

Versuch Nr. 3

Verteilungsquotient

Praktikum der physikalischen Chemie der Universität Würzburg
unter der Leitung von Dr. Roland Colditz im Zeitraum 01.03-21.03.10

Würzburg den 08.03.10

Gruppe: E4

Matknr.: Michael Brunk

Yannick Giernat

Simon Knieps

Assistent:

Jörg Herterich

Lukas Pason

Aufgabenstellung:

1. Bestimmen Sie den Verteilungsquotient von Jod zwischen Wasser und Toluol.
2. Bestimmen Sie den Verteilungsquotient von Benzoesäure zwischen Wasser und Toluol.

Theorie:

Ein jeder Stoff hat einen spezifischen Verteilungsquotienten, in unterschiedlichen Phasen. Diesen gilt es zu ermitteln, unter der Voraussetzung, dass keine chemischen Reaktion zwischen den Lösungsmitteln der Phasen und den Komponenten kommt.

Grundlagen des Versuchs:

chemisches Potenzial (μ):

Ein chemisches Potenzial ist die Eigenschaft eines Stoffes:

1. mit anderen Stoffen zu reagieren
2. einen Phasenübergang zu durchlaufen
3. zu diffundieren

Generell laufen die Prozesse freiwillig ab, wenn das chemische Potential im Endzustand geringer ist, als im Ausgangszustand.

Das chemische Potenzial lässt sich aus der Gibbsschen Fundamentalgleichung herleiten.

$$dU = T \cdot dS - p \cdot dV + \sum \mu_i dn_i$$

U = innere Energie

T = Temperatur

p = Druck

V = Volumen

n_i = Stoffmenge von i

μ = chemisches Potential

Nernstsches Verteilungsgesetz:

Hat eine Substanz (A) die Möglichkeit sich zwischen zwei Phasen zu verteilen:

$$A_{(Phase I)} \rightleftharpoons A_{(Phase II)}$$

So stellt sich ein Gleichgewicht mit dem nernstschen Verteilungskoeffizient (K) ein.

$$\frac{c^{II}}{c^I} = const. \quad \text{bzw.} \quad K = \frac{c_A(Phase II)}{c_A(Phase I)}$$

Grundvoraussetzung für die Konstanz des Nernstschen Verteilungsgesetzes ist, dass weder Dissoziation noch Assoziation des gelösten Stoffes in den Phasen erfolgt.

Um der Reaktion eines Stoffes in den Phasen entgegen zu wirken, müssen der Druck und die Temperatur in einem System so gehalten werden, dass keine Reaktion erfolgt oder eine Reaktion so unwahrscheinlich wie möglich ist.

Gibbssches Phasengesetz:

In einem thermodynamischen Gleichgewicht können nicht beliebig viele Phasen in einem System koexistieren. Die möglichen Phasen können durch Freiheitsgrade bestimmt werden. Der Freiheitsgrad gibt an, wie viele Zustandsgrößen sich ändern können, ohne dass das Gleichgewicht der Phasen verändert wird.

$$f = 2 + k - p$$

f= Anzahl der Freiheitsgrade

k= Anzahl der Komponenten

p= Anzahl der Phasen

Herleitung der Gibbschen Phasenregel:

In einem System verteilen sich die Komponenten (K) auf die Phasen (P). Hieraus folgt, dass sich die Komponenten auf die Phasen verteilen, was sich durch $P \cdot (K-1)$ ausdrücken lässt.

Da T und p Zustandsgrößen sind, die sich auf das System auswirken, können sie zu dem Wert 2 zusammen gefasst werden. Daher kann man das System mit $P \cdot (K-1) + 2$

Zustandsgrößen beschreiben, wobei zwischen jeder Komponente eine Anzahl von $(p-1)$ Beziehungen bestehen, welche gleichermaßen in den Phasen 1 und 2 vorhanden sind.

Es liegen insgesamt 3 Beziehungen vor: T, p und das chemische Potenzial des Stoffes.

Daher lässt sich die Funktion der Freiheitsgrade $f = P \cdot (K-1) + 2 - K \cdot (P-1)$ zu $f = K - P + 2$ vereinfachen.

Aktivität:

In einer idealen Lösung kommt es, unter konstantem Druck, nur zu Wechselwirkung, wie sie auch zwischen zwei gleichartigen Stoffen vorherrschen, dies gilt jedoch nicht für reale Gase. In realen Lösungen kommt es in der Regel jedoch zu stärkeren attraktiven oder repulsiven Wechselwirkungen.

Die Aktivität beschreibt nun also den Unterschied zwischen einer idealen und einer realen Lösung.

In einer idealen Lösung, führen sämtliche thermodynamischen Größen (z.Bsp. T, p) der einzelnen Komponenten zu einer Gesamtthermodynamischen Größe der idealen Lösung.

Die reale Lösung weicht in der Gesamtthermodynamischen Größe durch die Aktivität von der idealen Lösung ab. Daraus folgt, dass die Aktivität dimensionslos sein muss.

Daher folgt für die Formel des chemischen Potentials einer idealen Lösung:

$$\mu_i(T, p) = \mu_i^0 + R \cdot T \cdot \ln(x_i) \quad \text{mit } x_i \text{ als Molenbruch der Komponente}$$

Für die reale Lösung mit dem Koeffizienten der Aktivität γ gilt die Formel:

$$\mu_i(T, p) = \mu_i^0 + R \cdot T \cdot \ln(a_i) \quad \text{wobei } a_i = x_i \cdot \gamma \quad \text{mit } \gamma \leq 1$$

Der Aktivitätskoeffizient γ ist nur für geringe Konzentrationen eine wirkungsvolle

Annäherung $\left(10^{-3} \frac{\text{mol}}{\text{l}}\right)$, da in diesen geringen Mengen die Wechselwirkungen zwischen der Gefäßwand und der Lösung vernachlässigt werden können.

Gekoppelte Gleichgewichte:

Unter gekoppelten Gleichgewichten versteht man miteinander verknüpfte Reaktionen, die auf einen gemeinsamen Reaktanten zurückzuführen sind.

Bsp.:

$A \rightleftharpoons B \quad B \rightleftharpoons C$ oder kurz: $A \rightleftharpoons C$ über den Reaktanten B

Praktische Anwendung:

Herleitung des Verteilungsquotienten:

a) Herleiten Des Gleichgewichtskriteriums

Die freie Enthalpie (G) in einer Reaktionsmischung ist abhängig von Temperatur (T), Druck (p) und den Molzahlen der Komponenten (n_k).

$$G = G(T, p, n_{(k)})$$

Durch bilden des totalen Differentials erhält man die Formel:

$$dG = \left[\frac{\partial G}{\partial p} \right]_{T, n_{(k)}} \cdot dp + \left[\frac{\partial G}{\partial T} \right]_{p, n_{(k)}} \cdot dT + \sum_k \left[\frac{\partial G}{\partial n_k} \right]_{p, T, n_{(i \neq k)}} \cdot dn_k$$

Das totale Differential darf in diesem Fall gebildet werden da es mehrere Variablen gibt nach denen man ableiten kann die sich gleichzeitig und unabhängig voneinander ändern können. Vergleichen wir nun das totale Differential mit der Gleichung

$$dG = V \cdot dp - S \cdot dT + \sum_k \mu_k \cdot dn_k \quad \text{stellen wir eine Ähnlichkeit fest.}$$

Unter der Bedingung T und p = const können wir die ersten beiden Summanden aus dem totalen Differential wegfassen lassen und erhalten mit der vorangegangenen Gleichung:

$$dG_{p, T} = \sum_k \left[\frac{\partial G}{\partial n_k} \right] \cdot dn_k = \sum_k \mu_k \cdot dn_k \quad \text{mit} \quad \mu_k = \left[\frac{\partial G}{\partial n_k} \right]_{p, T, n_{i \neq k}}$$

Für das chemische Potential μ_k einer Komponente (k) in einer Mischung gilt daher im Gleichgewicht:

$$dG = 0 = \sum_k \mu_k \cdot dn_k = \sum_{\text{Produkte}} \mu_k \cdot dn_k - \sum_{\text{Edukte}} \mu_k \cdot dn_k$$

b) Herleiten des Phasengleichgewicht (dG = 0)

In einem abgeschlossenen System ist die Summe der Stoffmengen einer Substanz in zwei verschiedenen Phasen konstant. Somit ist die Änderung der Konzentration der Substanz in Phase 1 gleich der negativen Änderung der Substanz in Phase 2 (Wenn in Phase 2 weniger Substanz vorliegt, muss der Verlust aus Phase 2 in Phase 1 dazu gekommen sein):

$$dn_k^I = -dn_k^{II} \quad .$$

Unter der Verwendung unserer hergeleiteten Gleichung:

$$dG_{p, T} = \sum_k \left[\frac{\partial G}{\partial n_k} \right] \cdot dn_k = \sum_k \mu_k \cdot dn_k \quad \text{oder vereinfacht} \quad \sum_k \mu_k \cdot dn_k = 0$$

ergibt sich ein Phasengleichgewicht für die Komponente (k):

$$dG = 0 = \mu_k^I \cdot dn_k^I + \mu_k^{II} \cdot dn_k^{II}$$

Vereinfachung mithilfe $dn_k^I = -dn_k^{II}$ zu

$$0 = (\mu_k^I - \mu_k^{II}) \cdot dn_k^I \quad (| :dn_k^I \text{ und } | +\mu_k^{II})$$

lässt sich auf

$$\mu_k^I = \mu_k^{II} \text{ schließen.}$$

Das lässt sich verallgemeinern auf alle Phasen (P): $\Rightarrow \mu_k^I = \mu_k^{II} = \dots = \mu_k^P$

Das chemische Potential (μ) ist gleichermaßen abhängig von der Gleichgewichtsaktivität (a), wie die freie Enthalpie (G). Somit gilt für jede Phase (P):

$$\mu_k^P = \mu_k^{0,P} + R \cdot T \cdot \ln a_k^P$$

In Bezugnahme von $\mu_k^I = \mu_k^{II}$ erhält man:

$$\frac{a_k^{II}}{a_k^I} = \exp \left[\frac{\mu_k^{0,I} - \mu_k^{0,II}}{R \cdot T} \right] = k$$

der rechte Teil ist bei konstanter Temperatur auch konstant, daher ersetzen wir es mit k.

Dadurch ergibt sich ein Verhältnis von der Gleichgewichtskonzentration, weil (a) bei idealen Lösungen der Konzentration (c) entspricht und auch bei realen Lösungen nahezu (c) entspricht:

$$\frac{c_k^{II}}{c_k^I} = k \quad \text{Auch bekannt als das Nernstsche Verteilungsgesetz.}$$

Von diesem Gesetz kann man zur Gibbschen Phasenregel überleiten. Vorliegendes Verhältnis besagt, dass die Konzentration eines gelösten Stoffes in einer Phase (I) durch die Konzentration des selben Stoffes in der anderen Phase (II) bestimmt werden kann. Das Verhältnis der Sättigungskonzentration ist gleich dem der Nernstschen Verteilungsverhältnisse. Grundvoraussetzung hierfür ist, dass die Komponenten keine chemische Reaktion mit den Lösungsmitteln eingeht.

Bsp. Der Verteilung von Benzoesäure (B) zwischen Wasser (W) und Toluol (T)

Nach dem dynamischen Gleichgewicht mit a und b als stöchiometrischen Koeffizienten:



Der Gleichgewichtskonstante K folgt:

$$K = \frac{[A^{II}]^b}{[A^I]^a} \quad \Rightarrow \quad K = \frac{[B^T]^b}{[B^W]^a}$$

Im einfachsten Fall (a = b = 1) ohne Reaktion d.h. Assoziation und Dissoziation könnte man die Formel:

$$K = \frac{[c_{II}]^b}{[c_I]^a} = \frac{[c_T]^b}{[c_W]^a} \text{ verwenden.}$$

Und zu $K = \frac{c_T}{c_W}$ bzw. $c_T = K \cdot c_W$ vereinfachen. Diese Formel ist für einfache Verteilungen verwendbar und erleichtert die Arbeit, wenn in jeder Phase gleich viel von einer Substanz gelöst ist.

Dies würde es ermöglichen eine Geradengleichung zu erstellen, die durch den Ursprung verläuft.

Im tatsächlichen Fall löst sich Benzoesäure aber nicht zu gleichen Teilen in Wasser und Toluol, weshalb wir die Gleichung verallgemeinern müssen:

$$\text{Es gilt: } (c_T)^b = (c_W)^a \cdot K$$

Wir nehmen die Gleichung hoch $1/b$, ziehen also die b -te Wurzel:

$$c_T = (c_W)^{\frac{a}{b}} \cdot K^{\frac{1}{b}} = (c_W)^{\frac{a}{b}} \cdot K'$$

Durch Logarithmieren erhält man die allgemeine Geradengleichung:

$$\log c_T = \frac{a}{b} \cdot \log c_W + \log K'$$

Mit dieser Gleichung lässt sich die Steigung a/b und der Achsenabschnitt $\log K'$ aus dem Graphen von $\log c_T$ gegen $\log c_W$ errechnen/ablesen.

Verwendete Chemikalien:

Jod*:



(Xn)

R 20/21 Gesundheitsschädlich beim Einatmen und bei Berührung mit der Haut.

R 50 Sehr giftig für Wasserorganismen.

S 2 Darf nicht in die Hände von Kindern gelangen.

S 23 Gas/Rauch/Dampf/Aerosol nicht einatmen.

S 25 Berührung mit den Augen vermeiden.

S 61 Freisetzung in die Umwelt vermeiden. Besondere Anweisungen einholen/Sicherheitsdatenblatt zu Rate ziehen.

Toluol*:



(F) (Xn)

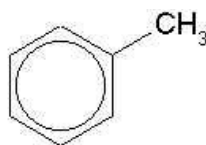


Abbildung 1: Strukturformel von Toluol

(Quelle: <http://chempage.alp.dillingen.de/organ/aromat/mol/toluol.pdb>)

R 11 Leichtentzündlich.

R 38 Reizt die Haut.

R 48/20 Gesundheitsschädlich: Gefahr ernster Gesundheitsschäden bei längerer Exposition durch Einatmen.

R 63 Kann das Kind im Mutterleib möglicherweise schädigen.

R 65 Gesundheitsschädlich: Kann beim Verschlucken Lungenschäden verursachen.

R 67 Dämpfe können Schläfrigkeit und Benommenheit verursachen.

S 2 Darf nicht in die Hände von Kindern gelangen.

S 36/37 Bei der Arbeit geeignete Schutzhandschuhe und Schutzkleidung tragen.

S 62 Bei Verschlucken kein Erbrechen herbeiführen. Sofort ärztlichen Rat einholen und Verpackung oder dieses Etikett vorzeigen.

Benzoessäure*:



(Xn)

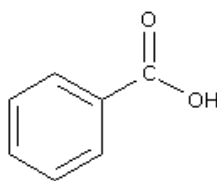


Abbildung 2: Strukturformel von Benzoessäure

(Quelle: http://www.bdsoft.de/demo/z_bilder/b/benzoesaere.gif)

R 22 Gesundheitsschädlich beim Verschlucken.

R 36 Reizt die Augen.

S 24 Berührung mit der Haut vermeiden.

Natriumthiosulfat*:

R-Sätze: -

S-Sätze: -

Natriumhydroxid*:



R 35 Verursacht schwere Verätzungen.

S 1/2 Unter Verschluss und für Kinder unzugänglich aufbewahren.

S 26 Bei Berührung mit den Augen gründlich mit Wasser abspülen und Arzt konsultieren.

S 37/39 Bei der Arbeit geeignete Schutzhandschuhe und Schutzbrille/Gesichtsschutz tragen.

S 45 Bei Unfall oder Unwohlsein sofort Arzt hinzuziehen (wenn möglich, dieses Etikett vorzeigen).

Thymolblau*:

R-Sätze: -

S-Sätze: -

Ethanol*:



(F)

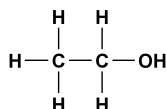


Abbildung 3: Strukturformel von Ethanol

(Quelle: <http://www.uni-saarland.de/fak8/schneider/anichem/struktur/ethanol.gif>)

R 11 Leichtentzündlich

S 2 Darf nicht in die Hände von Kindern gelangen

S 7 Behälter dicht geschlossen halten

S 16 Von Zündquellen fernhalten – Nicht rauchen

Aceton*:



(F) (Xi)

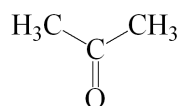


Abbildung 4: Strukturformel von Aceton

(Quelle: <http://sf.anu.edu.au/~vzv900/cct/appl/jmoeditor/manual/adding-atom/acetone.gif>)

R 11 Leichtentzündlich

R 36 Reizt die Augen

R 66 Wiederholter Kontakt kann zu spröder oder rissiger Haut führen

R 67 Dämpfe können Schläfrigkeit und Benommenheit verursachen

S 2 Darf nicht in die Hände von Kindern gelangen

S 9 Behälter an einem gut gelüfteten Ort aufbewahren

S 16 Von Zündquellen fernhalten – Nicht rauchen

S 26 Bei Berührung mit den Augen gründlich mit Wasser abspülen und Arzt konsultieren

S 46 Bei Verschlucken sofort ärztlichen Rat einholen und Verpackung oder Etikett vorzeigen

* Quelle: Aldrich Chemikalienkatalog

Erklärung der Gefahrenstoffkennzeichnung:



Abbildung 5: (C) Ätzend



Abbildung 6: (N) Umweltschädlich



Abbildung 7: (F) Leichtentzündlich



Abbildung 8: (Xn) Gesundheitsschädlich

(F+) Hochentzündlich

(Xi) Reizend

Versuch:

Benötigte Materialien:

Scheidetrichter, Ständer, Klammern, Erlenmeyerkolben, Bechergläser (200 ml), Pipetten (5ml, 50ml, 100ml), Bürette, Stärkelösung, Natriumthiosulfat (Na₂S₂O₃) (0,02 N), Benzoesäure, entsalztes Wasser, Ethanol (C₂H₅OH) bzw. Aceton zur Reinigung, Toluol, Jodlösung (in Toluol) 8g/l, Jodlösung (in Toluol) 12g/l, Jodlösung (in Toluol) 16g/l, Toluol, Thymolblau, Natriumhydroxid (0,1 N)

Versuchsaufbau:

- Der Versuch wird unter einem Abzug durchgeführt.
- Die Apparatur für die Phasentrennung in Durchführung 1 und 2 wird, wie in der Skizze 1, aufgebaut.

Skizze1:

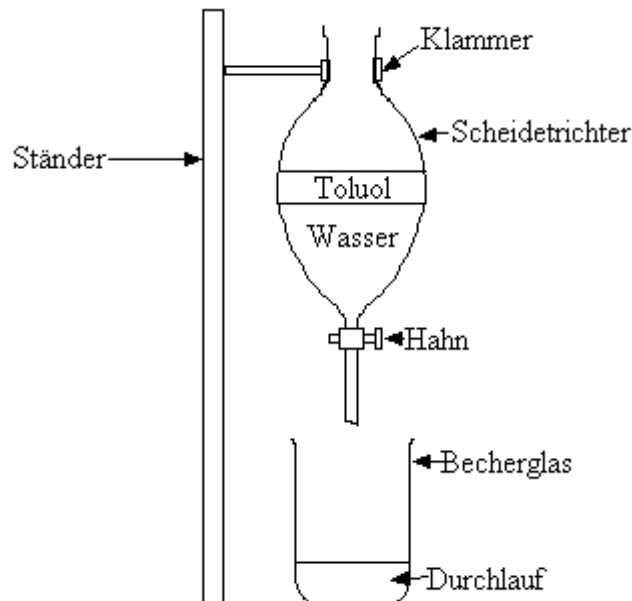


Abbildung 9: Skizze erstellt mit Paint

- Die Apparatur für die Titration wird, wie in der Skizze2, aufgebaut.
 - In Durchführung 1 wird die Bürette mit Natriumthiosulfat befüllt.
 - In Durchführung 2 wird die Bürette mit Natriumhydroxid befüllt.

Skizze 2:

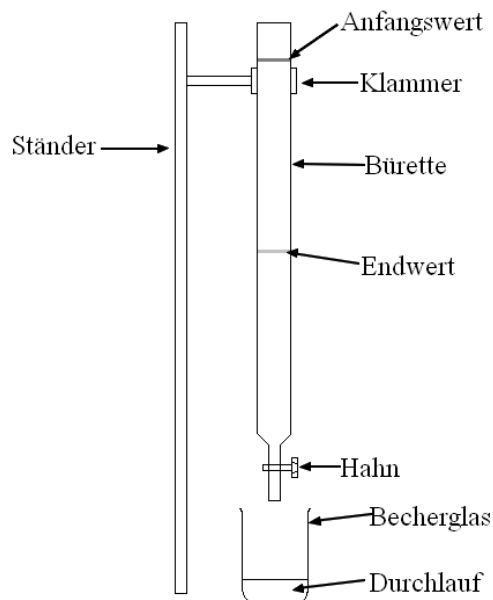


Abbildung 10: Skizze erstellt mit Paint

Durchführung I: Verteilungsquotient von Jod zwischen Wasser und Toluol

Der Scheidetrichter der Apparatur wird in drei aufeinander folgenden Versuchen, zwischen denen der Trichter ordnungsgemäß mit Aceton bzw. Ethanol gereinigt wird, mit 250 ml Wasser, 50 ml Toluol und 50 ml einer Jodlösung (Toluol mit 8 g/l, in Versuch 1 (V₁), 12 g/l

,in Versuch 2 (V_{I2}), und 16 g/l, in Versuch 3 (V_{I3})) bei geschlossenem Hahn befüllt. Um das Gemisch innerhalb des Scheidetrichter schütteln zu können und somit eine gleichmäßige Verteilung des gelösten Stoffes zu gewährleisten, wird die Öffnung des Scheidetrichters mit einem Stöpsel verschlossen. Man schüttelt den Trichter für ca. 2 Min. Während des Schüttelns ist es ratsam, das Gemisch immer mal wieder zu belüften, um einem eventuellen Überdruck, durch entstehende Gase innerhalb des Trichters, entgegen zu beugen.

Der Scheidetrichter, wie in der Skizze 1, mit einer Klammer an einem Ständer befestigt. Es wird 5 Min. gewartet, um dem Gemisch die Zeit zugeben, sich wieder in seine zwei Phasen zu trennen.

(Achtung: Sollte sich noch etwas Toluollösung im Durchgang des Hahns befinden, muss man das Gemisch noch einmal kräftig schwenken, um die Partikel zu lösen und ein verfälschen der Ergebnisse zu vermeiden)

Nach den 5 Min. entlässt man 200 ml Durchlauf der wässrigen Phase in ein Becherglas. Von der Toluollösung entnimmt man mittels einer Pipette 5 ml aus dem Scheidetrichter. Diese werden in ein separates Becherglas überführt, zu dem man noch zusätzlich 100 ml Wasser gibt.

Stärkelösung wird als Indikator sowohl in die entnommene Toluollösung als auch in die wässrige Lösung hinzugefügt.

Mittels einer Titration mit Natriumthiosulfat gegen die wässrige Lösung und die Toluollösung wird die Menge des verbrauchten Natriumthiosulfats erfasst, welche für einen Farbumschwung benötigt wurde. Während der Titration sollte das Becherglas unter der Bürette leicht geschwenkt werden, um eine gleichmäßige Verteilung zu gewährleisten. Die Differenz zwischen dem Anfangswertes und des Endwertes des Natriumthiosulfats innerhalb der Bürette wird für die Jodkonzentrationen der Lösungen notiert.

In gleicher Weise wird für die wässrigen Phasen und Toluolphasen der Versuche V_{I2} und V_{I3} verfahren.

Durchführung II: Verteilungsquotient von Benzoesäure zwischen Wasser und Toluol

Es werden insgesamt 4 Versuche durchgeführt $V_{B1} - V_{B4}$ in denen man 4 Toluollösungen und 4 wässrige Lösungen entnimmt und mit Natriumhydroxid titriert.

Es werden 2 g Benzoesäure in einem Becherglas mit 100 ml Toluol gelöst.

Diese Benzoesäurelösung wird zusammen mit 100 ml Wasser, bei geschlossenem Hahn, in den Scheidetrichter gegeben.

Dieser wird genau, wie in der Durchführung I, für 2 Min. geschüttelt und belüftet.

Der Scheidetrichter wird, wie in Skizze 1 in der Apparatur befestigt.

Man gibt dem Gemisch 5 Min. Zeit sich in seine Phasen zu trennen.

Mit Toluolverunreinigungen im Durchgang des Hahns wird wie in Durchführung I verfahren.

Nach den 5 Min. werden 50 ml Durchlauf der wässrigen Lösung in einem Becherglas entnommen und 50 ml der Toluolphase in ein Becherglas abpipettiert.

Von den 50 ml Toluollösung überführt man 5 ml in einen Erlenmeyerkolben, in dem die 5 ml Toluollösung mit 100 ml Wasser gemischt werden.

Man verschließt den Erlenmeyerkolben mit einem Stöpsel und schüttelt diesen kräftig.

Das Gemisch im Scheidetrichter wird mit 50 ml Toluol und 50 ml Wasser verdünnt, um die Gesamtkonzentration des gelösten Jods innerhalb des Scheidetrichters zu verringern.

Der Scheidetrichter wird wieder für 2 Min. geschüttelt und für 5 Min. stehen gelassen.

(Dieser Schritt wird nach jeder Abnahme von wässriger Lösung und Toluol in den Versuchen $V_{B2} - V_{B4}$ durchgeführt)

Es erfolgt eine Titration mit Natriumhydroxid mit der wässrigen Lösung und der Toluollösung. Hierbei ist darauf zu achten, dass langsam titriert wird, und dass das

Becherglas unter der Bürette leicht zu schwenken ist, um eine gleichmäßige Verteilung des Natriumhydroxids zu gewährleisten.

Die Differenz zwischen dem Anfangswert und dem Endwert der Titration wird wie in Durchführung I für die jeweilige Benzoesäurekonzentration vermerkt.

Man durchgeht die selben Schritte für die Versuche $V_{B2} - V_{B4}$.

In den Versuchen V_{B3} und V_{B4} wird der Schritt mit den 5 ml Toluollösung mit 10 ml Toluollösung durchgeführt.

Messergebnisse:

Durchführung 1:

Messergebnisse des Verbrauchs an Natriumthiosulfat für die wässrige Lösung der Gruppen 1 und 2:

Jodkonzentration	Gruppe 1	Gruppe 2
8 g/l	0,4 ml	0,7 ml
12 g/l	1,3 ml	0,7 ml
16 g/l	0,8 ml	1,2 ml

Messergebnisse des Verbrauchs an Natriumthiosulfat für die Toluollösung der Gruppen 1 und 2:

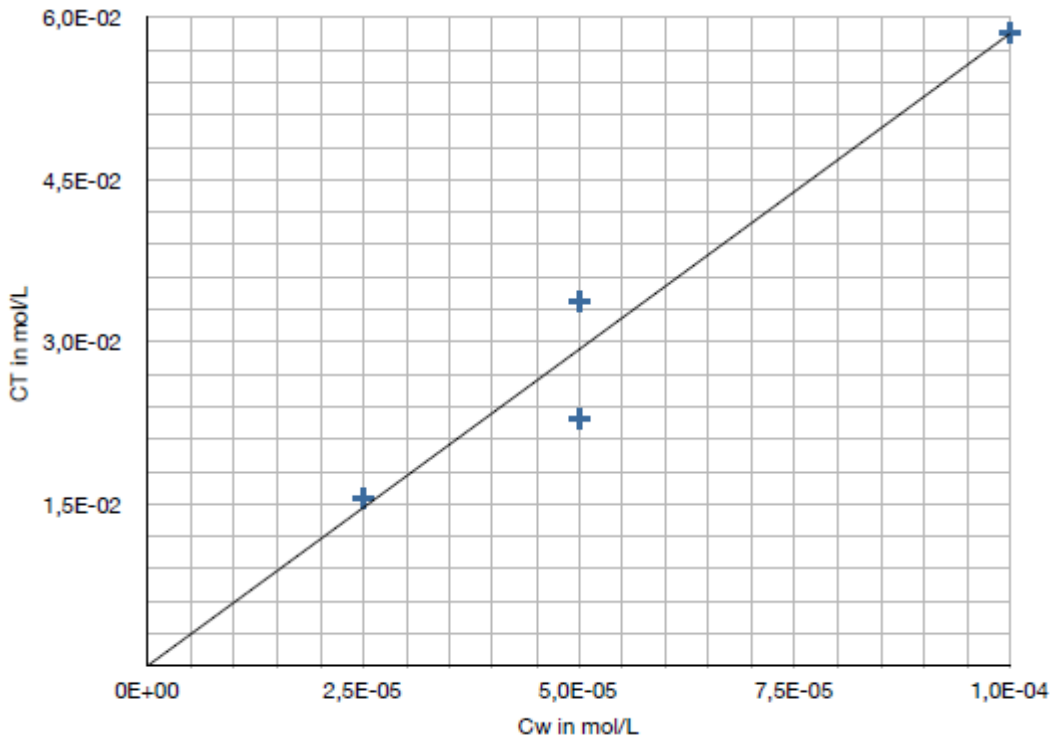
Jodkonzentration	Gruppe 1	Gruppe 2
8 g/l	8,4 ml	7,2 ml
12 g/l	11,1 ml	11,9 ml
16 g/l	17,4 ml	16,4 ml

Durchschnittlicher Verbrauch:

Konzentration von Jod in Toluol	Verbrauchte Menge Natriumthiosulfat für die Titration mit der wässrigen Lösung	Verbrauchte Menge Natriumthiosulfat für die Titration mit der Toluollösung
8 g/l	0,5 ml	7,8 ml
12 g/l	1,0 ml	11,5 ml
16 g/l	1,0 ml	16,9 ml

Konzentration von Jod in Toluol	C_w in Mol/L	C_T in Mol/L	K
8 g/l	0,0000125	0,0078	624
12 g/l	0,000025	0,0115	460
16 g/l	0,000025	0,0169	676

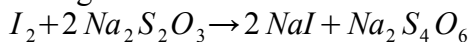
Verteilungsquotient von Jod in Wasser und Toluol :



Mit der Funktionsgleichung: $f(x) = 586,7 \cdot x + 0$ $k = 586,7$

Berechnung zu Durchführung 1:

Jod reagiert mit Natriumthiosulfat zu Natriumjodid nach folgender Formel:



Der Verteilungsquotient von Jod zwischen Wasser und Toluol in der Konzentration von 8g/l berechnet sich wie folgt:

Es ist zu berechnen, wie viel Mol Natriumthiosulfat für den Messwert in der wässrigen Lösung (0,5 ml) verbraucht worden sind. Man kommt zu dem Ergebnis, dass 0,000005 Mol Natriumthiosulfat für die Reduktion von Jod in der wässrigen Lösung benötigt worden sind. Dies entspricht 0,005 mMol, weil 1 mol/L Natrium auf Grund seiner Wertigkeit (relative Häufigkeit der Natriumionen im Natriumthiosulfat) 2 N Natriumthiosulfat entsprechen.

Dies zeigt sich wie folgt:

$$0,02 N = x \frac{mol}{l} \cdot 2$$

Nach der Reaktionsgleichung von Jod mit Natriumthiosulfat bedeutet dies, dass 0,005 mMol Natriumthiosulfat mit 0,0025 mMol Jod reagiert haben.

Nun wird berechnet, wie viel Gramm bzw. Milligramm Jod in der wässrigen Lösung waren. Man kommt zu dem Ergebnis, dass sich etwa 0,31725 mg Jod in 200 ml wässriger Lösung

befanden. Dies erlaubt es die Gesamtjodkonzentration, die sich im Scheidetrichter befand zu berechnen, was sich auf etwa 0,3965625 mg beläuft.

Da sich im Scheidetrichter insgesamt 0,4 g gelöstes Jod befanden, kann man davon ausgehen, dass sich 399,6034375 mg Jod in der Toluollösung befinden.

Die Berechnung des verbrauchten Natriumthiosulfats für die Toluollösung liefert eine Konzentration von 0,000078 Mol bzw. 0,078 mMol. Gemäß der Reaktionsgleichung bedeutet dies, dass sich etwa 0,039 mMol Jod in der Toluollösung befanden, was sich auf eine Jodkonzentration im Scheidetrichter von 98,982 mg entspricht.

Für den Verteilungskoeffizient mit $K = \frac{c_T}{c_W}$ erhält man: $K = \frac{7,8}{0,0125} = 624$

Der Verteilungsquotient von Jod zwischen Wasser und Toluol in der Konzentration von 12g/l berechnet sich wie folgt:

Es ist zu berechnen, wie viel Mol Natriumthiosulfat für den Messwert in der wässrigen Lösung (1,0 ml) verbraucht worden sind. Man kommt zu dem Ergebnis, dass 0,00001 Mol Natriumthiosulfat für die Reduktion von Jod in der wässrigen Lösung benötigt worden sind. Dies entspricht 0,01 mMol.

Nach der Reaktionsgleichung von Jod mit Natriumthiosulfat bedeutet dies, dass 0,01mMol Natriumthiosulfat mit 0,005mMol Jod reagiert haben.

Die Berechnung des verbrauchten Natriumthiosulfats (11,5 ml) für die Toluollösung liefert eine Konzentration von 0,000115 Mol bzw. 0,115 mMol. Gemäß der Reaktionsgleichung bedeutet dies, dass sich etwa 0,0575 mMol Jod in der Toluollösung befanden.

Für den Verteilungskoeffizient mit $K = \frac{c_T}{c_W}$ erhält man: $K = \frac{11,5}{0,025} = 460$

Der Verteilungsquotient von Jod zwischen Wasser und Toluol in der Konzentration von 16g/l berechnet sich wie folgt:

Es ist zu berechnen, wie viel Mol Natriumthiosulfat für den Messwert in der wässrigen Lösung (1,0 ml) verbraucht worden sind. Man kommt zu dem Ergebnis, dass 0,00001 Mol Natriumthiosulfat für die Reduktion von Jod in der wässrigen Lösung benötigt worden sind. Dies entspricht 0,01 mMol.

Nach der Reaktionsgleichung von Jod mit Natriumthiosulfat bedeutet dies, dass 0,01mMol Natriumthiosulfat mit 0,005mMol Jod reagiert haben.

Die Berechnung des verbrauchten Natriumthiosulfats (16,9 ml) für die Toluollösung liefert eine Konzentration von 0,000169 Mol bzw. 0,169 mMol. Gemäß der Reaktionsgleichung bedeutet dies, dass sich etwa 0,0845mMol Jod in der Toluollösung befanden.

Für den Verteilungskoeffizient mit $K = \frac{c_T}{c_W}$ erhält man: $K = \frac{16,9}{0,025} = 676$

Anmerkung: Wir haben c_T mit 200 multipliziert um auf die Konzentration in $\frac{\text{mol}}{\text{L}}$ zu kommen, c_W wurde dagegen mit 5 multipliziert.

Nun bilden wir den Mittelwert der Konstante K, dazu rechnen wir alle c_T zusammen und teilen durch die Summe der c_W .

$$K_{\text{Mittelwert}} = \frac{\sum c_T}{\sum c_W} = \frac{7,8+11,5+16,9}{0,0125+0,025+0,025} = \frac{36,2}{0,0625} = 579,2$$

Dieser Wert entspricht nahezu der Steigung der Geraden des Verteilungsquotienten.

Nun wird überprüft, ob man zum selben Ergebnis gelangt, wenn man mit dem verbrauchten Thiosulfat auf die gleichen Volumina der Toluol- und der wässrigen Lösung bezogen rechnet.

- Für die 0,5 ml Natriumthiosulfat für die wässrige Lösung und die 7,8 ml Toluol erhält man für die 8 g/l Jodlösung:

$$\text{Unter der Verwendung } K = \frac{ml_T}{ml_W} \Rightarrow K = \frac{312 ml}{0,5 ml} = 676$$

wobei die 7,8 ml Toluol mit 40 multipliziert wurden, um das Volumen des Toluols (5 ml) auf das Volumen der wässrigen Lösung (200 ml) an zu passen.

- Für die 1,0 ml Natriumthiosulfat für die wässrige Lösung und die 11,5 ml Toluol erhält man für die 12 g/l Jodlösung:

$$K = \frac{460 ml}{1,0 ml} = 460$$

wobei die 7,8 ml Toluol mit 40 multipliziert wurden, um das Volumen des Toluols (5 ml) auf das Volumen der wässrigen Lösung (200 ml) an zu passen.

- Für die 1,0 ml Natriumthiosulfat für die wässrige Lösung und die 16,9 ml Toluol erhält man für die 16 g/l Jodlösung:

$$K = \frac{676 ml}{1,0 ml} = 676$$

wobei die 7,8 ml Toluol mit 40 multipliziert wurden, um das Volumen des Toluols (5 ml) auf das Volumen der wässrigen Lösung (200 ml) an zu passen.

Auch hier bilden wir den Mittelwert aus allen K:

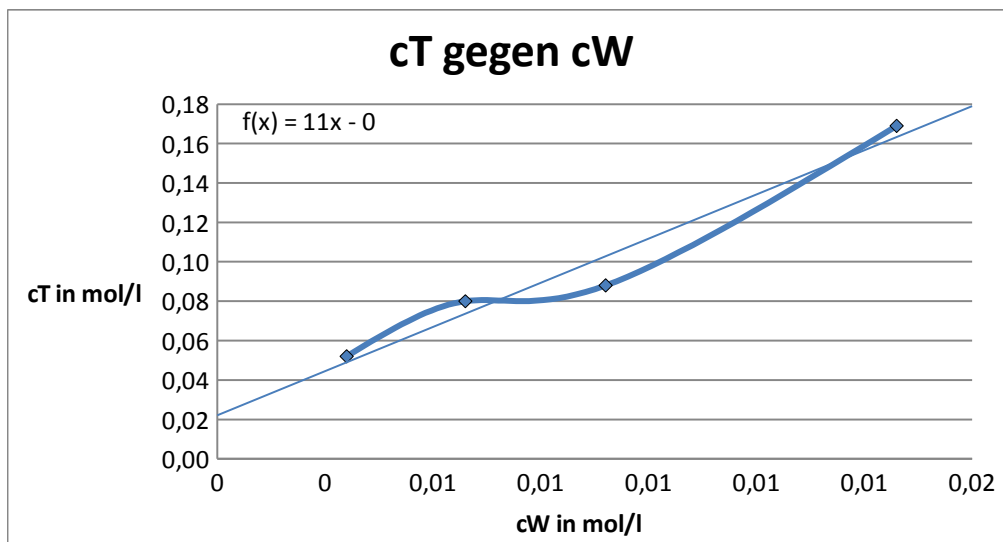
$$K_{\text{Mittelwert}} = \frac{312+460+676}{0,5+1+1} = \frac{1448}{2,5} = 579,2$$

Auch die Mittelwerte stimmen bei dieser Art der Berechnung überein. Damit wird der Rechenaufwand erheblich erleichtert.

Durchführung 2:

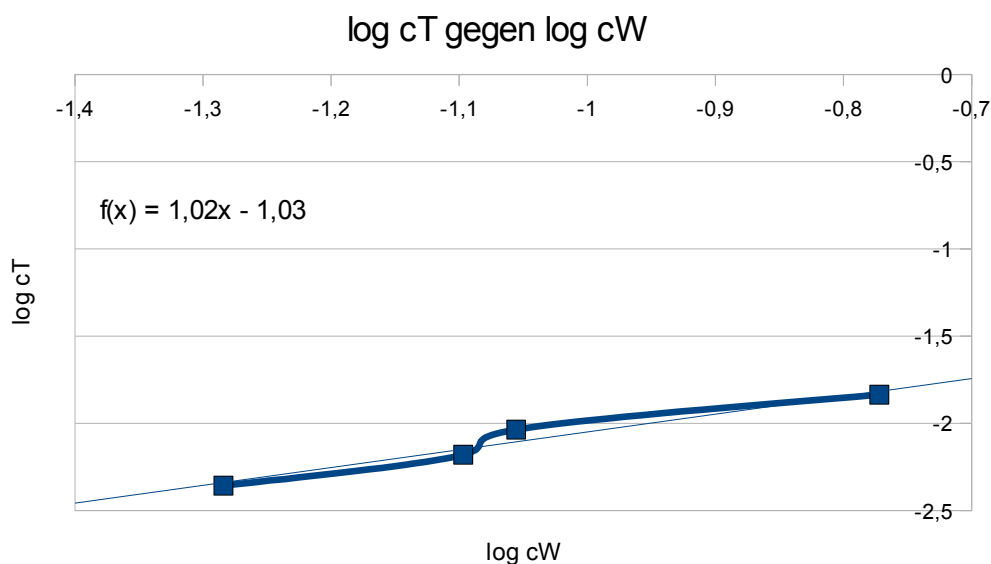
Messergebnisse des Verbrauchs an Natriumhydroxid für die wässrige Lösung und die Toluollösung

Ausschüttelung	Phase	Verbrauch NaOH in ml	Stoffmenge in mol	Konzentration in mol/l
1. Ausschüttelung	Wasserpahse 50 ml	7,3	$7,30 \cdot 10^{-4}$	$1,46 \cdot 10^{-2}$
	Toulophase 5 ml	8,45	$8,450 \cdot 10^{-4}$	$1,69 \cdot 10^{-1}$
2. Ausschüttelung	Wasserpahse 50 ml	4,6	$4,60 \cdot 10^{-4}$	$9,2 \cdot 10^{-3}$
	Toulophase 5 ml	4,4	$4,40 \cdot 10^{-4}$	$8,8 \cdot 10^{-2}$
3. Ausschüttelung	Wasserpahse 50 ml	3,3	$3,30 \cdot 10^{-4}$	$6,6 \cdot 10^{-3}$
	Toulophase 10 ml	4	$4,0 \cdot 10^{-4}$	$8,0 \cdot 10^{-2}$
4. Ausschüttelung	Wasserpahse 50 ml	2,2	$2,20 \cdot 10^{-4}$	$4,4 \cdot 10^{-3}$
	Toulophase 10 ml	2,6	$2,60 \cdot 10^{-4}$	$5,2 \cdot 10^{-2}$

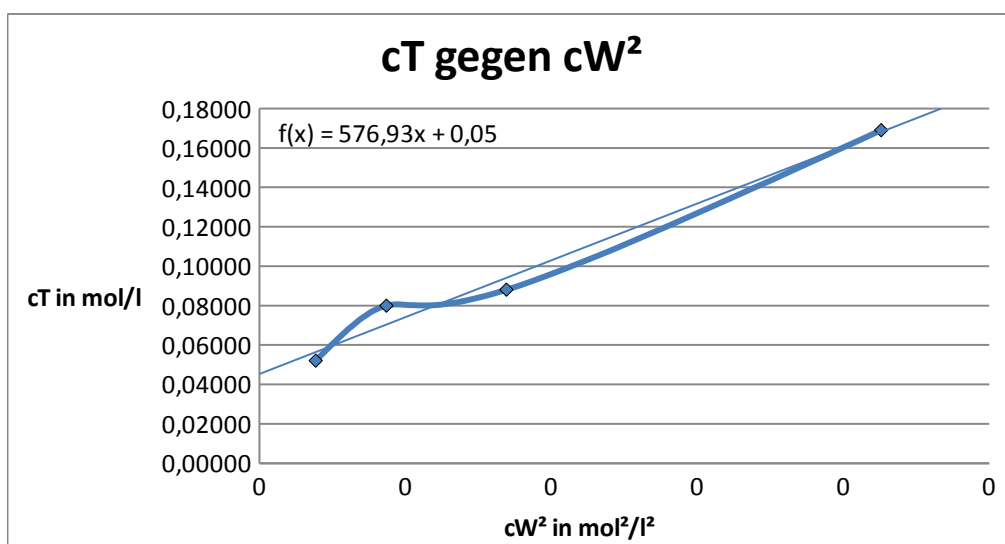


Es ergibt sich keine Gerade, da Benzoesaeure und Toluol miteinander reagieren. Hierdurch kann kein konstanter Nernstscher Verteilungskoeffizient ermittelt werden, wa sich in der Steigung widerspiegelt.

Ausschüttelung	Phase	Konzentration in mol/l	Logarithmus log c(x)	Quadrat $c(x)^2$
1. Ausschüttelung	Wasserpahse 50 ml	$1,46 \cdot 10^{-2}$	-1,84	$2,13 \cdot 10^{-4}$
	Toulophase 5 ml	$1,69 \cdot 10^{-1}$	-0,77	$2,85 \cdot 10^{-2}$
2. Ausschüttelung	Wasserpahse 50 ml	$9,2 \cdot 10^{-3}$	-2,04	$8,46 \cdot 10^{-5}$
	Toulophase 5 ml	$8,8 \cdot 10^{-2}$	-1,06	$7,74 \cdot 10^{-3}$
3. Ausschüttelung	Wasserpahse 50 ml	$6,6 \cdot 10^{-3}$	-2,18	$4,35 \cdot 10^{-5}$
	Toulophase 10 ml	$8,0 \cdot 10^{-2}$	-1,1	$6,40 \cdot 10^{-3}$
4. Ausschüttelung	Wasserpahse 50 ml	$4,4 \cdot 10^{-3}$	-2,36	$1,93 \cdot 10^{-5}$
	Toulophase 10 ml	$5,2 \cdot 10^{-2}$	-1,28	$2,70 \cdot 10^{-3}$



$a/b = 1,02$ Steigung der Regressionsgeraden
 $K' = 0,093325$ Achsenabschnitt mit $\log K' = -1,03$ $K' = 0,093325$



$K' = 576,93$ ist die Steigung der Regressionsgerade.

Der Unterschied zwischen den beiden K' Werten kommt durch die Abhängigkeit des ersten Wertes vom Logarithmus zustande.

Die Ursache für die unterschiedlichen Strukturen von Benzoesäure in Toluol kommt daher, dass die Säure Wasserstoffbrückenbindungen ausbildet und dann als Dimer in Toluol vorliegt. In der wässrigen Lösung wird diese Dimerisierung durch Hydratisierung der Benzoesäure verhindert, da das Wasser selbst die Brückenbindungen mit der Benzoesäure ausbildet, damit kann die Benzoesäure nicht mit sich selbst Wasserstoffbrücken ausbilden.

Das Dimer sieht wie folgt aus:

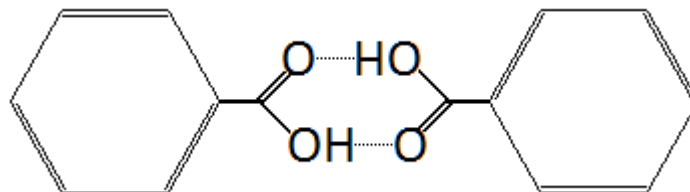


Abbildung 11: Grafik erstellt mit paint

Fehlerbetrachtung:

Während der Durchführung kann es zu diversen Messfehlern, unter anderem dem falschen Ablesens der Messskalen der Geräte, wie auch dem außer Acht lassen der genauen Meniskuslage der Flüssigkeit, gekommen sein. Des Weiteren gab es zu keinem Zeitpunkt einen empirischen Beweis über die Reinheit bzw. die genaue Konzentration der benutzten Substanzen. Ferner war das genaue Erfassen des Umschwingpunktes der Flüssigkeiten abhängig von der persönlichen Wahrnehmung der Probanden, was zusätzlich durch einen Wechsel des ausführenden Probanden während des Kolloquiums, zu Unstimmigkeiten in der allgemeinen Erfassung des Umschwingpunktes geführt hat. Sollten die Geräte vor den Durchführungen nicht ordnungsgemäß gereinigt worden sein, können Rückstände und Verunreinigungen an der Gefäßwand mit den Messergebnissen interferiert haben. Sollte der Proband unwissend über den Resttropfen in der Pipette gewesen sein und diesen in die Lösung ausgeschüttelt haben, könnten die Mengen der Lösungen verfälscht worden sein, da dieser Resttropfen von dem Hersteller in die Messskala der Pipette eingerechnet worden ist, und somit zu vernachlässigen ist.

Gesamtdiskussion des Versuchs:

Wie man an Hand der Fehlerbetrachtung und den Berechnungen, zu den Durchführungen der Versuche, ersieht, ist der Gesamtversuch zur empirischen Bestimmung des Verteilungsquotienten stark fehleranfällig.

Dies kann unter anderem aus der Tabelle zum durchschnittlichen Natriumthiosulfatverbrauch für die Titration, aber auch aus der Tabelle zu den Messergebnissen des Natriumthiosulfatverbrauchs der Gruppen 1 und 2 ersehen werden.

Dies wird auch in dem log Graphen von C/T der Benzoesäure ersichtlich.

Besonders deutlich werden die Unterschiede zwischen idealen Lösungen und realen Lösungen im Vergleich von Versuchsteil 1 mit Versuchsteil 2.

Allgemein kann man sagen, dass der Versuch für ungeübte Probanden ungeeignet ist, für geübtere Personen jedoch eine geeignete Methode zur Bestimmung von Verteilungsquotienten ist.

Quellen:

Buchtitel	Autor/-en	Verlag
<i>Chemie – die zentrale Wissenschaft</i>	<i>T. L. Brown, H. E. LeMay, B. E. Bursten</i>	<i>Pearson Studium</i>
<i>Physikalische Chemie</i>	<i>H. Hug, Wolfgang Reiser</i>	<i>Europa-Lehrmittel</i>
<i>Chemie</i>	<i>C. E. Mortimer, U. Müller</i>	<i>Thieme</i>
<i>Kurzlehrbuch Physikalische Chemie</i>	<i>P. W. Atkins, J. De Paula</i>	<i>Wiley-VCH</i>
<i>Aldrich Chemikalienkatalog</i>	-	<i>Firma Sigma-Adrich</i>

Hiermit bestätigt die Gruppe E4, dass alle Gruppenmitglieder mit den Inhalten dieser Endfassung des Protokolls einverstanden sind.

Michael Brunk

Yannick Giernat

Simon Knieps