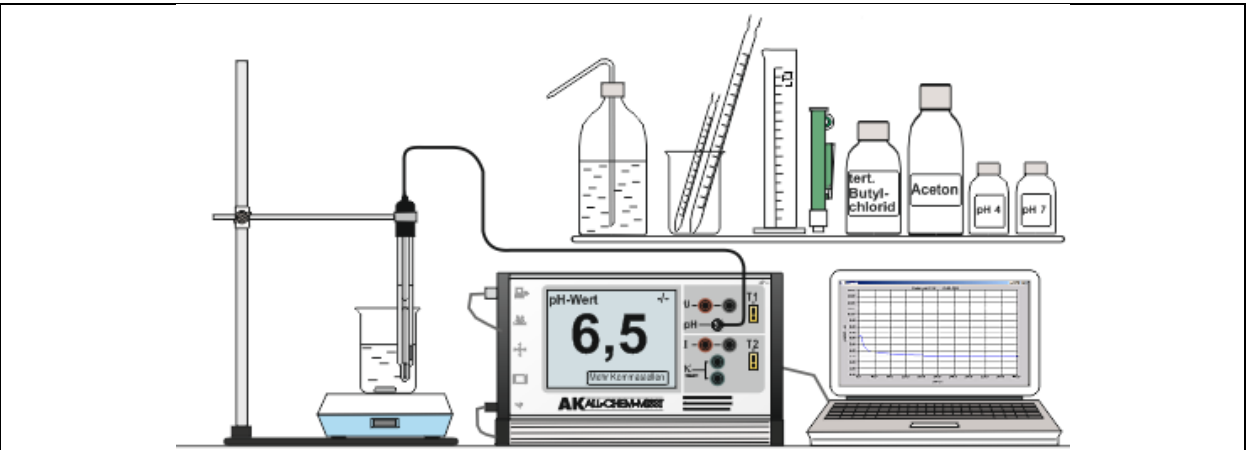




Prinzip

Die Hydrolyse von tert. Butylchlorid in wässriger Lösung kann mit Hilfe der pH-Wert-Messung verfolgt werden, da dabei Oxoniumionen entstehen. Der Versuch wird über einen bestimmten Zeitraum vermessen und die Daten unter reaktionskinetischen Gesichtspunkten ausgewertet.

Aufbau  
und  
Vorbereitung



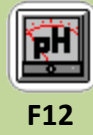
Benötigte Geräte	Verwendete Chemikalien
<input type="checkbox"/> ALL-CHEM-MISST II / ACM Junior <input type="checkbox"/> Netzteil / USB-Anschlusskabel <input type="checkbox"/> Computer <input type="checkbox"/> pH-Elektrode mit BNC <input type="checkbox"/> Spülbecherglas, 250 mL <input type="checkbox"/> Messpipette, 1 mL <input type="checkbox"/> Becherglas, 150 mL <input type="checkbox"/> Pipettierhilfe	<input type="checkbox"/> tert. Butylchlorid, c = 0.1 mol/L in Aceton 1,1 mL 2-Chlor-2-methylpropan in 100 mL Lösung (Aceton) <input type="checkbox"/> Aceton <input type="checkbox"/> Wasser <input type="checkbox"/> evtl. Pufferlösung pH = 7 bzw. pH = 2

Vorbereitung des Versuchs

- ▶ Geräte entsprechend der Zeichnung aufbauen.
- ▶ **90 mL destilliertes Wasser** mit **Messzylinder** und **10 mL Aceton** mit **Pipette** in **Becherglas** geben.
- ▶ **Rührfisch** dazugeben und das **Becherglas** auf **Magnetrührer** stellen.
- ▶ **pH-Elektrode** in halb mit **Leitungswasser** gefülltes **Spülbecherglas** stellen.
- ▶ **ALL-CHEM-MISST II** mit **USB-Kabel** an **Computer** anschließen.
- ▶ pH- Elektrode in die entsprechende pH-Buchse stecken.

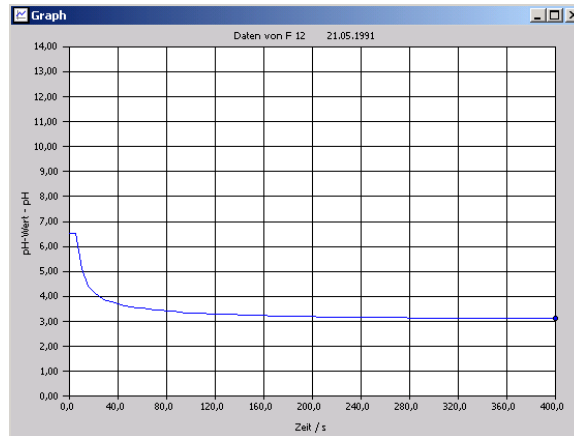
Vorbereitung am Computer

- ▶ **AK Analytik 11** starten; **Messen** mit **Geräte-Schnellstarter App** **ALL-CHEM-MISST II**
- ▶ Anweisungen befolgen und 'abhaken' **Weiter**
- ▶ **Auswahl des Messkanals: (Buchse im Bild) pH** **Weiter**
- ▶ **Abfrage: „pH Wert kalibrieren“** **Ja** (bei „nein“ grünen Kasten überspringen!)
- ▶ Zwei unterschiedliche Pufferlösungen bereithalten!
- ▶ Anleitung gelesen, jetzt beginnen und abhaken
- ▶ Elektrode gespült und in Pufferlösung z.B. pH=7 getaucht
- ▶ pH-Wert 1 (Etikett) (bestätigen oder ändern) **z.B. 7**
- ▶ Warten bis Driftanzeige „stabil“, dann Puffer bestätigen
- ▶ Elektrode gespült und in 2. Pufferlösung z.B. pH=2 getaucht
- ▶ 2. pH-Wert (Etikett) (bestätigen oder ändern) **z.B. 2**
- ▶ Warten bis Driftanzeige „stabil“, dann Puffer bestätigen
- ▶ Abschließen der Kalibrierung mit **Akzeptieren**
- ▶ **Auf welche Weise möchten Sie messen: Auf Zeit**
- ▶ **Zeitintervall: 5 s, Gesamtzeit: 400 s, x-Komma 1**
- ▶ **Darstellung der Kanäle im Graphen: pH-Wert y-Untergrenze im Graphen 0 y-Obergrenze 14 y-Nachkomma 1 – Bestätigen mit Akzeptieren dann Weiter**



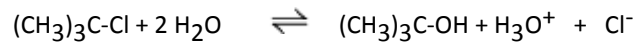
Durchführung

- ▶ pH-Elektrode am Stativ befestigen. Der Rührfisch darf beim Drehen die Elektrode nicht berühren.
- ▶ Mit Hilfe der 1 mL Pipette 0,8 mL t-Butylchloridlösung in das Becherglas pipettieren
- ▶ Gleichzeitig mit **Aufzeichnen** oder mit der 's'-Taste die Messwertspeicherung starten.
- ▶ Nach ca. 600 s den Versuch **Messung beenden** beenden.
- ▶ Projektnamen eingeben (hier: Beispiel) **Mein erstes Projekt** und **Akzeptieren**



### Berechnung der Konzentration an tert. Butylchlorid

Bei der Hydrolyse von tert. Butylchlorid entstehen tert. Butylalkohol und Salzsäure bzw. Oxoniumionen; d.h. der pH-Wert sinkt.



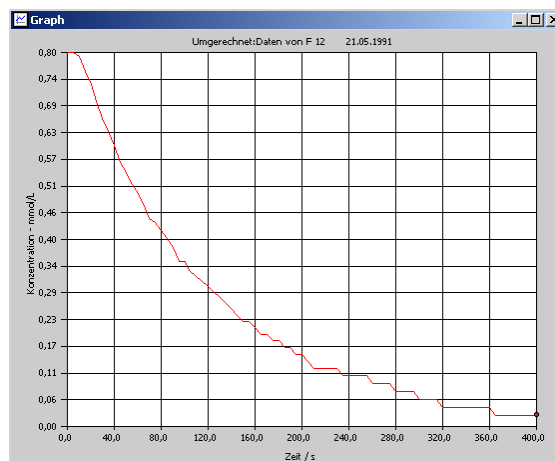
Aus dem pH-Wert (den frei werdenden  $\text{H}_3\text{O}^+$ -Ionen) lässt sich die Konzentration des tert.-Butylchlorids (BC) berechnen, da für jedes reagierende Butylchloridmolekül ein Oxoniumion entsteht. Die Oxoniumionen aus dem Wasser können dabei vernachlässigt werden.

$$c(\text{BC}) = (n_A(\text{BC}) \cdot V - n_H \cdot V) / V = c_A(\text{BC}) - 10^{-\text{pH}}$$

Die Anfangskonzentration an t-Butylchlorid:  $c = c(\text{BC}) \cdot V(\text{BC}) / V = 0.1 \text{ mol/L} \cdot 0.0008 \text{ L} / 0.1 \text{ L} = 0.0008 \text{ mol/L}$   
Zur besseren Darstellbarkeit wird in mmol/L umgerechnet (die Werte werden mit 1000 multipliziert).

- ▶ Hauptmenü: **AK Analytik 11** Start Messung Favoriten **Auswerten** Hinzufügen **Daten umrechnen**
- ▶ **Umrechnen mit einzugebender Funktion** **Eigene Funktion eingeben**
- ▶ **0,8-((10^(-YA))\*1000** ? **OK** **Klick auf das Farbpalettensymbol**
- ▶ y- Obergrenze: **0,8** y-Messgröße: **Konzentration** Einheit: **mmol/L** y- Nachkomma: **3**
- ▶ **Akzeptieren** **Neue Datenreihe** **In aktuellen Graphen einzeichnen** **Akzeptieren**
- ▶ **Projekt** **Speichern unter** Projektname (hier: Beispiel) **Hydrolyse** und **Akzeptieren**

Das ist die Ausgangsdatenreihe für die Auswertungen.





Vorschläge zur Bestimmung der Reaktionsordnung: Automatik für Kinetik

Die Geschwindigkeitsgleichung für eine Reaktion erster Ordnung lautet:

$$v = - \frac{dc}{dt} = k_1 \cdot c^1$$

Durch Integration der Gleichung erhält man eine e - Funktion:

$$c_t = c_0 \cdot e^{-k_1 \cdot t}$$

Setzt man für  $c_t$  den Wert  $c_0/2$  ein, so erhält man

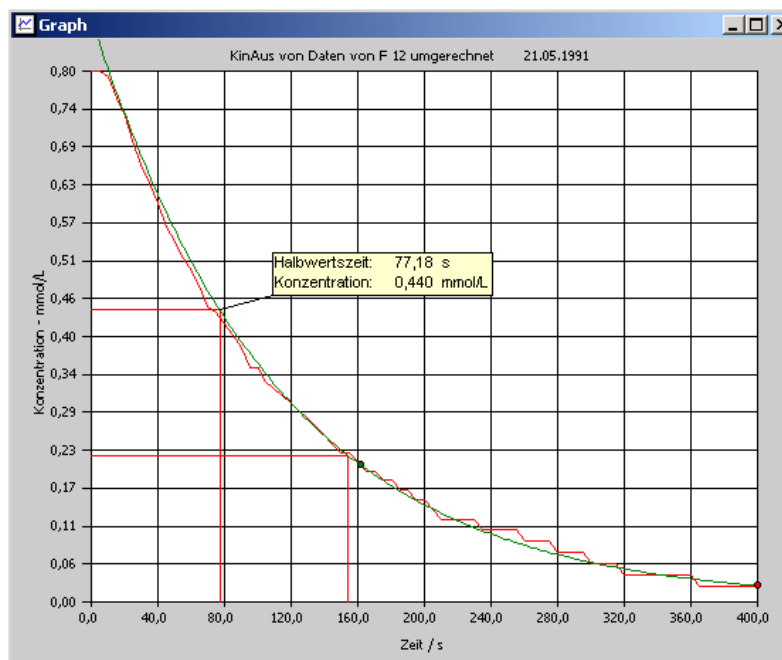
$$\frac{c_0}{2} = c_0 \cdot e^{-k_1 \cdot t_{1/2}}$$

durch Umformen und Logarithmieren:

$$\ln(2) = t_{1/2} \cdot k_1 \quad \Rightarrow \quad k_1 = \frac{\ln 2}{t_{1/2}}$$

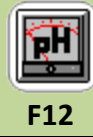
Auswertung

- ▶ Hauptmenü: **AK Analytik 11** Start Messung Favoriten **Auswerten** Hinzufügen **weitere Ausw**
- ▶ **Automatik für Kinetik** **OK**
- ▶ Der Rechner gibt die Summe der Fehlerquadrate an. Der kleinste Wert ist hier bei 2. Ordnung
- ▶ **Zeichnen** und **Beschriften** (evtl. Position ändern) und **Fertig**
- ▶ **Neue Datenreihe** **In aktuellen Graphen einzeichnen** **Akzeptieren**



Test: Man setzt die Halbwertszeit ( $t=87,8$  s) als neuen Startpunkt, dann muss beim doppelten Wert ( $t=175,6$  s) die Hälfte der Hälfte reagiert haben, d.h. der Punkt für  $c/4$  muss auf dem Graphen liegen.  
Geschwindigkeitskonstante aus der Halbwertszeit:

$$k_1 = \ln(2) / t_{1/2} = 0.6931 / 77,18 \text{ s} = 0.00898 \text{ s}^{-1}$$



Auswertung nach Reaktion 1. Ordnung

Durch Integration der Geschwindigkeitsgleichung für die Reaktion erster Ordnung (vorige Seite) erhält man

$$c_t = c_0 \cdot e^{-k_1 \cdot t}$$

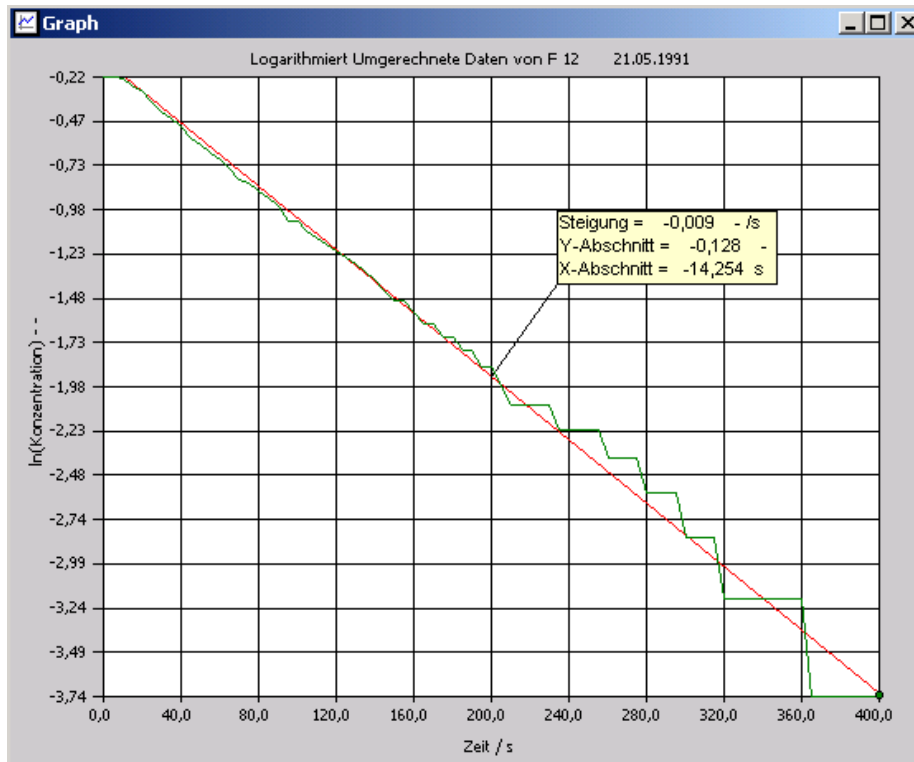
das bedeutet, bei Reaktionen erster Ordnung nimmt die Konzentration des Edukts exponentiell mit der Zeit ab. Logarithmiert man die Gleichung (6), so erhält man:

$$\ln c_t = \ln c_0 - k_1 \cdot t$$

Trägt man  $\ln c$  gegen  $t$  auf, so muss sich eine Gerade ergeben:

**Ausgangsdatenreihe ist die Datenreihe mit der Konzentration – sie muss geladen und gewählt sein sein.**

- ▶ Hauptmenü: AK Analytik 11 Start Messung Favoriten Auswerten Hinzufügen Daten umrechnen
- ▶ Umrechnen mit einzugebender Funktion Kinetik: Logarithmieren der y-Werte OK
- ▶ Neue Datenreihe In neuen Graphen einzeichnen Akzeptieren
- ▶ Zeichnen und Beschriften (evtl. Position ändern) und Fertig



Die Geschwindigkeitskonstante entspricht der Steigung:  $k_1 = m = 0.009 \text{ s}^{-1}$ .  
Der Korrelationskoeffizienten (-0.996) ist auch relativ (?) gut.



**Auswertung nach Reaktion 2. Ordnung:**

Die Geschwindigkeitsgleichung für eine Reaktion erster Ordnung lautet:

$$v = - \frac{dc}{dt} = k_2 \cdot c^2$$

Durch Integration der Gleichung erhält man

$$\frac{c_0}{c_t} = k_2 \cdot c_0 \cdot t + 1$$

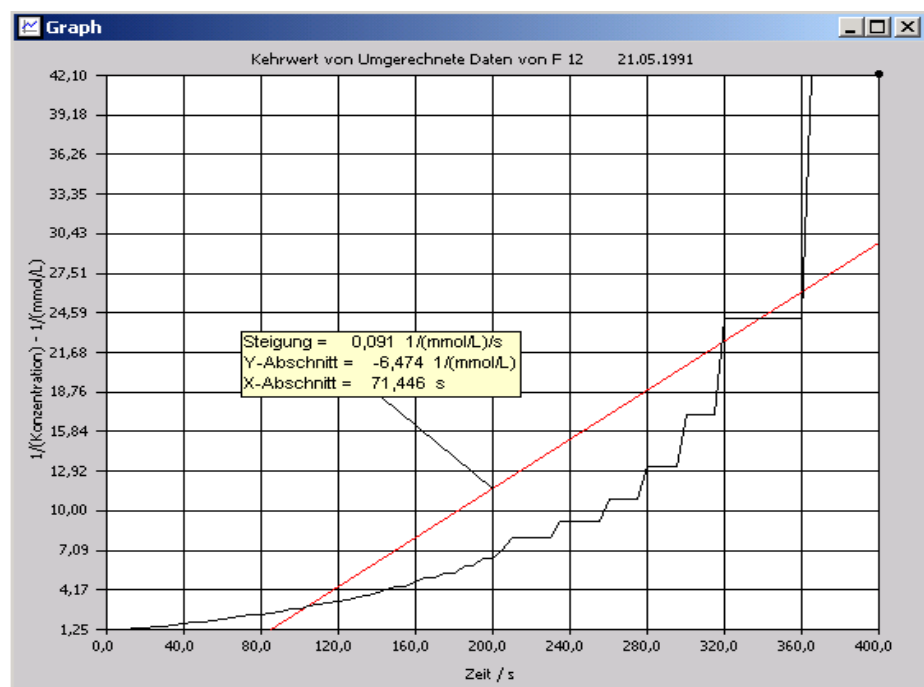
Formt man die Gleichung um, so erhält man:

$$\frac{1}{c_t} = k_2 \cdot t + \frac{1}{c_0}$$

Trägt man 1/c (y-Achse) gegen t (x-Achse) auf, müsste es bei Vorliegen zweiter Ordnung eine Gerade ergeben. Man zeichnet eine Ausgleichsgerade und ermittelt die Steigung dieser Geraden.

**Ausgangsdatenreihe ist die Datenreihe mit der Konzentration – sie muss gewählt sein.)**

- ▶ Hauptmenü: **AK Analytik 11** Start Messung Favoriten **Auswerten** Hinzufügen **Daten umrechnen**
- ▶ **Umrechnen mit einzugebender Funktion** **Kinetik: Kehrwert der y-Werte** **OK**
- ▶ **Neue Datenreihe** **In neuen Graphen einzeichnen** **Akzeptieren**
- ▶ **Zeichnen** und **Beschriften** (evtl. Position ändern) und **Fertig**



Es liegt offensichtlich keine Reaktion zweiter Ordnung vor.

**Tip**

Die Reaktionsführung ist für eine exakte kinetische Auswertung recht schwierig. Bessere Ergebnisse erhält man aus den Leitfähigkeitsmessungen (Arbeitsblatt D19)

**Beachten:**



**Entsorgung**

Organische Abfälle

**Literatur**

???