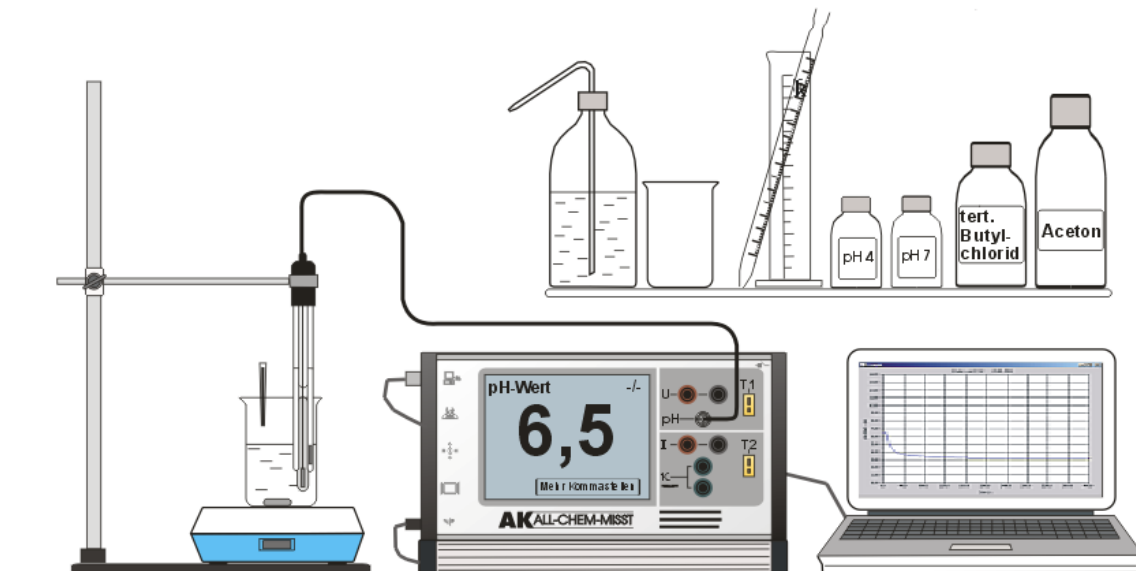


Prinzip: Die Hydrolyse von tert. Butylchlorid in wässriger Lösung kann mit Hilfe der pH-Wert-Messung verfolgt werden, da dabei Oxoniumionen entstehen. Der Versuch wird über einen Zeitraum vermessen und die Daten unter reaktionskinetischen Gesichtspunkten ausgewertet.

Versuchsaufbau:



Materialliste:

Geräte:		1 Stativ	Chemikalien:
1 ALL-CHEM-MISST II / Netzteil	1 Muffe	1 Greifklemme, klein	tert. Butylchlorid, c= 0.1 mol/L in Aceton)
1 Computer mit Kabel	1 Magnetrührer	1 Messpipette, 10 mL	1,1 mL 2-Chlor-2-methyl-propan in 100 mL Lösung (Aceton)
1 serielles oder USB-Kabel	1 Rührmagnet	1 Messzylinder, 100 mL	Aceton
1 pH-Elektrode mit BNC	evtl. pneumat. Wanne		Wasser
1 Becherglas, 150 mL			evtl. Pufferlösung pH = 7 bzw. 2
1 „Spülbecherglas“, 250 mL			
1 Messpipette, 1mL			

Vorbereitung des Versuches:

- Geräte entsprechend der Zeichnung bereitstellen und aufbauen.
- Mit Hilfe des Messzylinders 90 mL dest. Wasser und mit Hilfe der Pipette 10 mL Aceton (als Lösungsvermittler) in das Becherglas geben.
- Rührfisch dazugeben und Becherglas auf den Magnetrührer stellen.
- pH- Elektrode in das halb mit Leitungswasser gefüllte „Spülbecherglas“ stellen.
- Den Computer über das serielle oder USB-Kabel mit dem "ALL-CHEM-MISST II" verbinden.
- pH- Elektrode in die entsprechende pH-Buchse stecken.

Computerprogramm AK Analytik 32.NET (→ Schnellstarter → ALL-CHEM-MISST_II 1-Kanal)

Messgröße:	pH-Wert		
pH Kalibrieren	Ja	Anweisungen befolgen und entsprechende Werte eingeben.	
Für Grafik	0 - 14 pH	Bei Zeitintervall:	5 s
Messung über Zeit		Gesamtzeit (für Grafik) : 400 s	
		Direkt zur Messung	

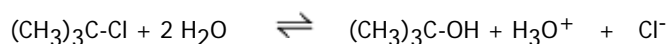
Durchführung des Versuches:

- Mit Hilfe der 1 mL Pipette 0,8 mL t-Butylchloridlösung in das Becherglas pipettieren und dabei die Messung mit Klick auf oder mit der Taste **S** starten.
- Die Messung ca. 1500 Sekunden mit Klick auf oder mit der Taste **Esc** beenden.



Auswertung des Versuches:

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 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.

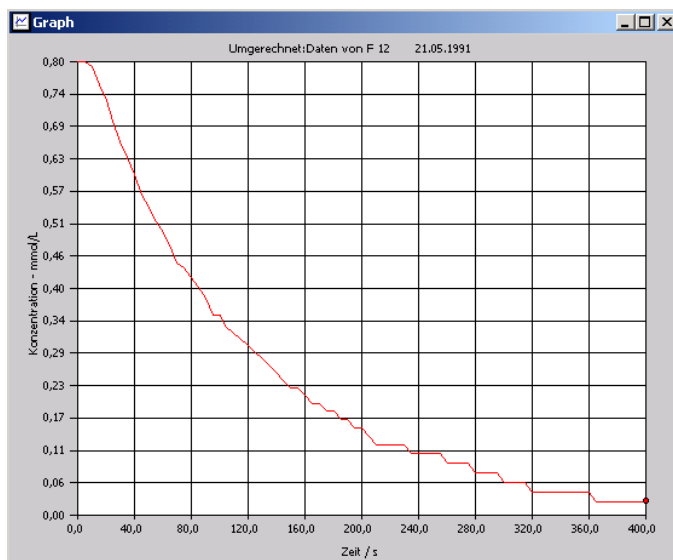
$$c(\text{BC}) = (n_{\text{A}}(\text{BC}) \cdot V - n_{\text{H}} \cdot V) / V = c_{\text{A}}(\text{BC}) - 10^{-\text{pH}}$$

Berechnung der Konzentration an tert. Butylchlorid

Abstände in der Gleichung

Die Anfangskonzentration an t-Butylchlorid beträgt $c = c(\text{BC}) \cdot V(\text{BC}) / V = 0,1 \cdot 0,0008 / 0,1 = 0,0008 \text{ mol/L}$
Zur besseren graphischen Darstellbarkeit wird in mmol/L umgerechnet (die Werte werden mit 1000 multipliziert).

Umrechnung aufrufen mit oder im Hauptmenü: ⇒ Rechnen ⇒ „Umrechnen mit einzugebender Funktion“				
Bei: <u>Eigene Funktion</u> den Term eingeben oder einfach <u>Beispiel verwenden</u> : $Y = 0,8 - ((10^{(-YA)}) * 1000)$				
<input checked="" type="checkbox"/> OK	Was wollen Sie mit der soeben erzeugten Datenreihe tun? <u>Weitere Formatierungen</u>			Skalierung
y-Achse	Obergrenze: <u>0,8</u>	Messgröße: Konzentration	Einheit: mmol/L	Nachkommastellen: 3
<input checked="" type="checkbox"/> OK	Als neue Datenreihe anlegen <input type="checkbox"/> Ja in einen neuen Graphen einzeichnen			<input checked="" type="checkbox"/> OK



Vorschläge zur Bestimmung der Reaktionsordnung:

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:

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

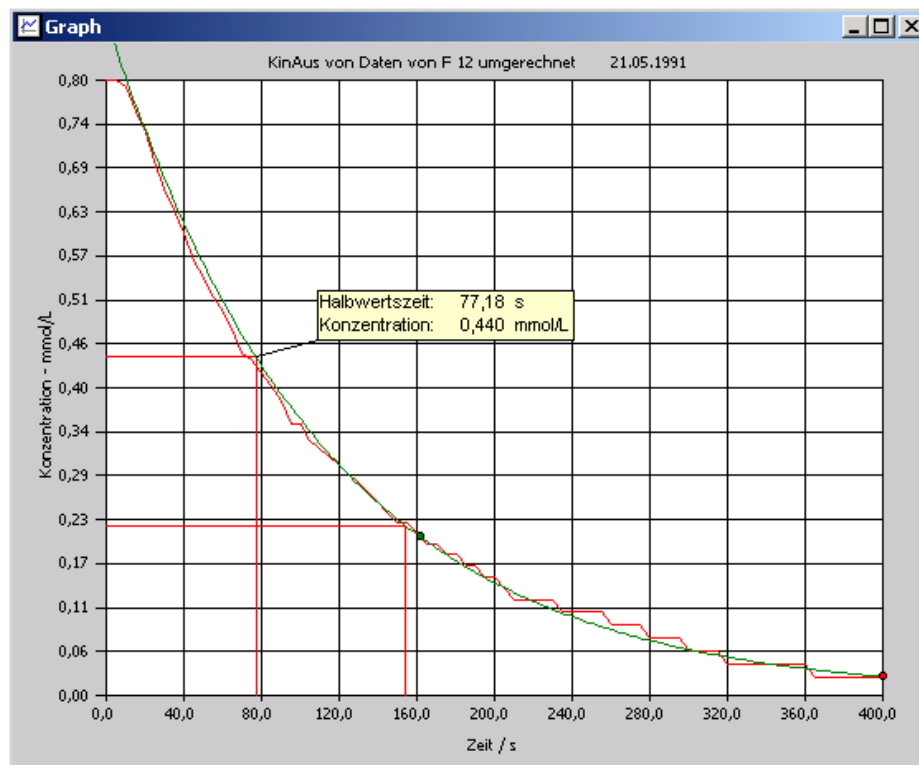
Setzt man für c_t den Wert $c_0/2$ ein, so erhält man

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

durch Umformen und Logarithmieren:

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

Im Hauptmenü: ⇒ Auswerten ⇒ „Automatik für Kinetik“		Bestätigen mit <input checked="" type="checkbox"/> OK	
Der Rechner gibt die Summe der Fehlerquadrate an. Der kleinste Wert ist hier bei 1.Ordnung			
Einzeichnen der Funktion: <input checked="" type="checkbox"/> Zeichnen	Eintragen der Halbwertszeit: <input checked="" type="checkbox"/> Beschriften	Ende: <input checked="" type="checkbox"/> Fertig	
Als neue Datenreihe anlegen	Ja, in den selben Graphen einzeichnen	<input checked="" type="checkbox"/> OK	



Test: Man setzt die Halbwertszeit ($t=77,8$ s) als neuen Startpunkt, dann muss beim doppelten Wert ($t=155,6$ s) die Hälfte der Hälfte reagiert haben, d.h. der Punkt für $c/4$ muß auf dem Graphen liegen.

Geschwindigkeitskonstante aus der Halbwertszeit:

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

Weitere Vorschläge:

Auswertung nach Reaktion 1. Ordnung




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

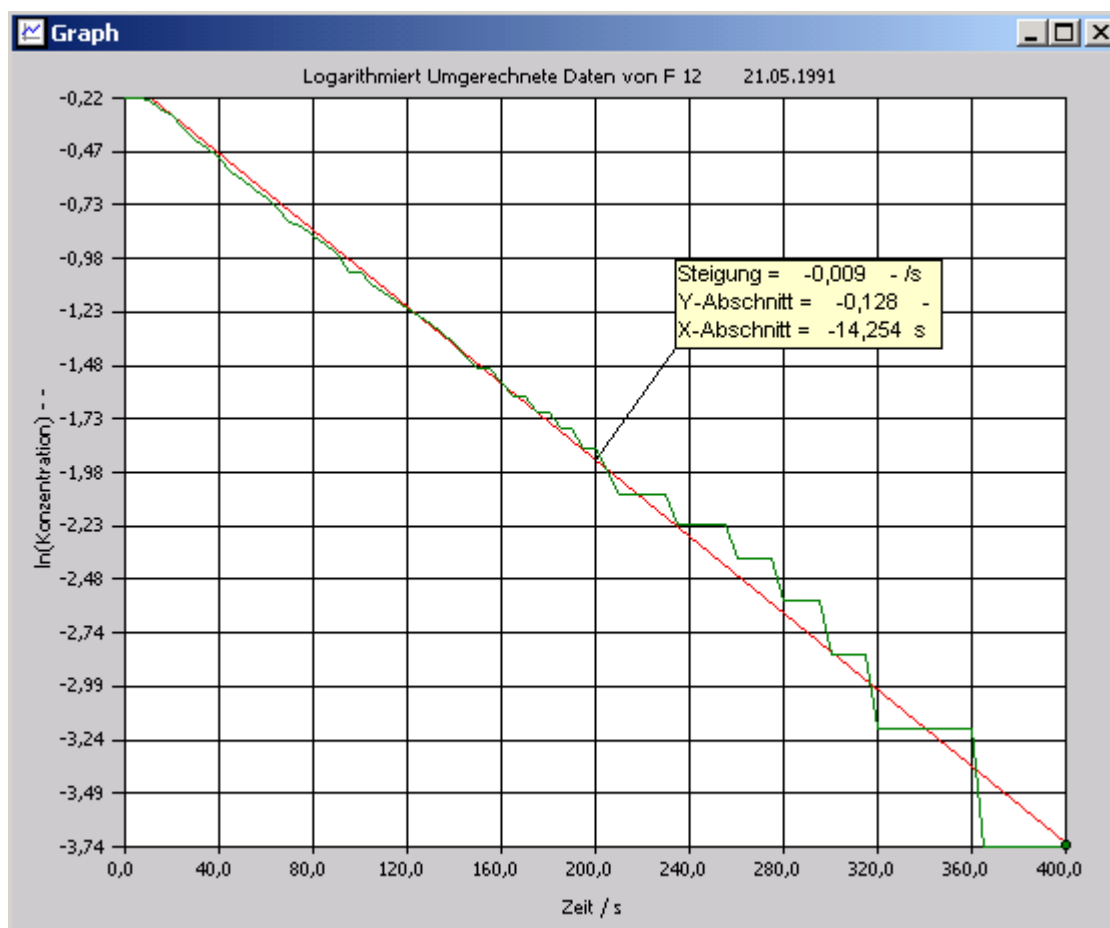
$$c_t = c_0 \cdot e^{-k_1 \cdot t}$$

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:

Umrechnung aufrufen mit  oder im Hauptmenü: ⇒ Rechnen ⇒ „Umrechnen mit einzugebender Funktion“
Bei: Was wollen Sie tun? „Kinetik: Logarithmieren (ln(Y))“ <input checked="" type="checkbox"/> OK Weiter: <input checked="" type="checkbox"/> OK
Einzeichnen der Ausgleichsgeraden:  Zeichnen Eintragen der Werte:  Beschriften Ende: <input checked="" type="checkbox"/> 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

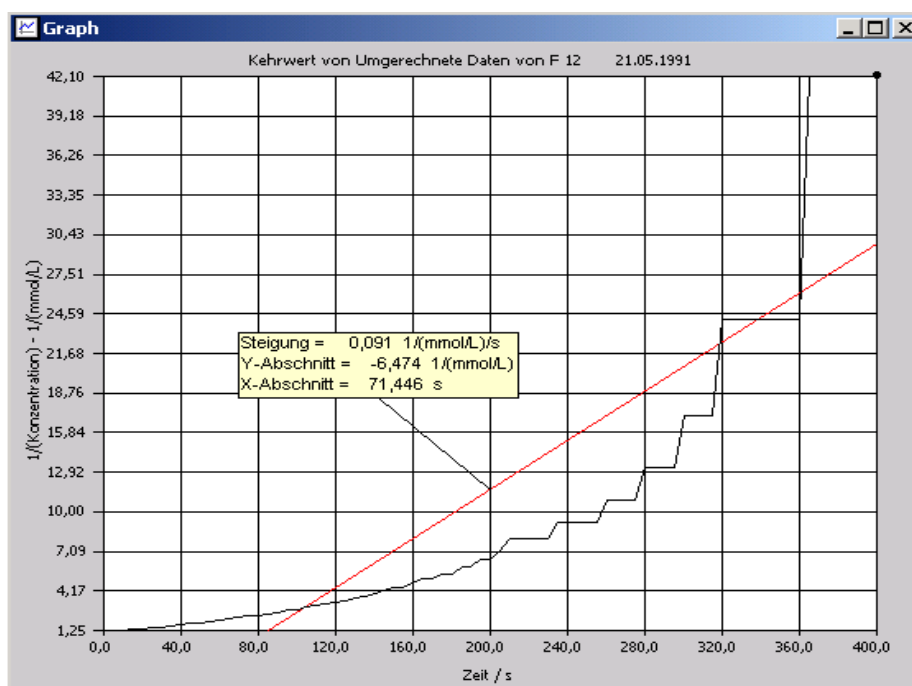
$$\frac{c_0}{c_t} = k_2 \cdot c_0 \cdot t + 1$$

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.

Umrechnung aufrufen mit  oder im Hauptmenü: \Rightarrow Rechnen \Rightarrow „Umrechnen mit einzugebender Funktion“
Was wollen Sie tun? „Kinetik: Kehrwert der Y-Werte“  OK und:  OK
Einzeichnen der Ausgleichsgeraden:  Zeichnen Eintragen der Werte:  Beschriften Ende:  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)

Entsorgung:**Literatur:**