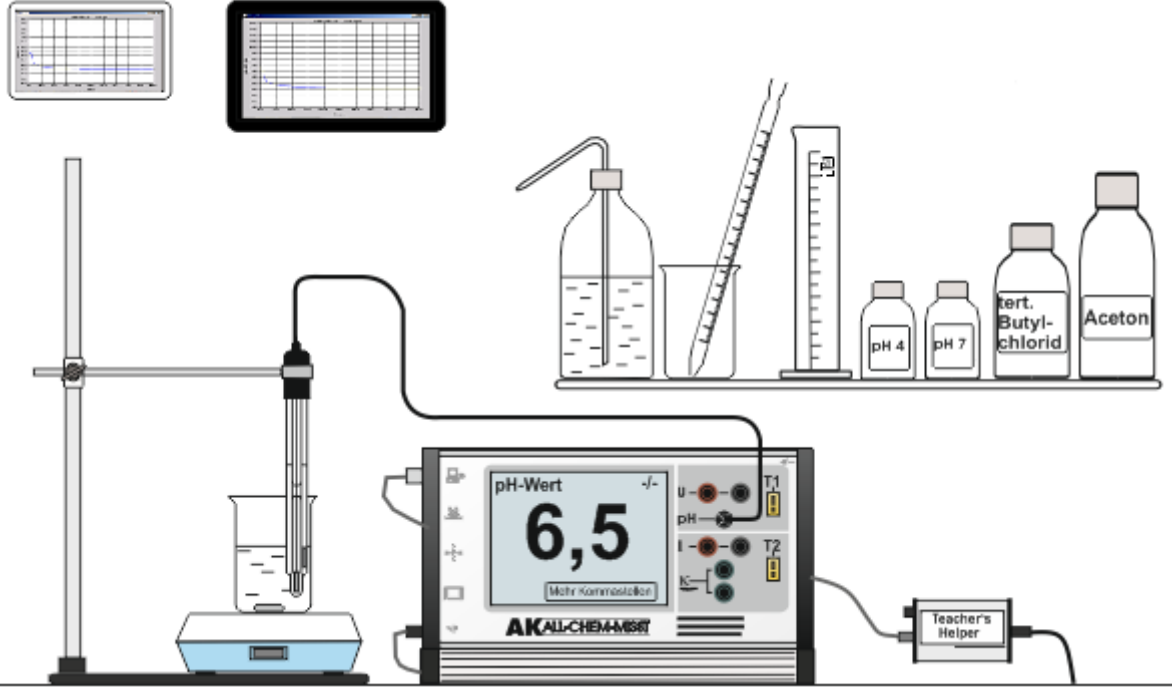


Prinzip

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

- ALL-CHEM-MISST II / Junior
- USB-Kabel / Netzteil
- Teacher's Helper / Netzteil
- Tablet, Laptop oder Smartphone
- pH-Elektrode mit BNC
- Spülbecherglas, 250 mL
- Messpipette, 1 mL
- Becherglas, 150 mL
- Stativ
- Muffe
- Greifklemme, klein
- Magnetrührer
- Rührmagnet
- evtl. pneumatische Wanne
- Messpipette, 10 mL
- Messzylinder, 100 mL

Verwendete Chemikalien

- tert. Butylchlorid, $c = 0.1 \text{ mol/L}$ in Aceton
- 1,1 mL 2-Chlor-2-methylpropan in 100 mL Lösung (Aceton)
- Aceton
- Wasser
- evtl. Pufferlösung $\text{pH} = 7$ bzw. $\text{pH} = 2$

Vorbereitung des Versuchs

- ▶ **Geräte** entsprechend der Zeichnung aufbauen.
- ▶ **90 mL destilliertes Wasser** mit **Messzylinder** und **10 mL Aceton** (als Lösungsvermittler) mit **Pipette** in **Becherglas** geben.
- ▶ **Rührfisch** dazugeben und das **Becherglas** auf **Magnetrührer** stellen.
- ▶ **pH-Elektrode** in halb mit **Leitungswasser** gefülltes **Spülbecherglas** stellen.
- ▶ **pH-Elektrode** in die entsprechende pH-Buchse stecken.

Vorbereitung an den Tablets /Laptops (Clients)

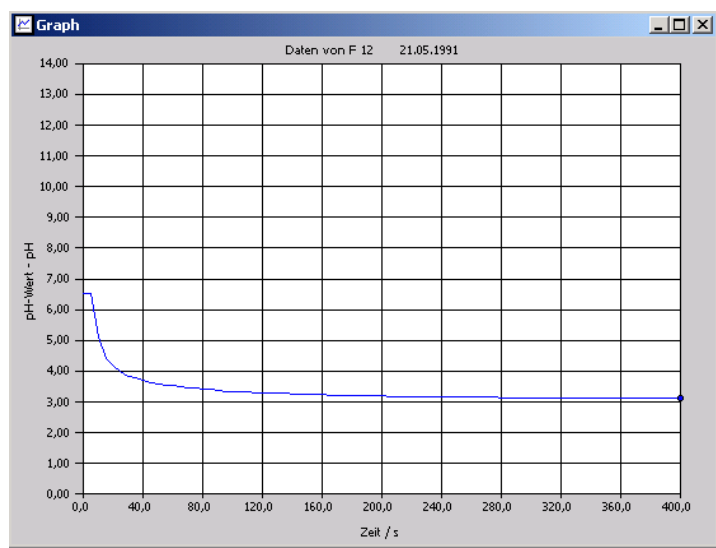
- ▶ Am Tablet / Laptop / Smartphone Einstellungen oder mit **WLAN** eine Verbindung herstellen: **ak.net** anwählen und warten bis die Verbindung eingebucht ist.
- ▶ Browser z.B. **Firefox/Safari** aufrufen, in die Adresszeile (URL-Zeile) - nicht in der (Google-Suchzeile!!) **http://labor.ak** eingeben. Es erscheinen 4 Bildschirme ...
- ▶ **AK MiniAnalytik** wählen. Im erschein Bild können die Menüicons neben- oder (bei kleinen Bildschirmen) untereinander angeordnet sein.
- ▶ Icon 'Messen' (2. Von links) und **Mit Messgerät verbinden** auswählen
- ▶ **Messgrößen-Auswahl:** **pH-Wert (pH)**
- ▶ **Konfiguration-Methode** **y-Achse** **pH Min** **0,0 pH** und **Max** **14,0 pH**
Nachkomma **1** und **Linie** **ja**



- ▶ x-Achse: Zeit
 - ▶ x-Achse Zeit Intervall s und Max s
 - ▶ Nachkomma und
 - ▶ antippen und bei 2-Punkt-Kalibrierung
 - ▶ Oben rechts steht der aktuelle pH- Wert. Man soll zwei unterschiedliche Pufferlösungen bereithalten.
 - ▶ Elektrode spülen, -> in **Puffer 1**, pH-Wert z.B. eingeben, nach Messwertberuhigung
 - ▶ Elektrode spülen, -> in **Puffer 2**, pH-Wert, z.B. eingeben, nach Messwertberuhigung
 - ▶ Umrechnung starten mit und Erfolg bestätigen mit
- Mit wird der Messbildschirm aufgebaut und Werte werden angezeigt.

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
- ▶ Zur **Messwertaufnahme** bei 0,0 s drücken.
- ▶ Nach ca. 600 s den Versuch beenden.



Speichern

- ▶ Icon oben links und wählen
- ▶ Unter ‚Projekt Speichern‘ Projektnamen eingeben (hier: Beispiel) und

Excel-Export

- ▶ Icon oben links und wählen
- ▶ Unter ‚Datenreihen Speichern‘ Projekt auswählen und
- ▶ Je nach Gerät mit ‚Speichern unter‘ noch Pfad aussuchen und bestätigen

Öffnen bei Bedarf

- ▶ Ist der Teacher's Helper nicht mehr zu erreichen: Browser z.B. aufrufen, in die Adresszeile (URL-Zeile) - nicht in der (Google-Suchzeile!!) eingeben. -
- ▶ Icon oben links und "Projekt Laden" direkt auswählen und → anklicken

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.

$$(CH_3)_3C-Cl + 2 H_2O \rightleftharpoons (CH_3)_3C-OH + H_3O^+ + Cl^-$$

Aus dem pH-Wert (den frei werdenden H_3O^+ -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.

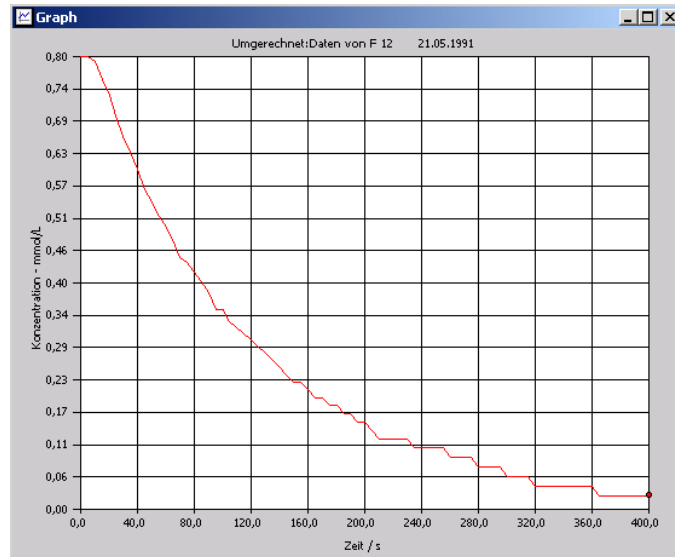
$$c(BC) = (n_A(BC) \cdot V - n_H \cdot V) / V = c_A(BC) - 10^{-pH}$$



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

- ▶ Icon 'Auswerten' (3. von links) und **y-Werte umrechnen** und **bel. Funktion**
- ▶ **$0,8 - ((10^{-YA}) * 1000)$** ? **OK**
- ▶ **Datenreihen** (links neben 'Wertetabelle') und dann auf Icon 'Menü' und **Eigenschaften**
- ▶ **y- Achse Messgröße:**
 Konzentration Einheit **mmol/L** Untergrenze: **0** Obergrenze: **0,8** **OK**
- ▶ Neue Datenreihe wird automatisch eingezeichnet
- ▶ Icon oben links und **Speichern unter** wählen
- ▶ Unter ‚Projekt Speichern‘ Projektnamen eingeben (hier: Beispiel) **Hydrolyse** und **OK**

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

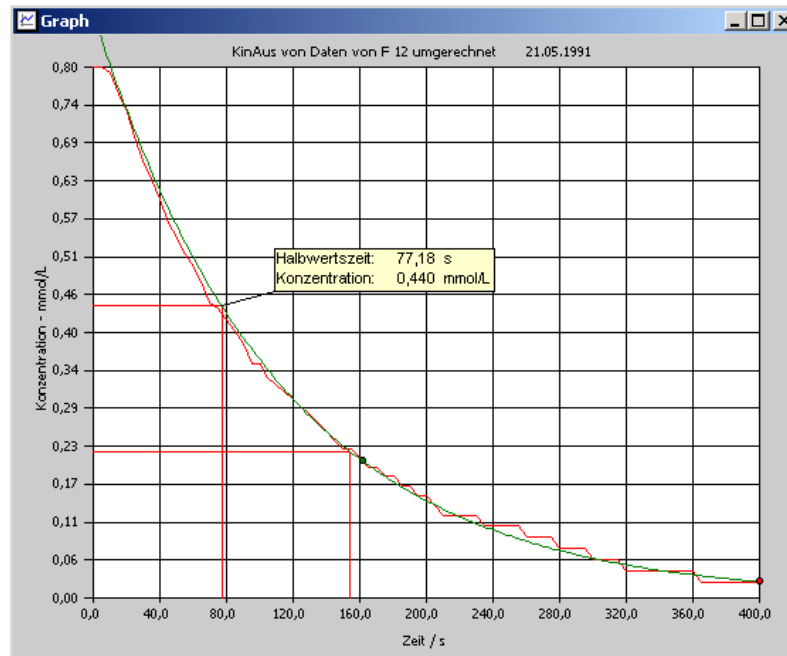
$$\frac{c_0}{2} = c_0 \cdot e^{-k_1 \cdot t_{1/2}}$$

durch Umformen und Logarithmieren:

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

Auswertung

- ▶ Icon 'Auswerten'  (3. von links) und **Automatik Kinetik**
- ▶ Der Rechner gibt die Summe der Fehlerquadrate an. Der kleinste Wert ist hier bei 2.Ordnung
- ▶ **Zeichnen** und (evtl. Position ändern) und **Fertig**
- ▶ Neue Datenreihe wird automatisch eingezeichnet



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

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

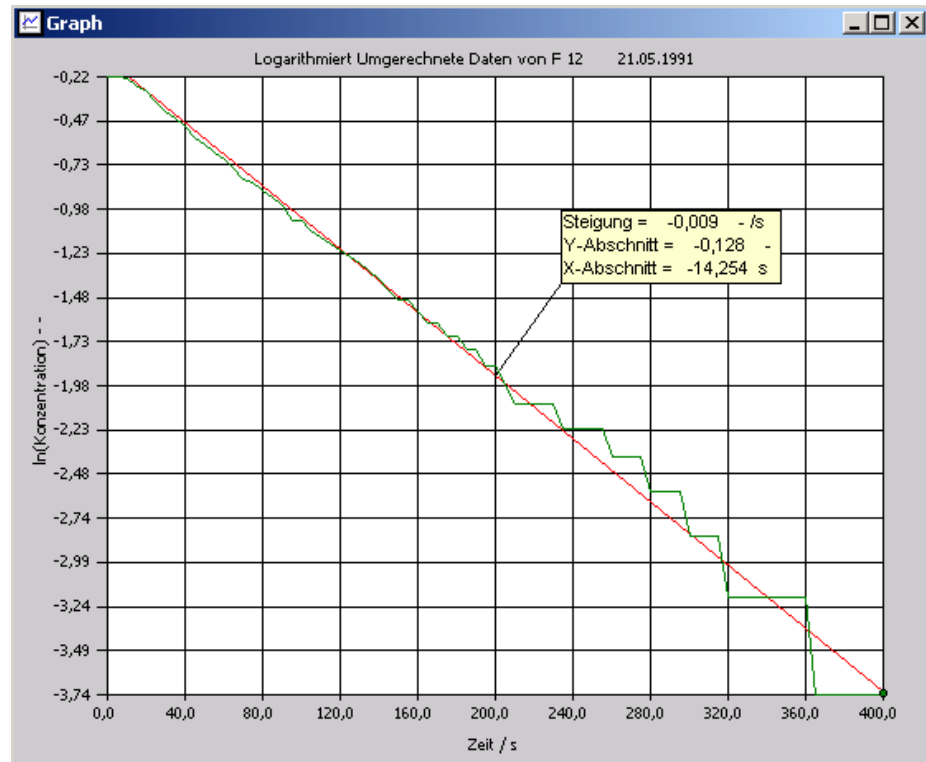
das bedeutet, bei Reaktionen erster Ordnung nimmt die Konzentration des Edukts exponentiell mit der Zeit ab. Logarithmiert man die Gleichung (6), so erhält man:

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

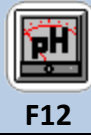
Trägt man $\ln c$ gegen t auf, so muss sich eine Gerade ergeben:

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

- ▶ Icon 'Auswerten' (3. von links) und **y-Werte umrechnen** und **Logarithmus** **OK**
- ▶ Neue Datenreihe wird automatisch eingezeichnet
- ▶ Wieder unter Icon 'Auswerten' (3. von links) und **Automatik Kinetik**
- ▶ **Zeichnen** und (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

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

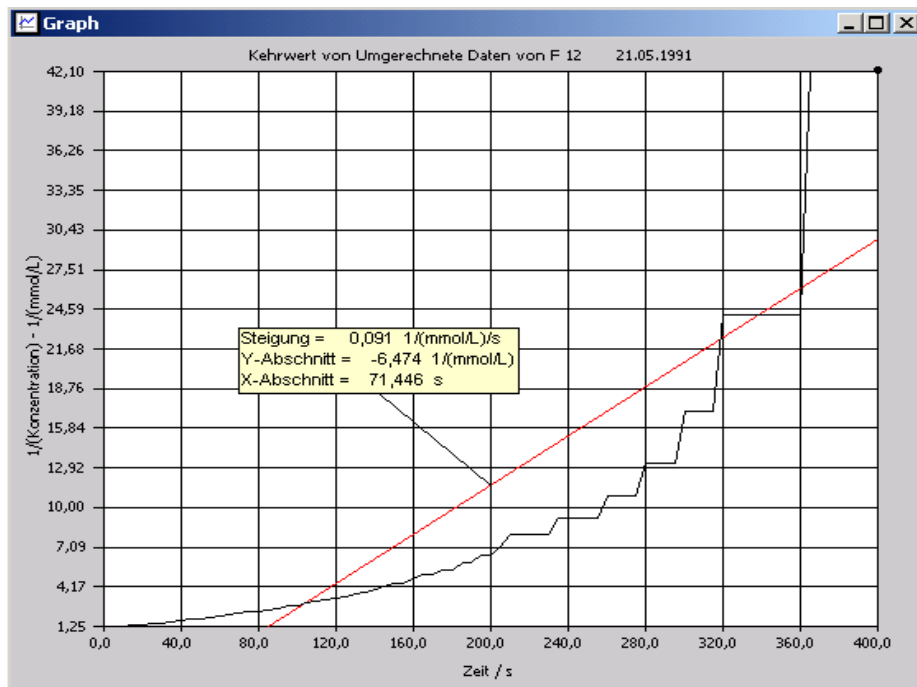
Formt man die Gleichung um, so erhält man:

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

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.

- ▶ Icon 'Auswerten' (3. von links) und **y-Werte umrechnen** und **Logarithmus** **OK**
- ▶ Neue Datenreihe wird automatisch eingezeichnet
- ▶ Wieder unter Icon 'Auswerten' (3. von links) und **Automatik Kinetik**
- ▶ **Zeichnen** und (evtl. Position ändern) und **Fertig**



Es liegt offensichtlich keine Reaktion zweiter Ordnung vor.

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

Beachten:

Entsorgung Organische Abfälle

Literatur ???