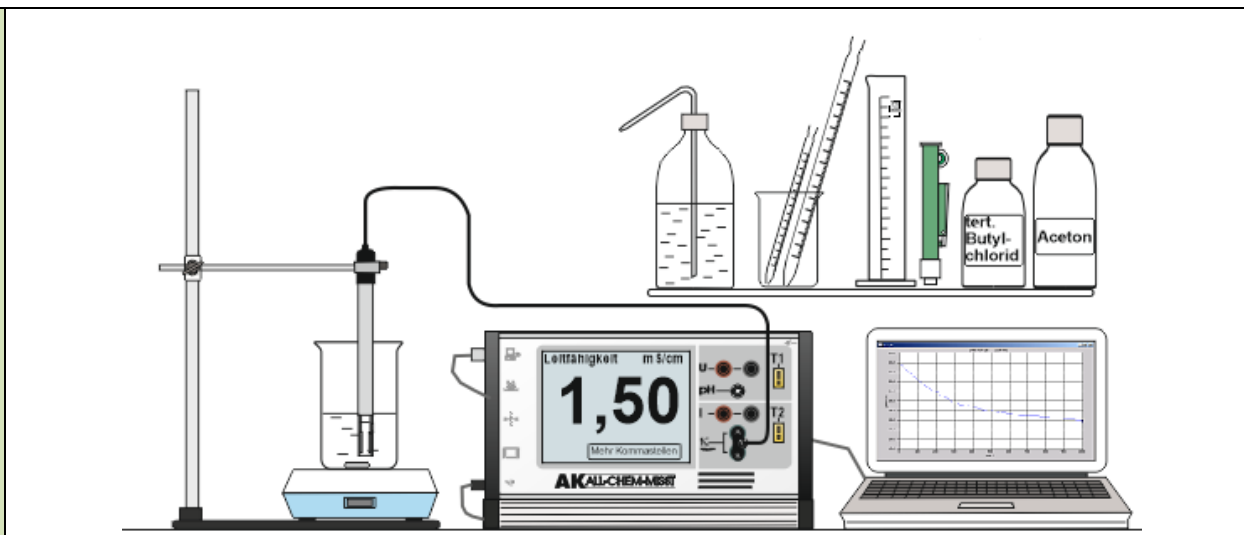




## Prinzip

Die Hydrolyse von tert. Butylchlorid in wässriger Lösung kann mit Hilfe der Leitfähigkeitsmessung verfolgt werden, da dabei Oxonium- und Chloridionen entstehen. Der Versuch wird über einen gewissen Zeitraum verfolgt und die Daten unter reaktionskinetischen Gesichtspunkten ausgewertet.



## Aufbau und Vorbe- reitung

### Benötigte Geräte

- ALL-CHEM-MISSTII o. ACM Junior
- Netzteil / USB-Anschlusskabel
- Computer
- LF-Elektrode
- Becherglas, 150 mL
- Spülbecherglas, 250mL
- Messpipette, 5 mL
- Messpipette, 1 mL
- Pipettierhilfe

- Messzylinder, 100 mL
- Stativ
- Muffe
- Elektrodenklemme
- Magnetrührer
- Rührfisch
- evtl. pneumatische Wanne

### Verwendete Chemikalien

- tert. Butylchlorid, (c = 0,1 mol/L in Aceton)
- 2-Chlor-2-methylpropan = 1,1 mL
- zu 100 mL Lösung (mit Aceton)
- Aceton
- Dest. Wasser

### Vorbereitung des Versuchs

- ▶ Die Geräte entsprechend der Zeichnung bereitstellen. Will man einen Einfluss der Temperatur ausschließen, kann man eine große pneumatische Wanne mit entsprechend temperiertem Wasser auf den Magnetrührer stellen.
- ▶ Die Bananenstecker der LF- Elektrode in die entsprechenden LF-Buchsen stecken.
- ▶ Mit Hilfe des Messzylinders 90 mL dest. Wasser und mit Hilfe der Pipette 10 mL Aceton (als Lösungsvermittler) in das Becherglas füllen, den Rührmagneten zugeben und das Becherglas auf den Magnetrührer stellen.

### Vorbereitung am Computer

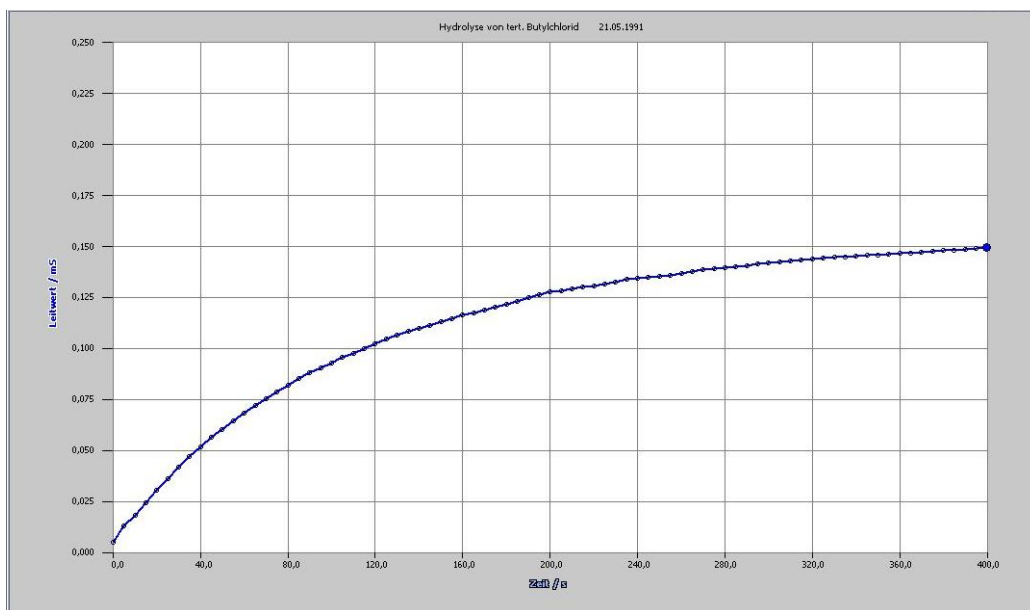
- ▶ **AK Analytik 11** starten; **Messen** mit **Geräte-Schnellstarter App** **ALL-CHEM-MISST II**
- ▶ Anweisungen befolgen und 'abhaken' **Weiter**
- ▶ Auswahl des Messkanals: (Buchse im Bild oben) **k(LF)** **Weiter**
- ▶ **Auf welche Weise möchten Sie messen:** **Auf Zeit**
- Zeitintervall: **5** s, Gesamtzeit (Grafik): **400** s, x-Komma **0**
- Darstellung der Kanäle im Graphen: **Leitfähigkeit** y-Untergrenze im Graphen **0,00** mS/cm
- y-Obergrenze **0,25** mS/cm y-Nachkomma **2** – Bestätigen mit **Akzeptieren**
- dann **Weiter**



- ▶ Mit Hilfe der 1 mL Pipette 0,8 mL t-Butylchlorid - Lösung in das Becherglas pipettieren
- ▶ Gleichzeitig mit **Aufzeichnen** oder mit der 's'-Taste die Messwertspeicherung starten.
- ▶ Nach ca. 400 s den Versuch **Messung beenden** beenden.
- ▶ Projektnamen eingeben (hier: Beispiel) **Mein erstes Projekt** und **Akzeptieren**

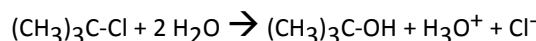
**Achtung:** Man lässt die Probe noch etwa 30 Minuten lang stehen oder erwärmt sie vorsichtig auf etwa 40 - 50 °C und lässt sie dann auf die Ausgangstemperatur wieder abkühlen. Messen Sie dann erneut die Leitfähigkeit und notieren Sie diesen: Für die Rechnung benötigen Sie auch die Leitfähigkeit beim Start (evtl. aus der Tabelle)

Leitfähigkeit für  $t = \infty$  :  $\kappa_{\infty}$  : mS/cm



Durchführung

Bei der Hydrolyse von tert. Butylchlorid entstehen tert. Butylalkohol und Salzsäure bzw. Oxoniumionen; d.h. die Leitfähigkeit steigt.



Aus der Leitfähigkeitszunahme, die auf die frei werdenden  $\text{H}_3\text{O}^+$ - und  $\text{Cl}^-$  Ionen zurückzuführen ist, lässt sich die jeweilige Konzentration des tert. Butylchlorids (BC) nach folgender Gleichung berechnen

$$c(\text{BC}) = \frac{\kappa_{\infty} - \kappa}{\kappa_{\infty} - \kappa_0} \cdot c(\text{BC}_{\text{Start}})$$

**Berechnung der Konzentration an tert. Butylchlorid:**

Beispielwerte:  $\kappa_0 = 0,005 \text{ mS/cm}$ ,  $\kappa_{\infty} = 0,155 \text{ mS/cm}$ ,  $c(\text{BC}_{\text{Start}}) = 0,8 \text{ mol/L}$

Auswertung

- ▶ Hauptmenü: **AK Analytik 11** Start Messung Favoriten **Auswerten** Hinzufügen **Daten umrechnen**
- ▶ **Umrechnen mit einzugebender Funktion** **Eigene Funktion eingeben**
- ▶ **Klicken um Beispiel zu laden**  $((,155-\text{YA})/(.155-0.005))*0.8$  ? **OK**
- ▶ **Klick auf das Farbpalettensymbol**
- ▶ y- Obergrenze: **1** y-Messgröße: **Konzentration** Einheit **mol/L** y- Nachkomma: **3**
- ▶ **Akzeptieren** **Neue Datenreihe** **In aktuellen Graphen einzeichnen** **Akzeptieren**
- ▶ **Projekt** **Speichern unter**
- ▶ Projektnamen eingeben (hier: Beispiel) **Marmor-Salzsäure** und **Akzeptieren**

**Das ist die Ausgangsdatenreihe für die Auswertungen.**

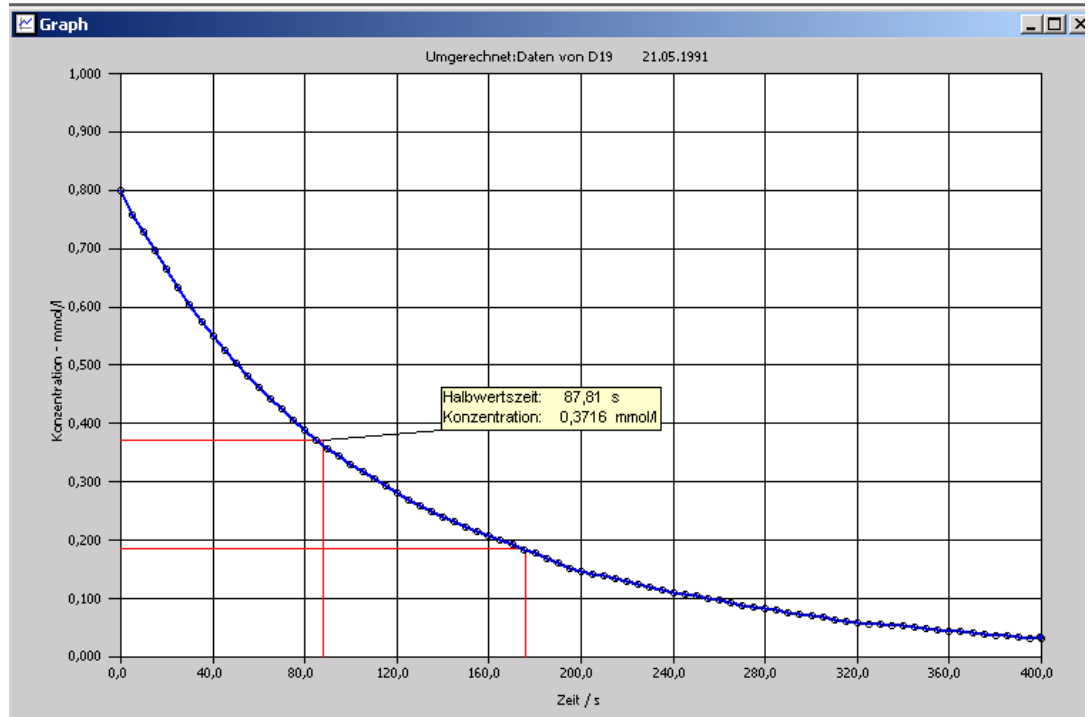


Vorschläge zur Bestimmung der Reaktionsordnung (Automatik für Kinetik):

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

- ▶ 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 1.Ordnung
- ▶ **Zeichnen** und **Beschriften** (evtl. Position ändern) und **Fertig**
- ▶ **Neue Datenreihe** In aktuellen Graphen einzeichnen **Akzeptieren**

Auswertung



Sie erhalten als Zusatzinformation Angabe der Summe der Fehlerquadrate für die einzelnen Ordnungen. Dieser Wert muss möglichst klein sein. (Hier 1.Ordnung )

Test

Test: Beim doppelten Wert (hier:  $2 \times 87,8 \text{ s} = 175,6 \text{ s}$ ) muss die Hälfte der Hälfte reagiert haben, d.h. der Punkt für  $c/4$  muss auf dem Graphen liegen.

Geschwindigkeitskonstante aus der Halbwertszeit:  $k_1 = \ln(2) / t_{1/2} = 0,6931/87,81 \text{ s} = 0,00789 \text{ s}^{-1}$



### Auswertung nach Reaktion 1. Ordnung

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

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

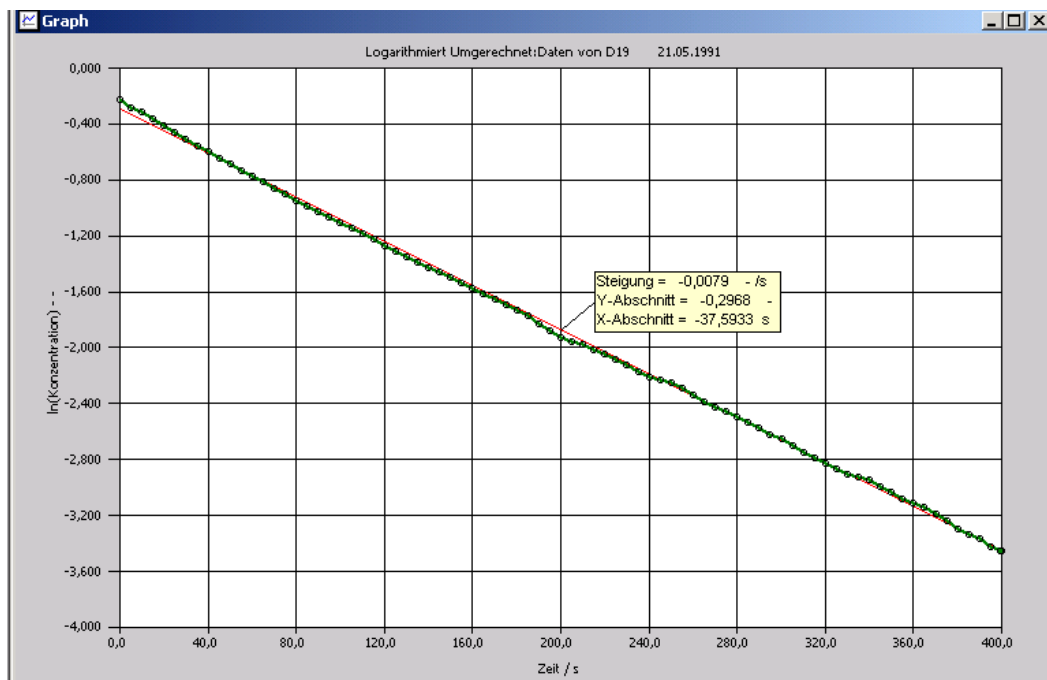
Das bedeutet, bei Reaktionen erster Ordnung nimmt die Konzentration des Edukts exponentiell mit der Zeit ab. Logarithmiert man die Gleichung, so erhält man.:

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

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

**Ausgangsdatereihe ist die Datenreihe mit der Konzentration – sie muss geladen und gewählt 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:  $k_1 = m = 0.0079 \text{ s}^{-1}$ .

Sie können den recht guten Korrelationskoeffizienten (-0.9997) notieren.

Alter-  
native



### Auswertung nach Reaktion 2. Ordnung

Die Geschwindigkeitsgleichung für eine Reaktion zweiter Ordnung lautet:

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

Durch Integration der Gleichung erhält man

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

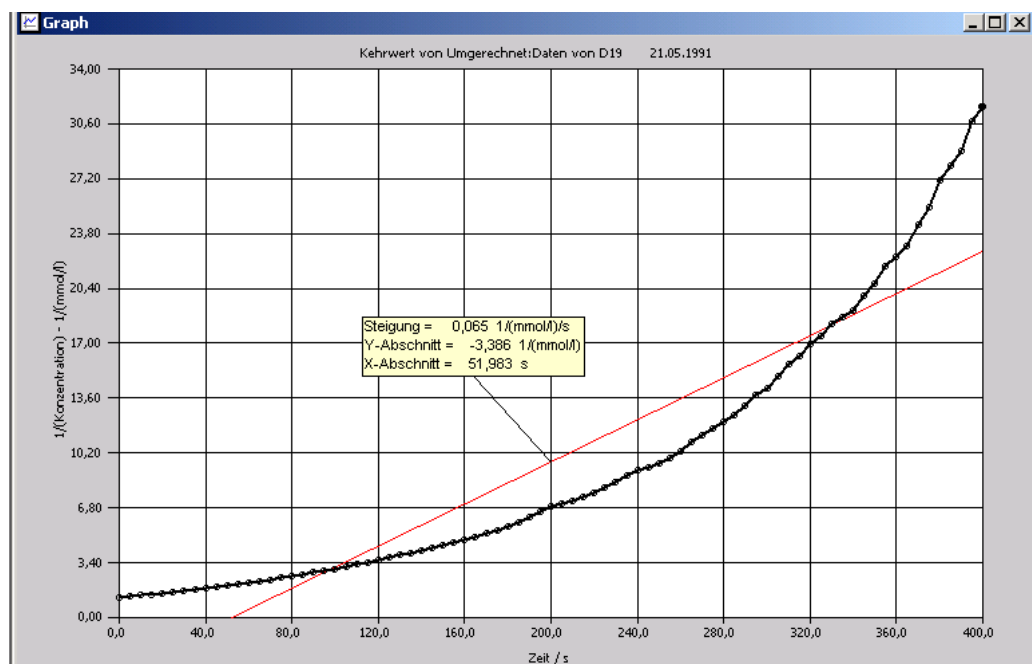
Formt man die Gleichung um, so erhält man:

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

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

**Ausgangsdatereihe 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**



Man kann am Korrelationskoeffizienten (0.931) sehen, dass eine Reaktion zweiter Ordnung ausscheidet.

Beachten:



Entsorgung

Organische Halogenierte Abfälle

Literatur

F. Kappenberg; Computer im Chemieunterricht 1988, S. 144 Verlag Dr. Flad, Stuttgart