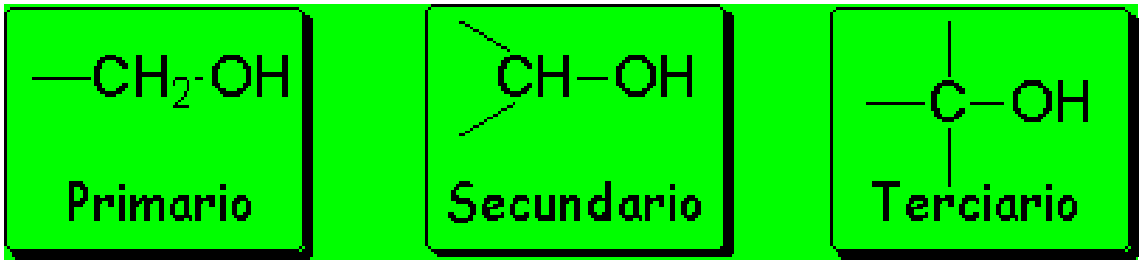
Hay uniones puente de H

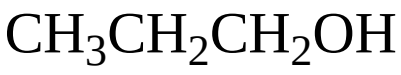
CH_3-O-CH_3
PM = 46
pe = - 25°C

No hay uniones puente de H

CLASIFICACIÓN DE ALCOHOLES

Dependiendo de la sustitución del carbono al que se une el grupo hidroxilo, un alcohol será:

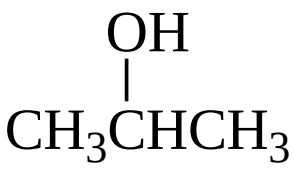




$CH_3CH_2CH_2OH$

1-Propanol

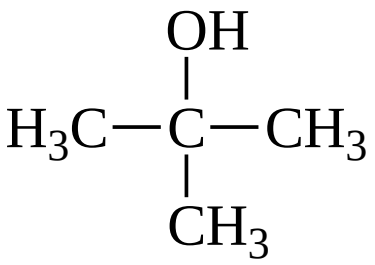
Alcohol primario



CH_3CHCH_3 (OH)

2-Propanol

Alcohol secundario



$H_3C—C(OH)—CH_3$ (CH_3)

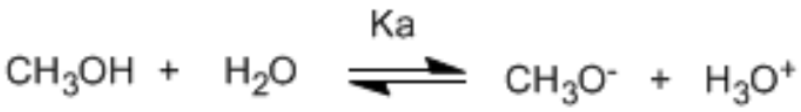
2-Metil-2-propanol

Alcohol terciario

Acidez y basicidad de alcoholes

Los alcoholes son especies anfóteras (anfipróticas), pueden actuar como ácidos o bases.

En disolución acuosa se establece un equilibrio entre el alcohol, el agua y sus bases conjugadas.



Escribiendo la constante del equilibrio (Ka)

$$Ka = \frac{[H_3O^+][CH_3O^-]}{[CH_3OH]} = 10^{-15.5}$$

El pequeño valor de la constante nos indica que el equilibrio está totalmente desplazado a la izquierda. El logaritmo cambiado de signo de la constante de equilibrio nos da el pKa del metanol, parámetro que indica el grado de acidez de un compuesto orgánico.

pKa = - log ka = 15.5

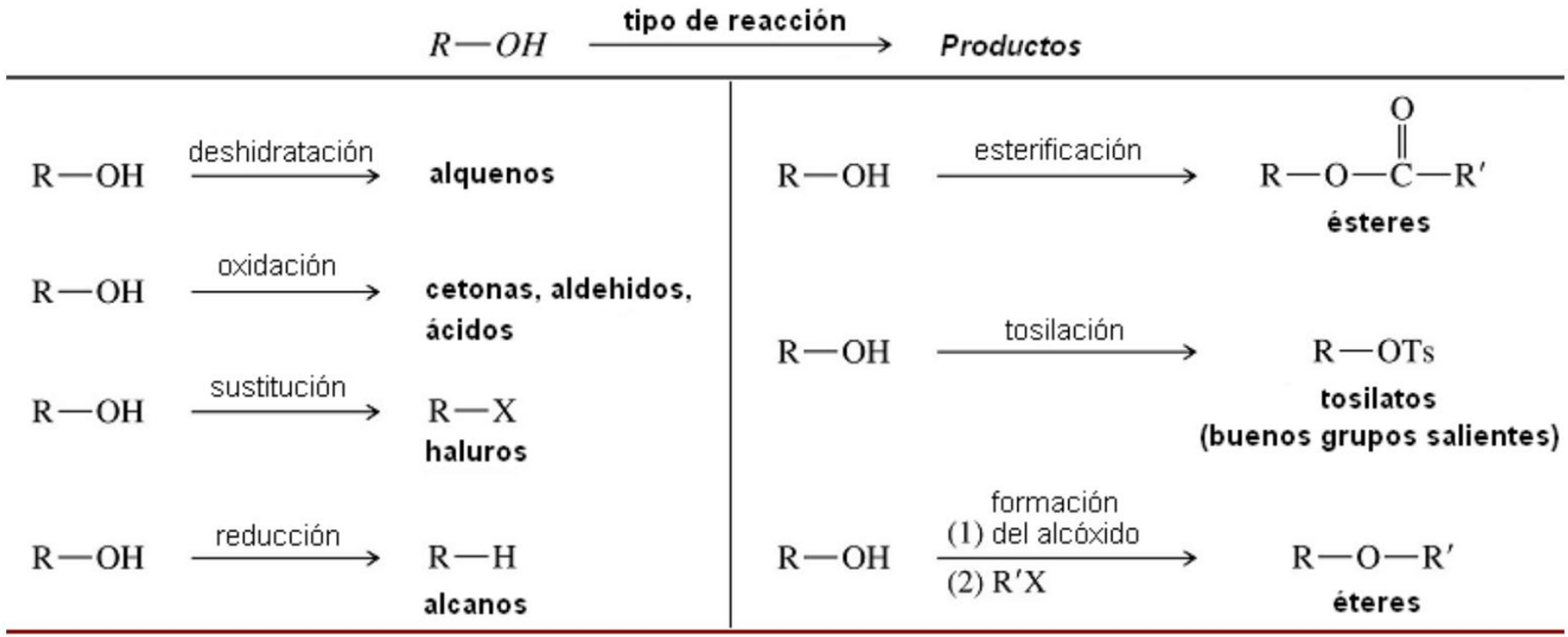
El aumento del pKa supone una disminución de la acidez. Asi, el metanol con un pka de 15.5 es ligeramente más ácido que el etanol con pka de 15.9.
El pKa de los alcoholes se ve influenciado por algunos factores como son el tamaño de la cadena carbonada y los grupos electronegativos
Al aumentar el tamaño de la cadena carbonada el alcohol se vuelve menos ácido.

CH_3OH	pKa = 15.5
CH_3CH_2OH	pKa = 15.9
$(CH_3)_2CHOH$	pKa = 17.1
$(CH_3)_3COH$	pKa = 18

Los grupos electronegativos (halógenos) aumentan la acidez de los alcoholes (bajan el pKa)

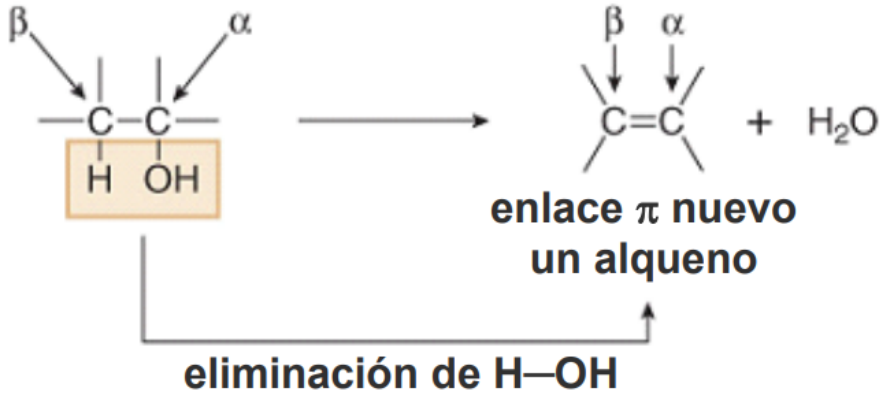
CH_3CH_2OH	pKa = 15.9
$ClCH_2CH_2OH$	pKa = 14,3
F_3CCH_2OH	pKa = 12,4

Tipos de reacciones que sufren los alcoholes



Deshidratación de alcoholes

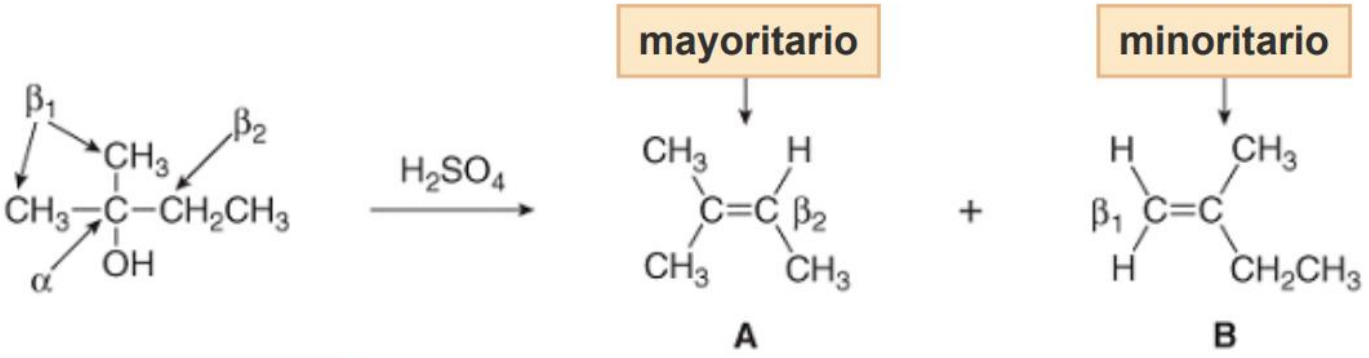
- La **deshidratación**, como la deshidrohalogenación, es una β eliminación.
- Se eliminan un OH y un H situados en dos carbonos contiguos y lo que da lugar a un enlace π.



- Las deshidrataciones se pueden realizar con H_2SO_4 o con otros ácidos fuertes, o con oxicloruro de fósforo ($POCl_3$) en presencia de una base como la piridina.

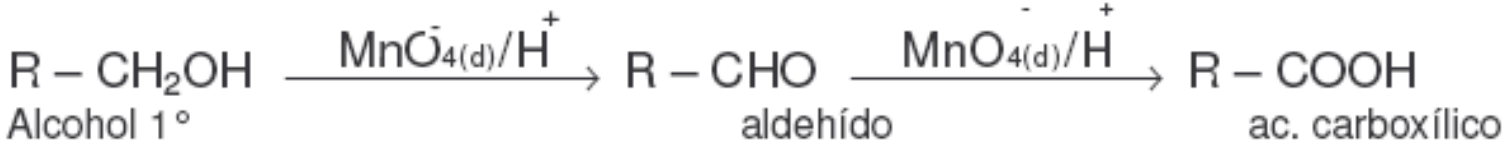
Deshidratación de alcoholes en medio ácido

- La reacción de deshidratación de alcoholes en medio ácido es regioselectiva, se cumpe la regla de Zaitsev.
- Cuando es posible que se formen varios isómeros constitucionales, el alqueno más sustituido es el producto mayoritario.



dos posiciones β diferentes: β_1 y β_2

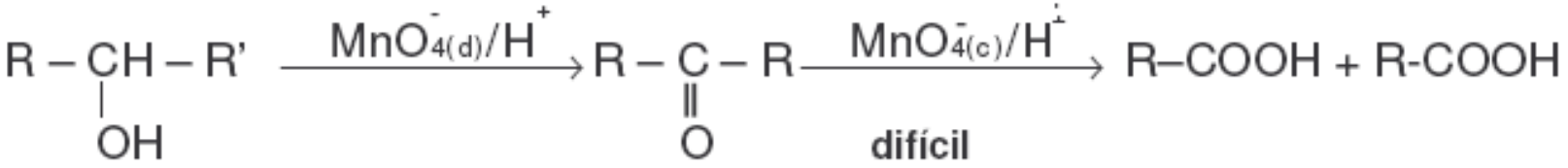
Oxidación de alcoholes



Alcohol 1°

aldehído

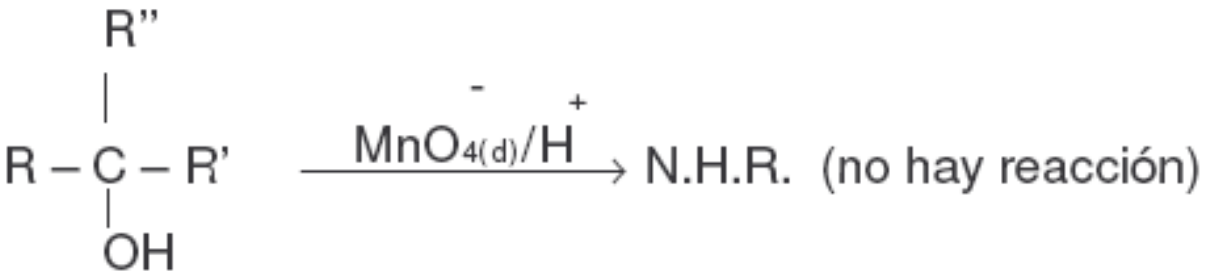
ac. carboxílico



Alcohol 2ario

cetona

difícil

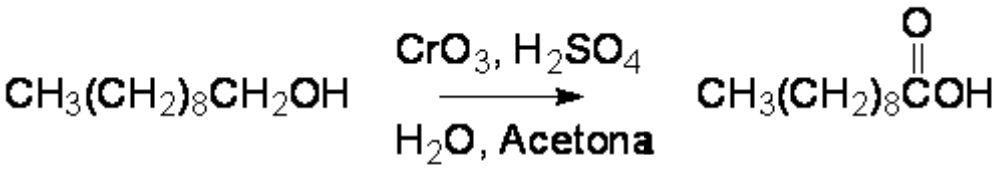


alcohol 3ario

Oxidación de alcoholes

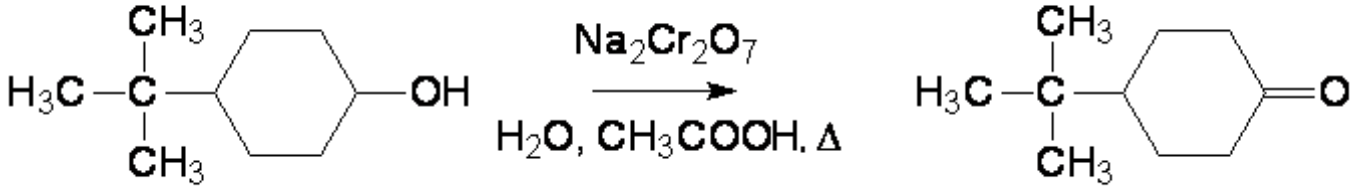
- La oxidación de alcoholes primarios y secundarios puede efectuarse con un gran número de reactivos, como el **$KMnO_4$, CrO_3 y $Na_2Cr_2O_7$ (medio ácido).**

Oxidación de alcoholes



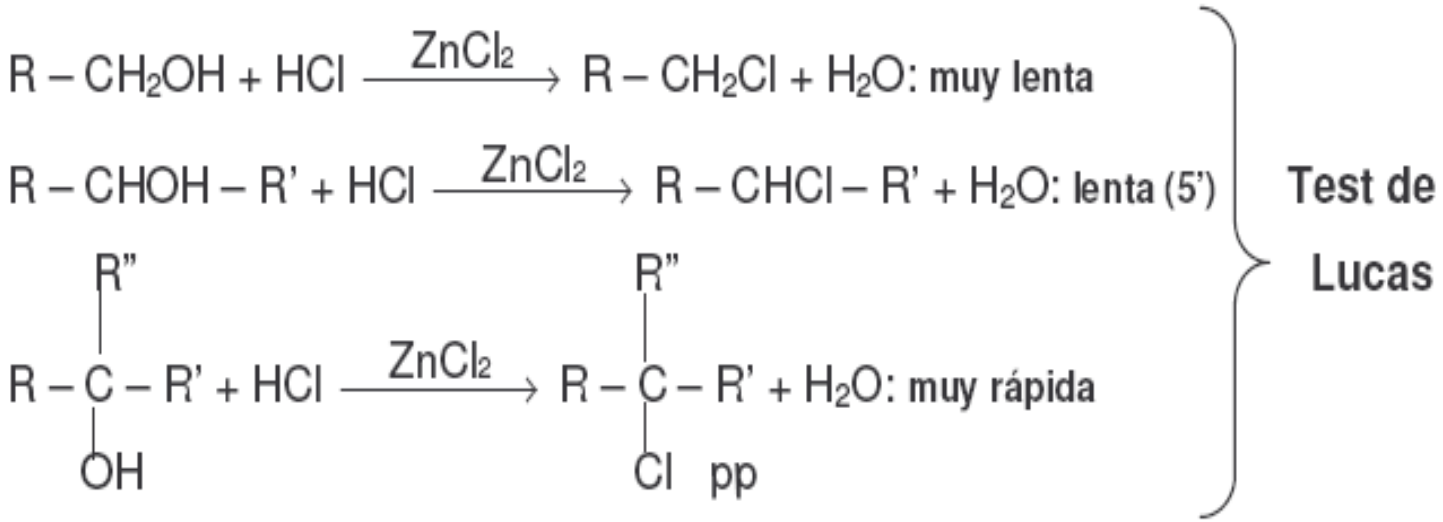
1-Decanol

Ácido decanoico (93%)

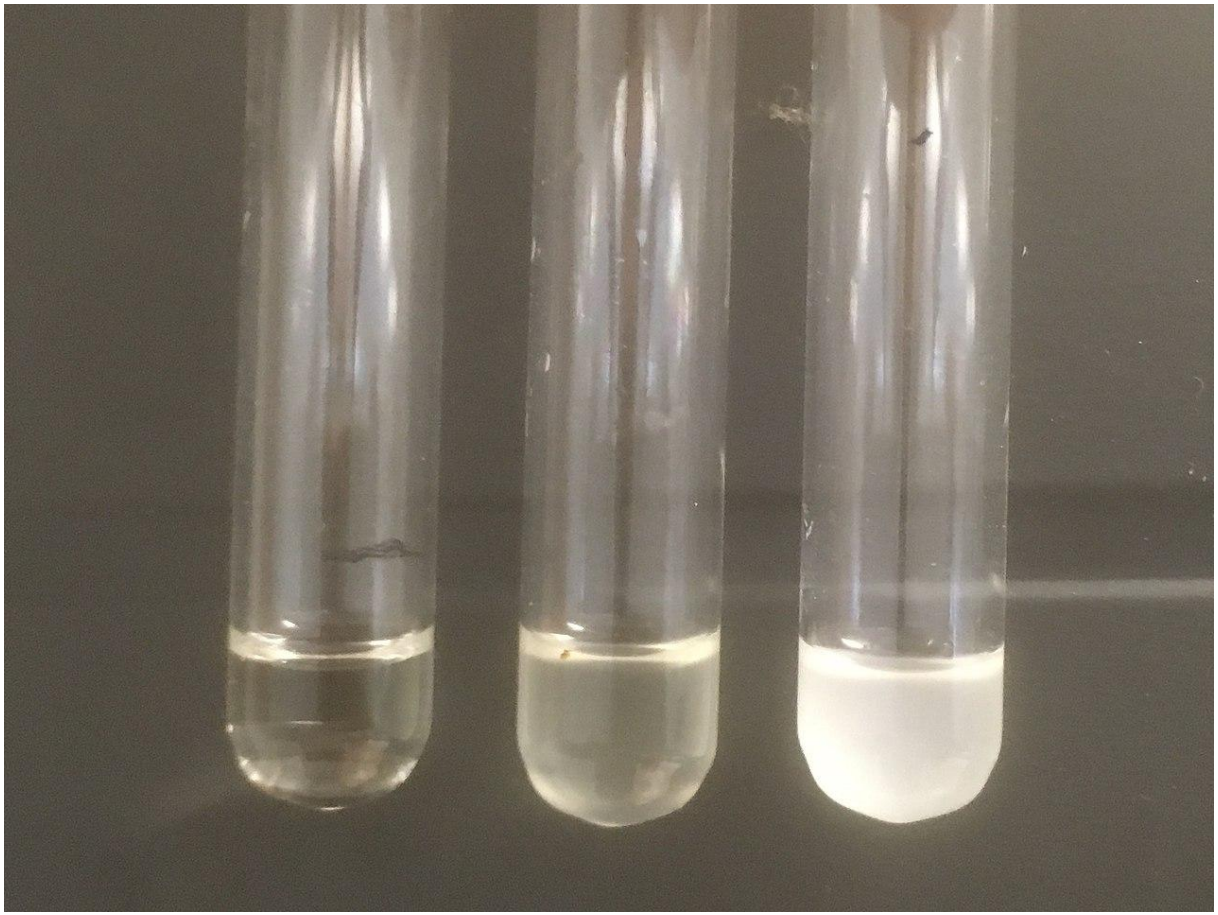


TEST DE LUCAS

El reactivo de Lucas reacciona con los alcoholes primarios, secundarios y terciarios con velocidades bastante predecibles, y es utilizado para diferenciar entre las tres clases de alcoholes:



* No hay reacción visible: **alcohol primario**
* La solución se torna turbia en 3-5 minutos: **alcohol secundario**
*La solución se vuelve turbia inmediatamente, y/o las fases se separan: **alcohol terciario**, **bencílico** **o** **alílico**



* No hay reacción visible: **alcohol primario**
* La solución se torna turbia en 3-5 minutos: **alcohol secundario**
*La solución se vuelve turbia inmediatamente, y/o las fases se separan: **alcohol terciario**, **bencílico** **o** **alílico**

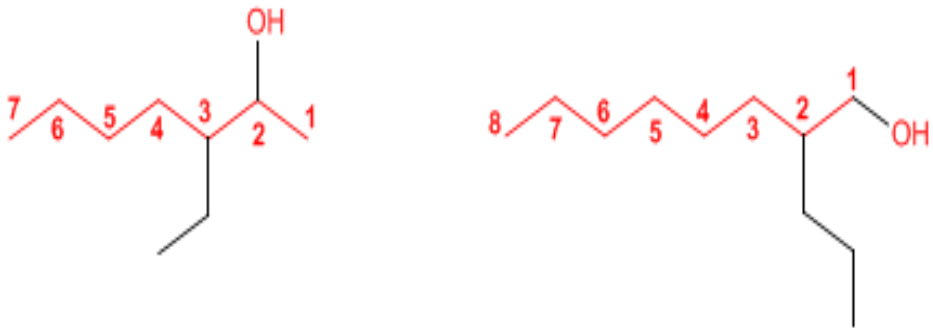
Taller de Alcoholes

Taller Alcoholes

1.- Ejercicios de Nomenclatura

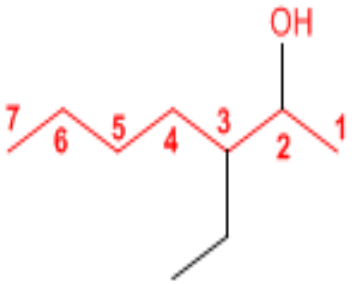
Regla 1. Se elige como cadena principal la de mayor longitud que contenga el grupo -OH.

Regla 2. Se numera la cadena principal para que el grupo -OH tome el localizador más bajo. El grupo hidroxilo tiene preferencia sobre cadenas carbonadas, halógenos, dobles y triples enlaces.

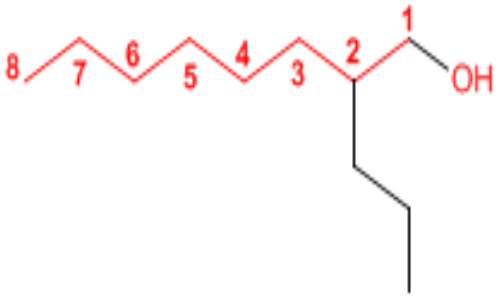


Taller Alcoholes

Regla 3. El nombre del alcohol se construye cambiando la terminación -o del alcano con igual

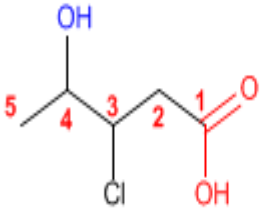


3-Etilheptanol

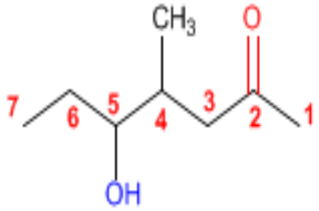


2-Propiloctanol

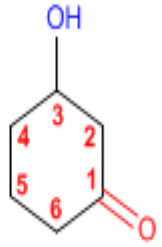
Regla 4. Cuando en la molécula hay grupos grupos funcionales de mayor prioridad, el alcohol pasa a ser un mero sustituyente y se llama hidroxi-. Son prioritarios frente a los alcoholes: ácidos carboxílicos, anhídridos, ésteres, haluros de alcanoilo, amidas, nitrilos, aldehídos y cetonas.



Ácido 3-cloro-4-hidroxipentanoico



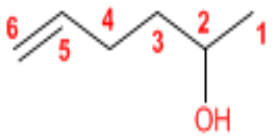
5-Hidroxi-4-metilheptanona



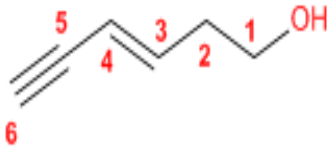
3-Hidroxiciclohexanona

Taller Alcoholes

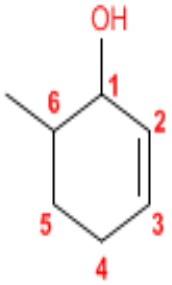
Regla 5. El grupo -OH es prioritario frente a los alquenos y alquinos. La numeración otorga el localizador más bajo al -OH y el nombre de la molécula termina en -ol.



Hex-5-en-2-ol



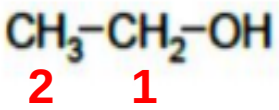
Hex-3-en-5-in-1-ol



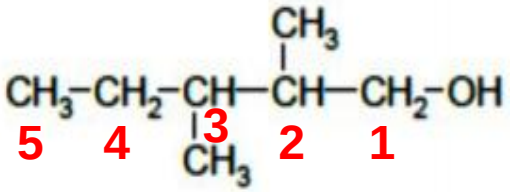
6-Metilciclohex-2-en-1-ol

1.- Ejercicios de Nomenclatura

Nombrar los siguiente alcoholes:

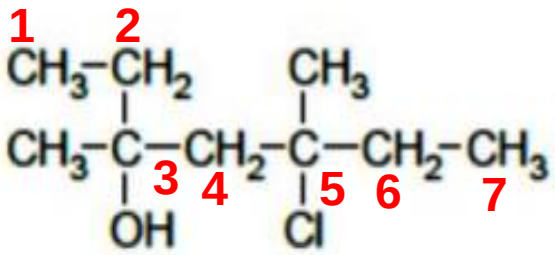


ETANOL

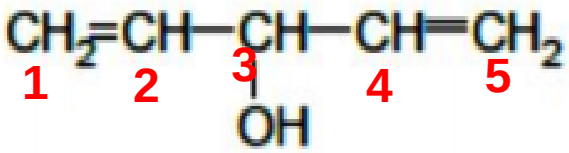


2,3-dimetil-1-pentanol

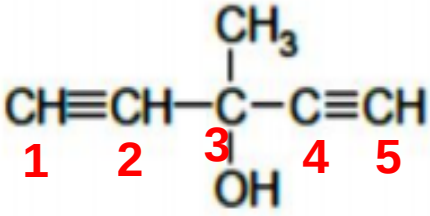
Taller Alcoholes



5-cloro-3,5-dimetil-3-heptanol



1,4-pentadien-3-ol



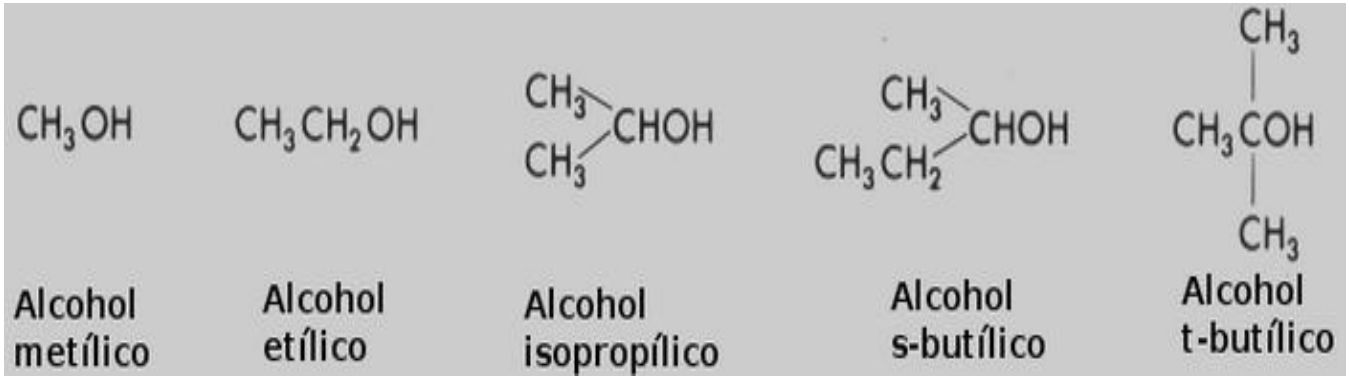
3-metil-1,4-pentadiin-3-ol

Dibuje la estructura para cada uno de los siguientes nombres IUPAC.

- 2,4-dimetil-2-pentanol

- 2-bromo-3-metil-1-butanol

- 3-cloro-ciclohexanol



- 2,4-dimetil-2-pentanol - 2-bromo-3-metil-1-butanol - 3-cloro-ciclohexanol

Taller Alcoholes

2.- ¿Todos los alcoholes son miscibles en agua?. Justifique su respuesta basado en el análisis estructural de los alcoholes

Enlace	Δ EN	Tipo de Enlace	Fuerzas intermoleculares
O-H			
C-H			
C-C			
C-O			

VALORES DE ELECTRONEGATIVIDAD

H 2.1																Elemento más electronegativo
Li 1.0	Be 1.5											B 2.0	C 2.5	N 3.0	O 3.5	F 4.0
Na 0.9	Mg 1.2											Al 1.5	Si 1.8	P 2.1	S 2.5	Cl 3.0
K 0.8	Ca 1.0	Sc 1.3	Ti 1.5	V 1.6	Cr 1.6	Mn 1.5	Fe 1.8	Co 1.8	Ni 1.8	Cu 1.9	Zn 1.6	Ga 1.6	Ge 1.8	As 2.0	Se 2.4	Br 2.8
Rb 0.8	Sr 1.0	Y 1.2	Zr 1.4	Nb 1.6	Mo 1.8	Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.2	Pd 1.2	Ag 1.9	Cd 1.7	In 1.7	Sn 1.8	Sb 1.9	Te 2.1	I 2.5
Cs 0.7	Ba 0.9	La 1.1	Hf 1.3	Ta 1.5	W 1.7	Re 1.9	Os 2.2	Ir 2.2	Pt 2.2	Au 2.4	Hg 1.9	Tl 1.8	Pb 1.8	Bi 1.9	Po 2.0	At 2.2
Fr 0.7	Ra 0.9	Ac 1.1	Th 1.3	Pa 1.5	U 1.7	Np – Lw 1.3										

Elemento menos electronegativo

Taller Alcoholes

2.- ¿Todos los alcoholes son miscibles en agua?. Justifique su respuesta basado en el análisis estructural de los alcoholes

Enlace	Δ EN	Tipo de Enlace	Fuerzas intermoleculares
O-H	1.4	Covalente polar	Puente de Hidrógeno Fuerzas de Dispersión de London
C-H	0.4	Covalente Apolar	Fuerzas de Dispersión de London
C-C	0	Covalente Apolar	Fuerzas de Dispersión de London
C-O	1.0	Covalente polar	Dipolo-dipolo Fuerzas de Dispersión de London

Nombre	Fórmula	Miscibilidad g/100 g H_2O
Metanol	CH_3OH	∞
Etanol	CH_3CH_2OH	∞
1-Propanol	$CH_3CH_2CH_2OH$	∞
2-Propanol	$(CH_3)_2CHOH$	∞
1-Butanol	$CH_3CH_2CH_2CH_2OH$	7,9
1-Pentanol	$CH_3(CH_2)_3CH_2OH$	insoluble

Taller Alcoholes

3.- Explique la diferencia en el punto de ebullición de los siguientes compuestos. Argumente su respuesta basado en el análisis estructural de cada uno de ellos

Etanol

CH_3CH_2-OH

PM = 46

p.e.=78,3°C

Dimetil eter

CH_3-O-CH_3

PM = 46

pe = - 25°C

Enlace	Δ EN	Tipo de Enlace	Fuerzas intermoleculares
O-H			
C-H			
C-C			
C-O			

VALORES DE ELECTRONEGATIVIDAD

H 2.1																	Elemento más electronegativo
Li 1.0	Be 1.5											B 2.0	C 2.5	N 3.0	O 3.5	F 4.0	
Na 0.9	Mg 1.2											Al 1.5	Si 1.8	P 2.1	S 2.5	Cl 3.0	
K 0.8	Ca 1.0	Sc 1.3	Ti 1.5	V 1.6	Cr 1.6	Mn 1.5	Fe 1.8	Co 1.8	Ni 1.8	Cu 1.9	Zn 1.6	Ga 1.6	Ge 1.8	As 2.0	Se 2.4	Br 2.8	
Rb 0.8	Sr 1.0	Y 1.2	Zr 1.4	Nb 1.6	Mo 1.8	Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.2	Pd 1.2	Ag 1.9	Cd 1.7	In 1.7	Sn 1.8	Sb 1.9	Te 2.1	I 2.5	
Cs 0.7	Ba 0.9	La 1.1	Hf 1.3	Ta 1.5	W 1.7	Re 1.9	Os 2.2	Ir 2.2	Pt 2.2	Au 2.4	Hg 1.9	Tl 1.8	Pb 1.8	Bi 1.9	Po 2.0	At 2.2	
Fr 0.7	Ra 0.9	Ac 1.1	Th 1.3	Pa 1.5	U 1.7	Np–Lw 1.3											

Elemento menos electronegativo

Taller Alcoholes

3.- Explique la diferencia en el punto de ebullición de los siguientes compuestos. Argumente su respuesta basado en el análisis estructural de cada uno de ellos

Etanol

CH_3CH_2-OH

PM = 46

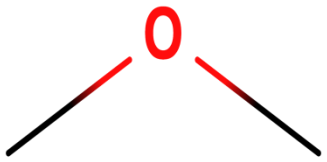
p.e.=78,3 °C

Dimetil eter

CH_3-O-CH_3

PM = 46

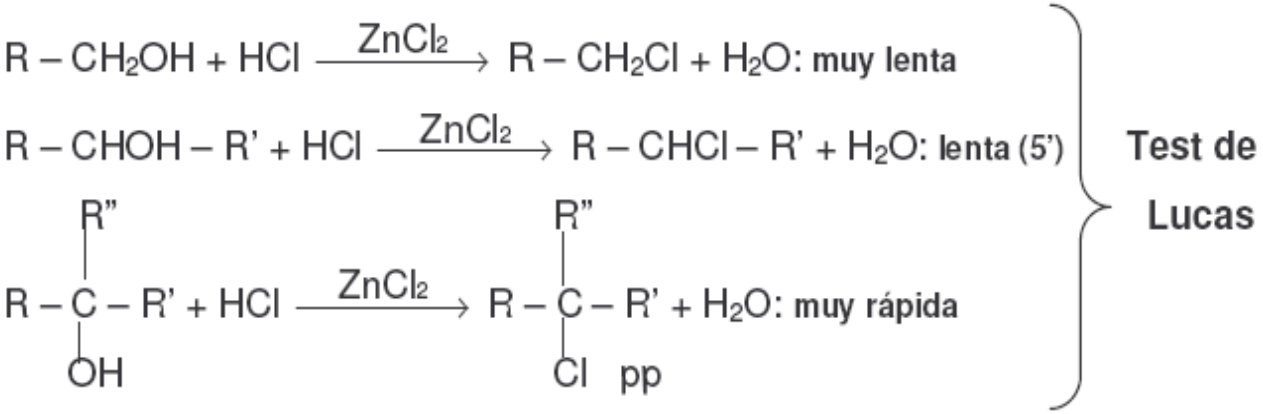
pe = - 25°C



Enlace	Δ EN	Tipo de Enlace	Fuerzas intermoleculares
O-H	1.4	Covalente polar	Puente de Hidrógeno Fuerzas de Dispersión de London
C-H	0.4	Covalente Apolar	Fuerzas de Dispersión de London
C-C	0	Covalente Apolar	Fuerzas de Dispersión de London
C-O	1.0	Covalente polar	Dipolo-dipolo Fuerzas de Dispersión de London

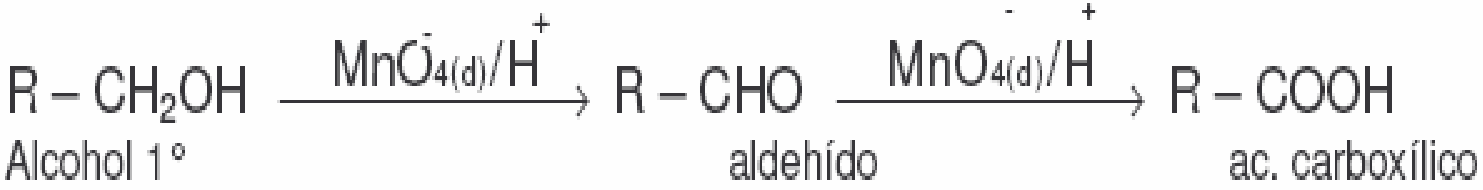
TEST DE LUCAS

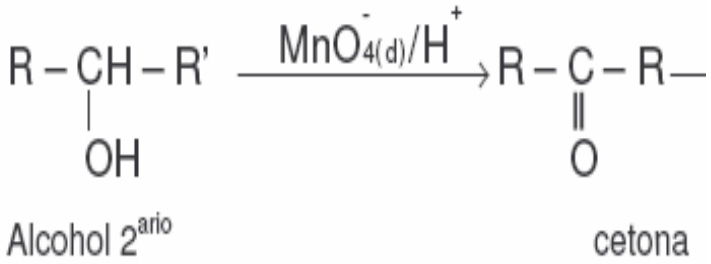
El reactivo de Lucas reacciona con los alcoholes primarios, secundarios y terciarios con velocidades bastante predecibles, y es utilizado para diferenciar entre las tres clases de alcoholes:

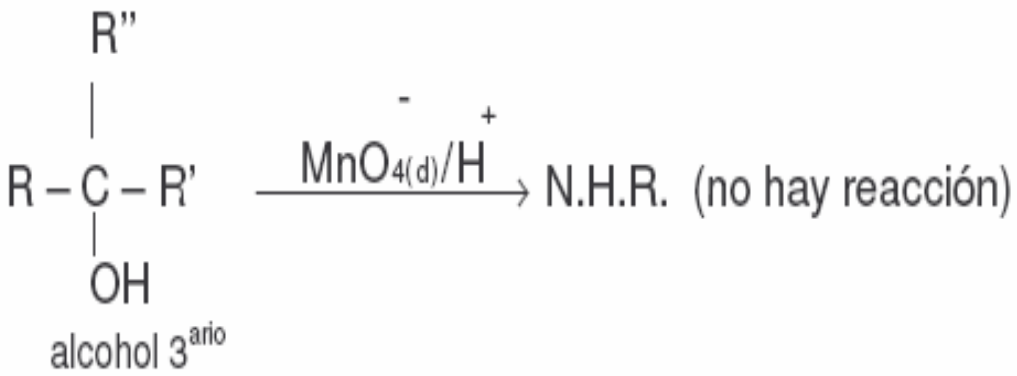


* No hay reacción visible: **alcohol primario**
* La solución se torna turbia en 3-5 minutos: **alcohol secundario**
*La solución se vuelve turbia inmediatamente, y/o las fases se separan: **alcohol terciario**, **bencílico** **o** **alílico**

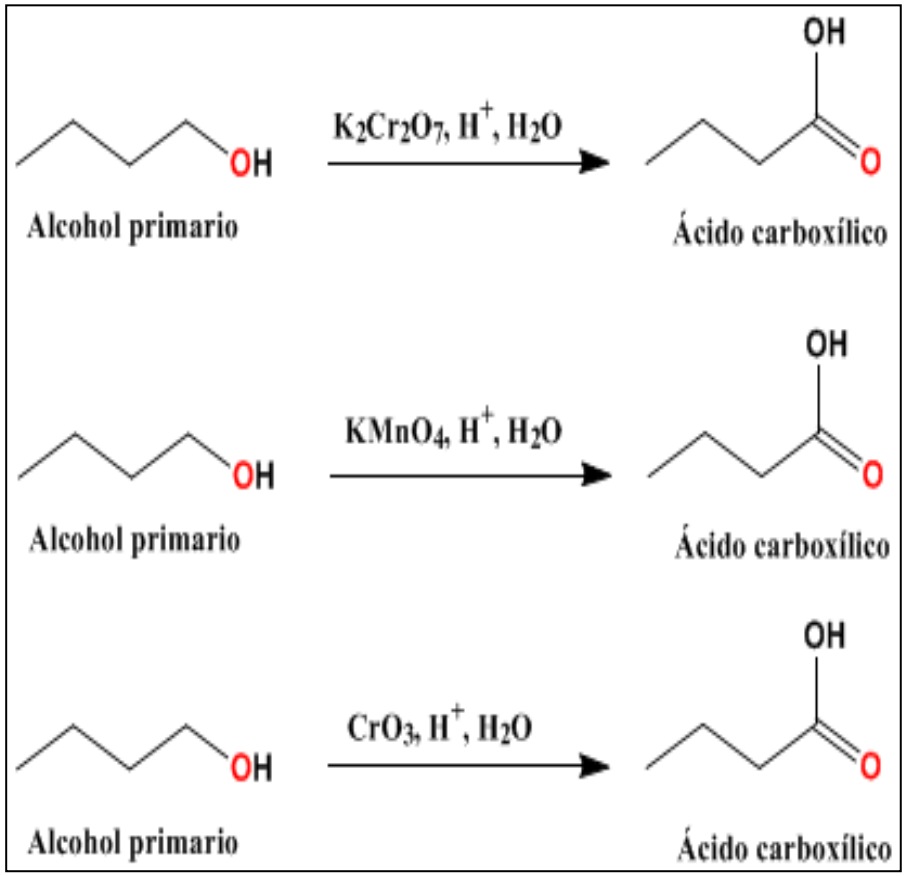
Oxidación de alcoholes

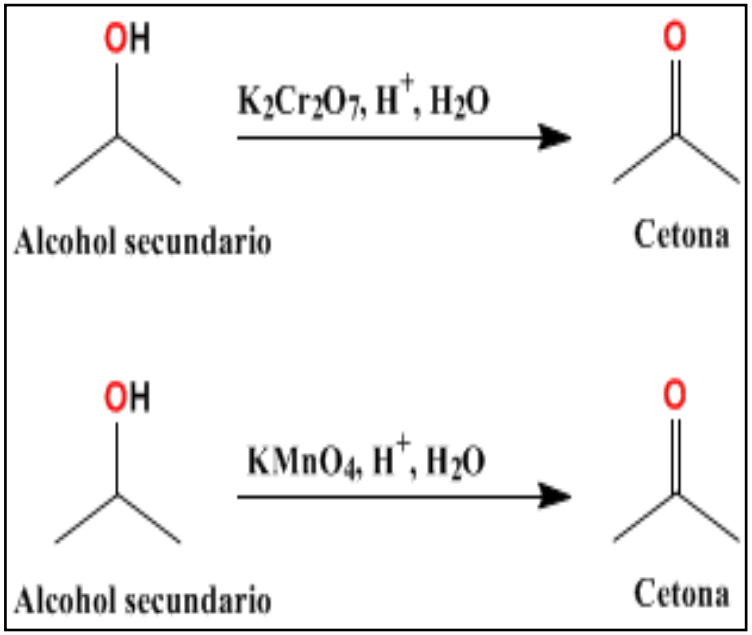




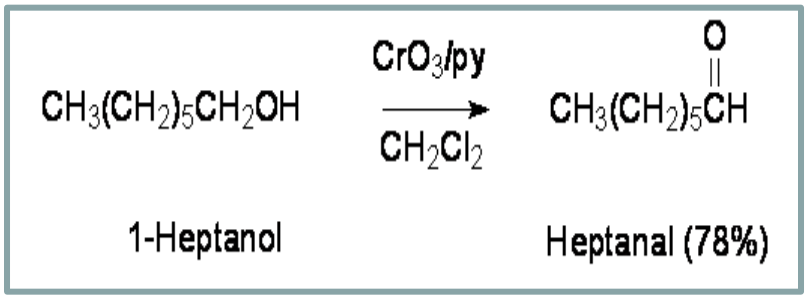


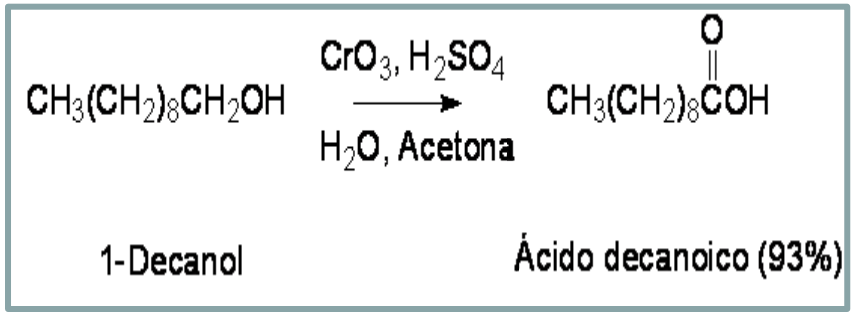
Oxidación de alcoholes

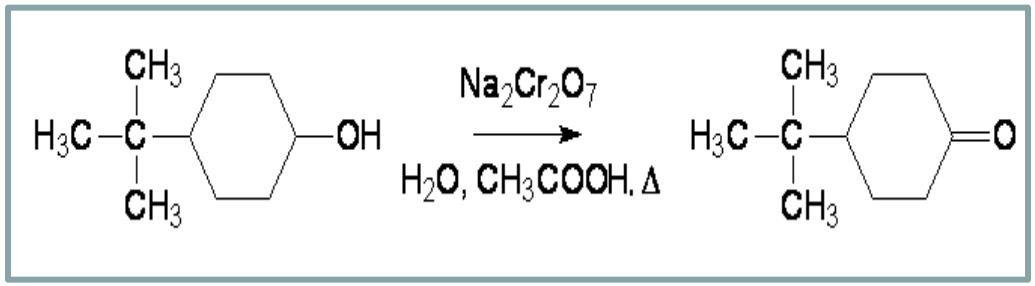




Oxidación de alcoholes

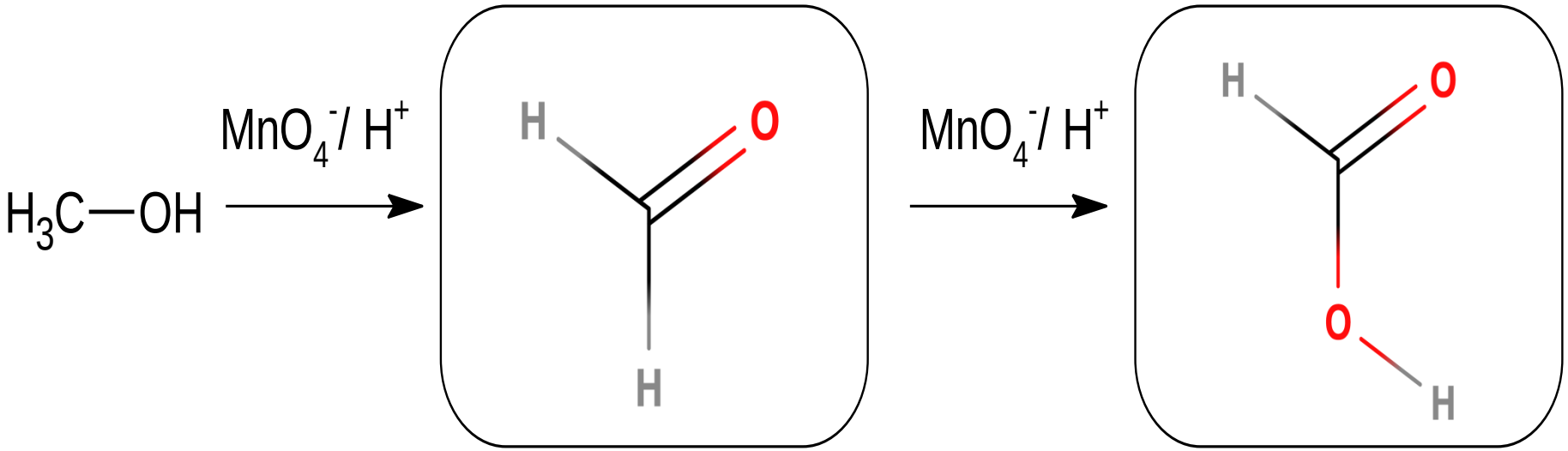






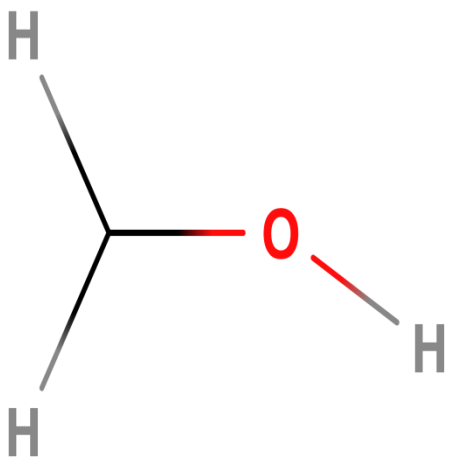
Taller Alcoholes

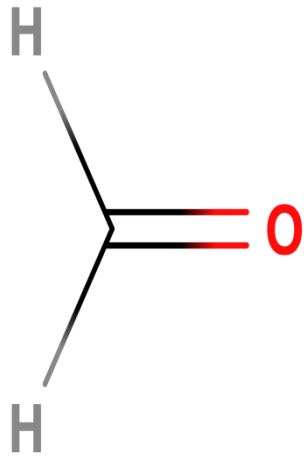
4.- Complete la siguiente reacción y determine los EDO de todos los átomos involucrados en la reacción

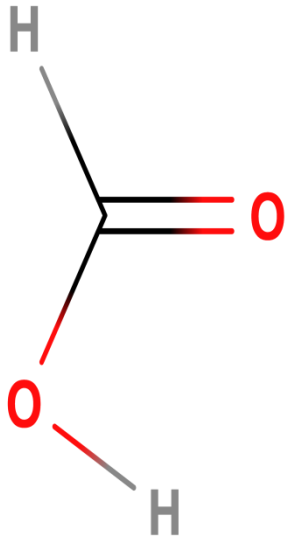


Taller Alcoholes

4.- Complete la siguiente reacción y determine los EDO de todos los átomos involucrados en la reacción

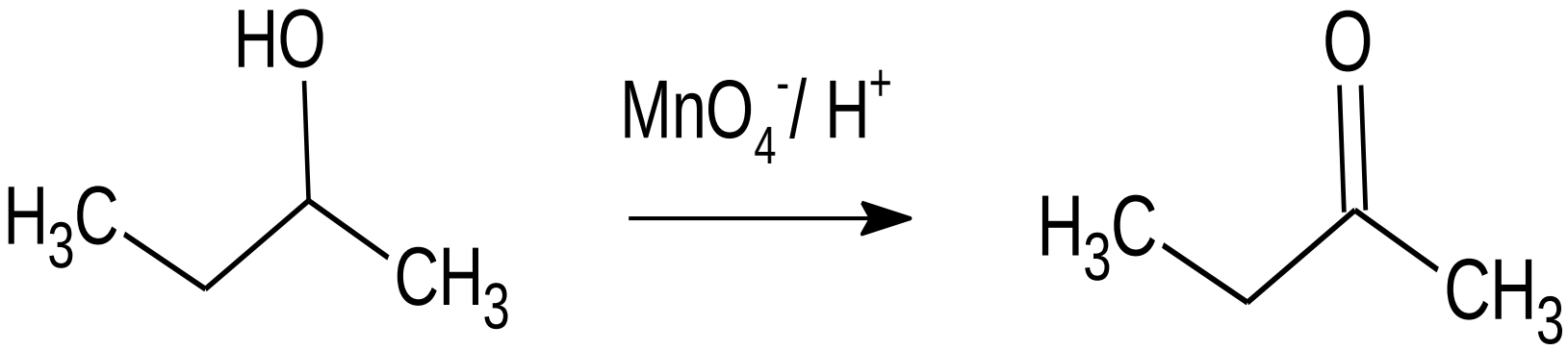


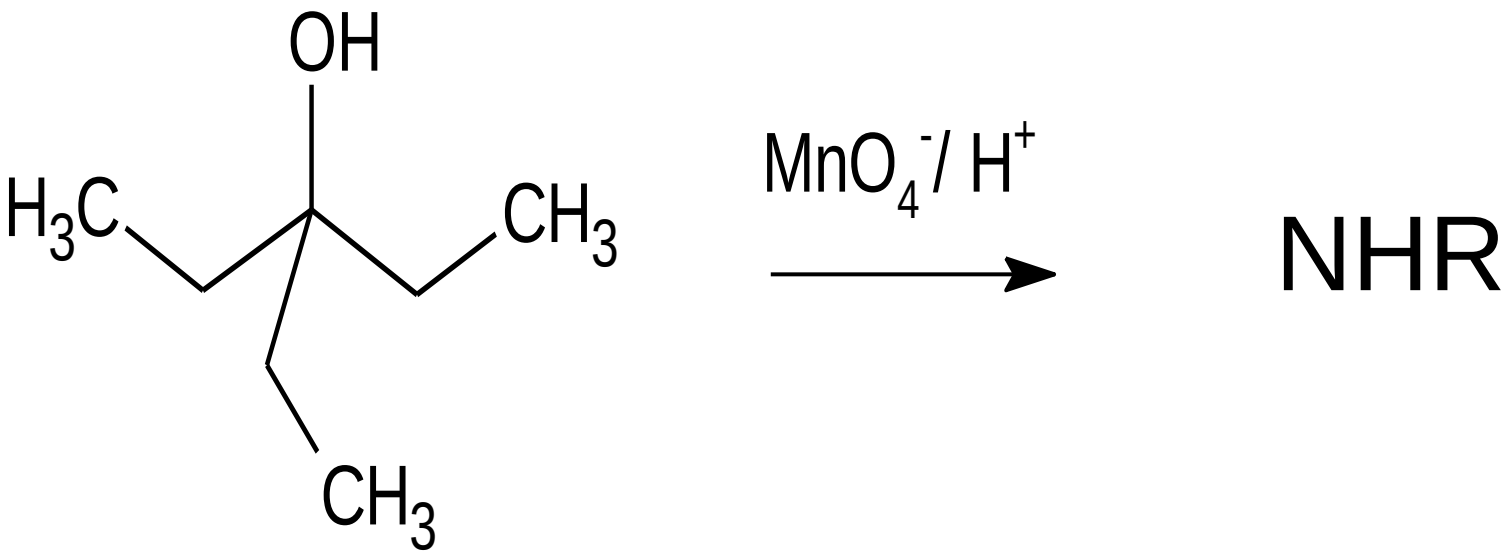




Taller Alcoholes

5.-Complete la siguiente reacción y determine los EDO de todos los átomos involucrados en la reacción



Taller Alcoholes

6.- Complete la siguiente reacción y determine los EDO de todos los átomos involucrados en la reacción