

# Het isobestisch punt en de $pK_z$ waarde van methyloord bepalen doormiddel van een meer component analyse



Uitvoerende: Jesper Schuurman en Ilse Sanders

Schrijver: Jesper Schuurman

Datum uitvoering: 13-12-2024

Datum verslag: 03-01-2025

## Inhoudsopgave

1.0 Inleiding .....	3
2.0 Materiaal en Methode .....	4
2.1 Materiaal.....	4
2.2 Methode .....	4
3.0 Waarnemingen .....	5
4.0 Resultaten .....	6
5.0 Discussie.....	8
6.0 Conclusie .....	9
7.0 Bronvermelding .....	10
8.0 Bijlagen .....	11

## 1.0 Inleiding

Tijdens dit experiment gaat er gewerkt worden met een spectrofotometer, deze kan door middel van een tralie (een opstelling die er voor zorgt dat licht in verschillende golflengtes gescheiden kan worden) om de extinctie bij verschillende of een specifieke golflengte te meten. Met deze spectrofotometer zullen er een aantal mengsels van NaOH, HCl en een vaste hoeveelheid methylrood. Deze mengsels zullen gemaakt worden op basis van pH (een pH van 4.8, 5.0, 5.2, 5.4 en 5.6). Vervolgens kan er met de gemeten extinctie en 2 vooraf bepaalde extinctie coëfficiënten bepaalt worden wat de concentraties van de NaOH en HCL is, waarmee vervolgens de  $pK_z$  waarde van methylrood berekend kan worden.

## 2.0 Materiaal en Methode

### 2.1 Materiaal

Tabel 1: Een tabel van de benodigde materialen voor het experiment.

Stoffen	Spullen
NaOH	pH meter
HCl	UV/vis spectrofotometer
Methylrood	Analytische balans
Ethanol	Maatkolven 100ml
	Roervlo + roerplaat
	Bekerglazen

### 2.2 Methode

Voor dat je met het experiment kan beginnen moet als dit nog niet aanwezig 0,01M HCl en NaOH gemaakt worden. Vervolgens moet er als eerste 0,1g methylrood afgewogen worden, dit stop je in 60 ml 95% ethanol en vul je hierna aan tot 100 ml met water (dit is oplossing 1). Als tweede wordt van oplossing 1 10,0 ml gepipetteerd naar 45ml 95% ethanol wat ook weer wordt aangevuld tot 100 ml met water dit is de stock oplossing. Hierna wordt en 10,0 ml uit de stock gepipetteerd in een maatkolf dit wordt aangevuld tot 100 ml met 0,01M HCl (dit is oplossing 2). De vorige stap wordt ook herhaald met 0,01M NaOH (dit is oplossing 3). Vervolgens wordt er 10,0ml stock gepipetteerd naar een bekerglas waar ongeveer 50ml water aan toegevoegd wordt, deze stap wordt 5 keer gedaan. De 5 bekerglazen worden vervolgens achtereenvolgend op een magnetische roerder geplaatst en er worden een roervlo en pH meter aan toegevoegd. Hierna wordt er afwisselend 0,01M NaOH en HCL toegevoegd tot er ongeveer 100ml in het bekerglas zit, de pH wordt ook gemeten. Er moete uiteindelijk een oplossing van 4,8, 5,0, 5,2, 5,4 en 5,6 zijn. Hierna worden deze 5 oplossing en oplossing 2 en 3 in een spectrofotometer gedaan en wordt er een fullscan uitgevoerd. Ten slote kun je met de hier uitkomende extincties de  $pK_z$  waarde en het isobestisch punt van methylrood berekenen.

### 3.0 Waarnemingen

*Afbeelding 1: Een uitgezette reeks van alle oplossingen.*

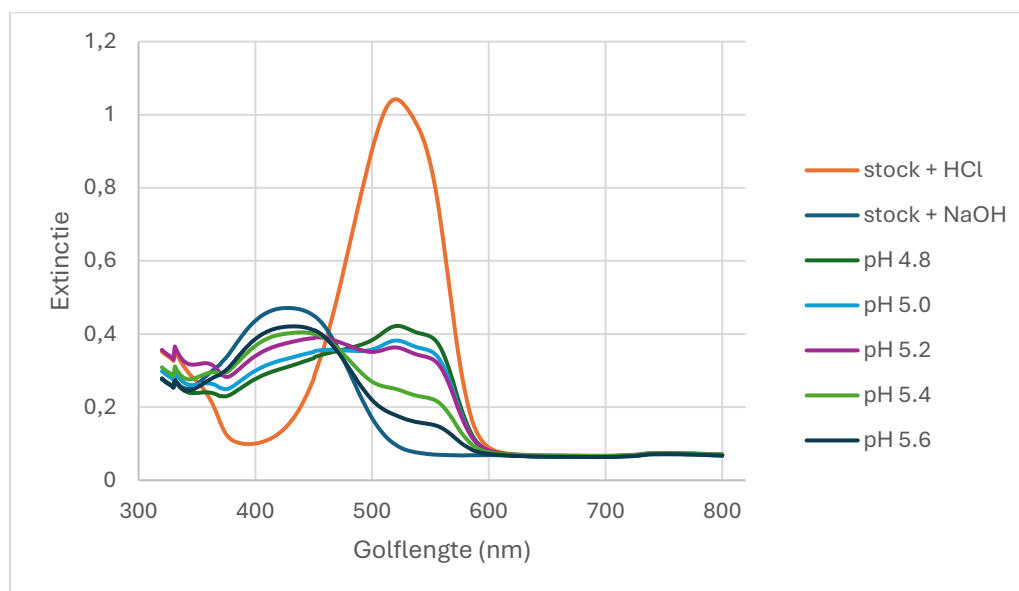


Zo als in bijlage 1 duidelijk te zien valt is er een duidelijk kleur verschil tussen de oplossing omdat methylrood een pH indicator is, dit was ook duidelijk zichtbaar tijdens het toevoegen van NaOH en HCl, waar de oplossing telkens van omsloeg als de stoffen werden toegevoegd.

## 4.0 Resultaten

Zoals eerder genoemd is er op elke oplossing/monster een fullscan uitgevoerd, de resultaten van deze fullscans zijn verwerkt in een grafiek (Grafiek 1). Met deze grafiek is het mogelijk om een inschatting van het isobestisch punt te doen, namelijk 456 nm.

Grafiek 1: Een grafiek van alle fullscans van de verschillende oplossingen



Het is ook mogelijk om de  $pK_z$  waarde van methylrood te berekenen doormiddel van de waardes die uit de fullscans zijn gekomen (waardes zichtbaar in bijlage 1). Dit gaat als volgt:

1. Bereken/achterhaal de extinctie die bij de top van de stock + HCl en de stock + NaOH. Ook wordt de extinctie berekend/achterhaald bij de golflengtes van de andere top (dus de golflengte bij de top van stock + HCl gebruik je om een extinctie bij de stock + NaOH te krijgen en andersom). Deze extincties kun je vervolgens gebruiken om de extinctiecoëfficiënten te berekenen met de wet van Lambert Beer,  $E = \epsilon * c * d$  hier is E de extinctie die zojuist bepaald is,  $\epsilon$  is de extinctiecoëfficiënt die je wil weten, c is de concentratie die ook bekend (namelijk 90 ml 0,01M in 100ml wat 0,009M geeft) is en d is de dichtheid wat 1 (cm) is. Om de extinctiecoëfficiënt te berekenen kun je de formule omschrijven naar  $\epsilon = \frac{E}{c*d}$ .

Tabel 2: Een tabel met de berekende extinctiecoëfficiënten.

Stof + golflengte	$\epsilon$
NaOH op 427 nm	523,6667
NaOH op 520 nm	108,4444
HCl op 427 nm	164,4444
HCl op 520 nm	1158

2. Vervolgens kun je met de formules  $E_1 = \epsilon_{1NaOH} * c_{1NaOH} + \epsilon_{1HCl} * c_{1HCl}$  en  $E_2 = \epsilon_{2NaOH} * c_{2NaOH} + \epsilon_{2HCl} * c_{2HCl}$ , waar formule 1 en alle waardes 1 bij een golflengte van 427 nm horen en formule 2 en alle waardes 2 bij een golflengte van 520 nm horen. Als je deze formules invult en vervolgens een van de onbekenden gelijkstelt (door beide formules te vermenigvuldigen). Hierna kun je ze van elkaar aftrekken en de overige onbekende berekenen en deze vervolgens invullen in een van de formules om de

andere onbekende te achterhalen. Dit moet je bij alle vijf oplossingen te doen om de concentraties NaOH en HCl in deze monsters te berekenen. Als je dit bij oplossing 1 (pH 4,8) doet krijg je het volgende.

$$0,3105 = 523,7cNaOH + 164,4cHCl$$

$$0,4222 = 108,4cNaOH + 1158cHCl$$

Gelijkstellen (bovenste formule \* 108,4 en onderste formule \* 523,7)

$$33,672 = 56788cNaOH + 17833cHCl$$

$$221,09 = 56788cNaOH + 606406cHCl$$

Van elkaar aftrekken

$$187,42 = 588572,9cHCl$$

Uitwerken

$$cHCl = 0,000318M$$

Invullen

$$0,3105 = 523,7cNaOH + 164,4 * 0,000318$$

$$0,3105 = 523,7cNaOH + 0,052$$

$$523,7cNaOH = 0,258$$

$$cNaOH = 0,000493M$$

Dit gebeurt vervolgens voor alle oplossingen en levert de volgende resultaten in tabel 3.

*Tabel 3: Een tabel met alle oplossingen en bijbehorende NaOH en HCl concentraties.*

	cNaOH	cHCl
<b>Oplossing 1 (pH 4,8)</b>	0,000493M	0,000318M
<b>Oplossing 2 (pH 5,0)</b>	0,000604M	0,000309M
<b>Oplossing 3 (pH 5,2)</b>	0,000709M	0,000282M
<b>Oplossing 4 (pH 5,4)</b>	0,000803M	0,000162M
<b>Oplossing 5 (pH 5,6)</b>	0,000863M	0,0000901M

3. Tenslotte is het mogelijk om met de concentraties uit tabel 3 de  $pK_z$  waarde van methylrood te berekenen met de formule  $pK_z = pH + \log \frac{[zure\ stof]}{[basische\ stof]}$ .

Bij oplossing 1 gebeurt dan het volgende  $pK_z = 4,77 + \log \frac{0,000318}{0,000493} = 4,58$ .

Als je dit vervolgens bij alle oplossingen uitvoert krijg je de volgende resultaten die in Tabel 4 zichtbaar zijn.

*Tabel 4: Berekende  $pK_z$  waardes van methylrood.*

pH	$pK_z$
4,8 (4,77)	4,58
5,0 (5,03)	4,74
5,2 (5,20)	4,80
5,4 (5,42)	4,72
5,6 (5,63)	4,65

Als je door rekent met de waardes uit Tabel 4 kom je uit op een gemiddelde van 4,70, een standaard deviatie van 0,085 en een RSD% van 1,81%. Al deze berekeningen zijn gedaan met de desbetreffende Excel functies (zichtbaar in bijlage 1).

## 5.0 Discussie

Een ding wat niet goed is gegaan is de uiteindelijke  $pK_z$  waardes, deze zouden 5,1 moeten zijn (Wikipedia-bijdragers, 2024) maar, uit dit experiment kwam een  $pK_z$  van 4,7. Dit komt waarschijnlijk doordat de pH meter niet helemaal goed gekalibreerd was en dus hogere pHs weergaf dan de daadwerkelijke pH van de oplossing. Dit wordt ook ondersteunt door de kleuren van de oplossingen want dit had een gradiënt moeten zijn omdat methylrood van kleur verandert op basis van de pH van de omgeving waar het zich plaats vind. Echter werd er bij dit experiment pas een gradiënt zichtbaar vanaf oplossing 3 wat inhoudt dat de pH daar pas in de buurt van de 5,2 kwam dus ergens rond de 4,8 was.



## 6.0 Conclusie

Uit dit experiment valt te concluderen dat de  $pK_z$  waarde van methylrood aan de hand van de gebruikte meetwaarden en apparatuur 4,7 is en dat het isobestisch punt rond de 456 nm ligt. Hierbij komt de  $pK_z$  waarde zo als bij de discussie al naar vorenkwam niet overeen met de verwachte waarde. Het isobestisch punt wat dit experiment is gekomen komt wel overeen met een verwachte waarde van rond de 460 nm (Sokaina Saad Hemdan, 2019).

## 7.0 Bronvermelding

1.Wikipedia-bijdragers.(2024,18november). *Methylrood*.Wikipedia.

<https://nl.wikipedia.org/wiki/Methylrood>

2. Sokaina Saad Hemdan, (2019) The Isosbestic Point in an electronic spectra of Methyl Red at different pH (4.5-7.1)

[https://www.researchgate.net/figure/Fig-1-The-Isosbestic-Point-in-an-electronic-spectra-of-Methyl-Red-at-different-pH\\_fig1\\_348394084](https://www.researchgate.net/figure/Fig-1-The-Isosbestic-Point-in-an-electronic-spectra-of-Methyl-Red-at-different-pH_fig1_348394084)

## 8.0 Bijlagen

Bijlage 1: [meercomponent analyse 13-12](#)