

Solubilità in acqua

L'acqua è il liquido più abbondante ed importante del nostro pianeta. La miscibilità di altri liquidi in acqua, e la solubilità dei solidi in acqua, deve essere considerata quando si isolano e purificano i composti. In fondo viene fornita una tabella indicante la miscibilità (o la solubilità) in acqua di un certo numero di composti organici a basso peso molecolare. L'influenza di atomi responsabili dei legami a idrogeno, come l'ossigeno o l'azoto, è evidente. La prima riga elenca degli idrocarburi semplici e idrocarburi alogenati. Senza eccezioni essi sono tutti immiscibili con acqua, sebbene sia interessante notare come gli elettroni π del benzene e quelli di non valenza del cloro contribuiscano ad aumentare leggermente le interazioni con l'acqua rispetto agli idrocarburi saturi. Comparati con gli idrocarburi, i composti contenenti ossigeno e/o azoto elencati nella seconda, terza e quarta riga sono centinaia di volte più solubili in acqua e molti di essi lo sono completamente.

Ci sono alcune eccezioni. Gli alcoli (seconda riga, colonna a sinistra), sono di solito più solubili degli eteri di pari peso molecolare (seconda riga, colonna a destra). Questo riflette il fatto che il gruppo ossidrilico può fungere sia da accettore che da donatore nel legame a idrogeno, mentre l'ossigeno eterico può fungere solo da accettore. La solubilità relativamente più alta del fenolo rispetto al cicloesano può essere dovuta, oltre al sopracitato effetto degli elettroni π dell'anello aromatico, anche alla maggiore acidità del fenolo dovuta alla stabilità per delocalizzazione elettronica dell'anione fenato. L'etere ciclico THF (tetraidrofurano) è più solubile del suo analogo a catena aperta, probabilmente perché nel primo caso l'ossigeno è più accessibile alle molecole di acqua per il legame H. Grazie alla diminuita basicità dell'ossigeno nel furano, esso è meno solubile in acqua. L'atomo di ossigeno nell'anisolo è invece disattivato per coniugazione con l'anello benzenico (da notare che questo effetto contribuisce ad attivare lo stesso anello nelle reazioni di sostituzione elettrofila). Un secondo atomo di ossigeno aumenta fortemente la solubilità, come dimostrano i composti elencati nella terza riga. I composti con un gruppo ossidrilico sono elencati a sinistra.

L'azoto esercita un'influenza positiva come l'ossigeno (quarta riga). Le ammine primarie e secondarie nella sinistra funzionano sia come accettori che donatori. L'aromaticità contrasta la basicità del pirrolo, ma aumenta la sua acidità. I composti alla destra fungono solo da accettori. La bassa solubilità dei nitrocomposti è sorprendente.

Solubilità in Acqua di Composti Caratteristici

Composto Tipo	Composti Specifici	Grammi/100mL	Moli/Litro	Composti Specifici	Grammi/100mL	Moli/Litro
Idrocarburi & Alogenuri alchilici	butano	0.007	0.0012	benzene	0.07	0.009
	esano	0.0009	0.0001	metilene cloruro	1.50	0.180
	cicloesano	0.006	0.0007	cloroformio	0.8	0.07
Composti aventi un atomo di Ossigeno	1-butanolo	9.0	1.2	dietiletere	6.0	0.80
	<i>tert</i> -butanolo	completa	completa	THF	completa	completa
	cicloesanololo	3.6	0.36	furano	1.0	0.15
	fenolo	8.7	0.90	anisolo	1.0	0.09
Composti aventi due atomi di Ossigeno	1,3-propandiolo	completa	completa	1,2-dimetossietano	completa	completa
	2-butossietanololo	completa	completa	1,4-diossano	completa	completa
	acido butanoico	completa	completa	etilacetato	8.0	0.91
	acid benzoico	completa	completa	γ -butirrolattone	completa	completa
Composti Contenenti Azoto	1-aminobutano	completa	completa	triethylamina	5.5	0.54
	cicloesilamina	completa	completa	piridina	completa	completa
	anilina	3.4	0.37	propionitrile	10.3	2.0
	pirrolidina	completa	completa	1-nitropropano	1.5	0.17
	pirrolo	6.0	0.9	DMF	completa	completa