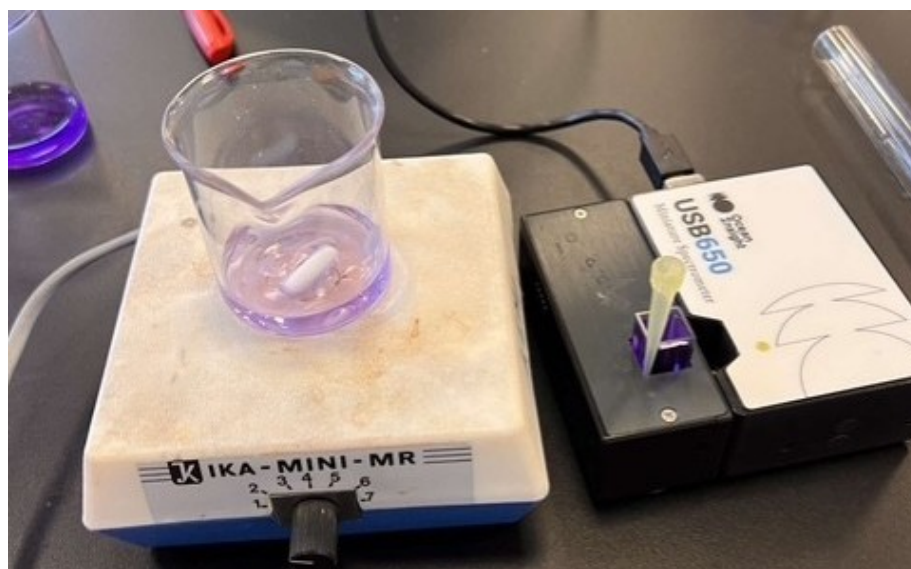


Rapport 5 - Krystalviolet

3.b kemi A

Kevin Zhou

12. februar 2025

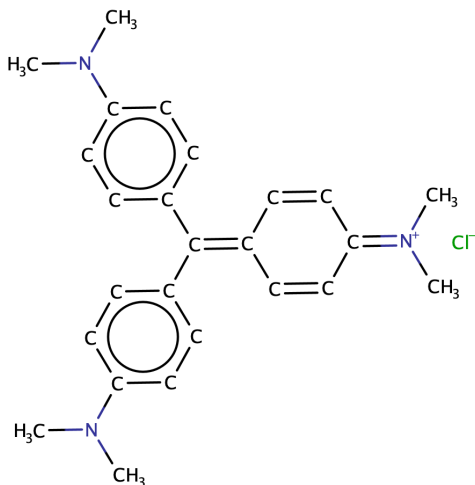


Formål

Formålet med eksperimentet er at bestemme hastighedsudtrykket for krystalviolets reaktion med hydroxid.

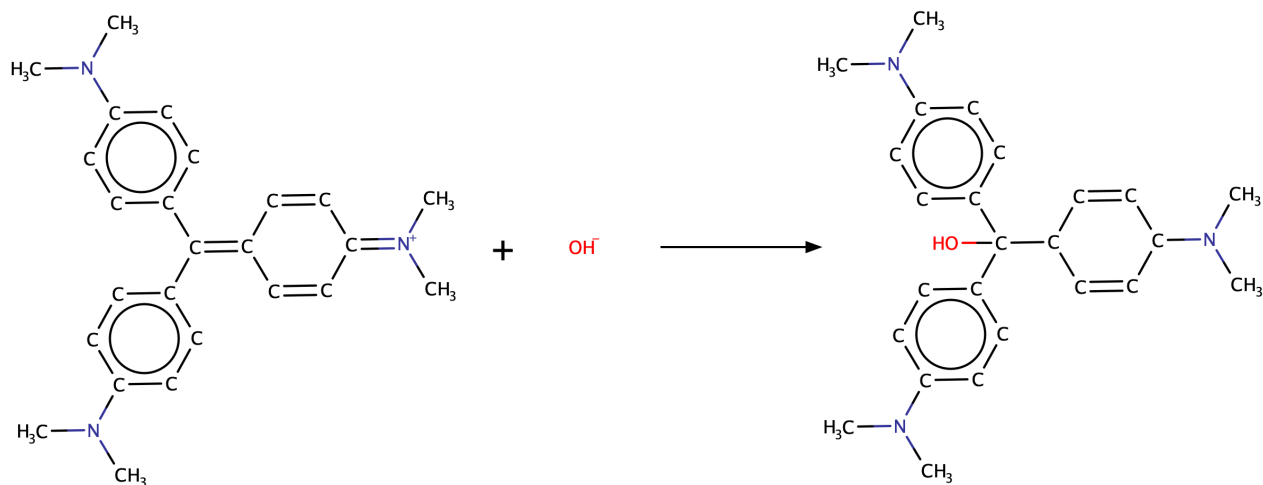
Teori

Krystalviolet er en ionforbindelse, og strukturformlen ses i fig. 1.



Figur 1: Strukturen for krystalviolet tegnet i MarvinSketch

Det ses, at stoffet indeholder over 8 konjugerede dobbeltbindinger, og det må derfor være farvet. Det passer med, at stoffet er violet. Reaktionsskemaet for reaktionen mellem krystalviolet (eller formelt set dens positive ion) og hydroxid ses i fig. 2.



Figur 2: Reaktionsskema for reaktion mellem krystalviolet og hydroxid

Ved reaktionen brydes blandt andet dobbeltbindingen midt i krystalviolets positive ion, så der ikke længere er mindst 8 konjugerede dobbeltbindinger, og produktet er derfor farveløst. Derudover ser vi, at et generelt udtryk for reaktionshastigheden (som er den samme mht. krystalviolet og mht. hydroxid) må være

$$v = k \cdot [\text{krystalviolet}]^x \cdot [\text{OH}^-]^y$$

hvor v er reaktionshastigheden (bemærk at den er ens mht. krystalviolet og mht. hydroxid), k er hastighedskonstanten, og $x, y \in \{z \in \mathbb{Z} : z \geq 0\}$. Vi vil altså gerne bestemme x og y .

Siden vi fra Lambert-Beers lov har, at absorbansen er proportional med den aktuelle stofmængdekonzentration af det farvede stof i en opløsning;

$$A = \varepsilon_{\lambda} \cdot l \cdot [\text{krystalviolet}]$$

så kan vi nemt måle reaktionshastigheden via spektrofotometri. Formindskelsen i absorbans pr. tid betegner vi v^* :

$$\begin{aligned} v^* &= -\frac{dA}{dt} \\ &= -c \cdot \frac{d[\text{krystalviolet}]}{dt} \\ &= c \cdot v \end{aligned}$$

hvor $c = \varepsilon_{\lambda} \cdot l$ er en konstant.

Vi anvender i eksperimentet et stort overskud af hydroxid, så den aktuelle stofmængdekonzentration af hydroxid er nogenlunde konstant under reaktionen. Produktet $k \cdot [\text{OH}^-]^y$ er da konstant, og vi betegner det k_1 . Hastighedsudtrykket bliver så

$$\begin{aligned} v &= k \cdot [\text{OH}^-]^y \cdot [\text{krystalviolet}]^x \\ &= k_1 \cdot [\text{krystalviolet}]^x \end{aligned}$$

I del 2 halveres $[\text{OH}^-]$ ift. del 1, og vi kan da sammenligne de to k_1 'er for at bestemme y .

Apparatur, kemikalier og sikkerhed

Apparatur

- | | | |
|--------------------|--------------------|----------------------|
| • Spektrofotometer | • 2 Pipetter, 1 mL | • 2 bægerglas, 50 mL |
| • Kuvetter | • Pipettesuger | • Plastpipetter |
| • Pipette, 10 mL | • Magnetomrører | |
| • Pipette, 2 mL | • Magnet | • Reagensglas |

Kemikalier

- $2,00 \cdot 10^{-5}$ M krystalviolet, $\text{C}_{25}\text{H}_{30}\text{ClN}_3$
- 0,500 M natriumhydroxid, NaOH

Sikkerhed

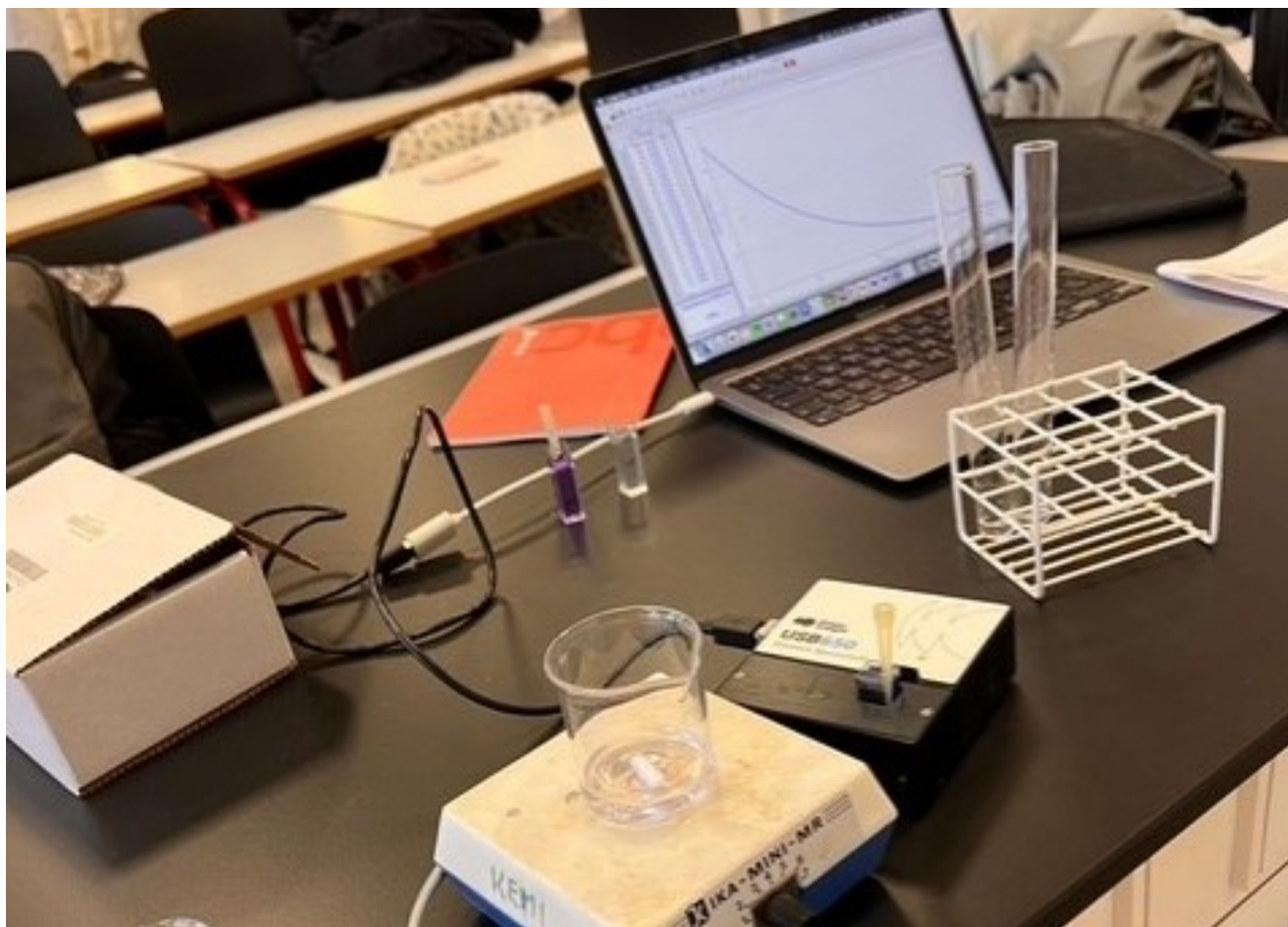
- $2,00 \cdot 10^{-5}$ M krystalviolet er sundhedsskadeligt.
- 0,500 M natriumhydroxid virker ætsende.

Udførelse

Til start tændes spektrofotometeret og kalibreres med demineraliseret vand. Derefter fyldes en kuvette op med $2,00 \cdot 10^{-5}$ M krystalviolet, og et absorptionsspektrum optages. Den bølglængde, hvor absorbansen er maksimal noteres ned. De efterfølgende absorbansmålinger måles ved denne bølglængde.

Del 1

10,0 mL $2,00 \cdot 10^{-5}$ M krystalviolet afpippeteres til et 50 mL bægerglas, hvori en magnet placeres og omrøres med magnetomrøreren. Herefter afpippeteres 2,00 mL 0,500 M natriumhydroxid til et reagensglas. Reagensglassets indhold hældes herefter på én gang over i bægerglasset med opløsningen af krystalviolet. Noget af reaktionsblandingen overføres så hurtigt til en kuvette, hvorefter den placeres i spektrofotometeret og en måling af reaktionsblandings absorptions startes. Opstillingen ses i fig. 3.



Figur 3: Reaktionsblandingen overføres hurtigt til en kuvette, der placeres i spektrofotometeret

Del 2

Del 1 gentages, men hvor 1,00 mL demineraliseret vand og 1,00 mL 0,500 M NaOH afpippeteres til reagensglasset i stedet.

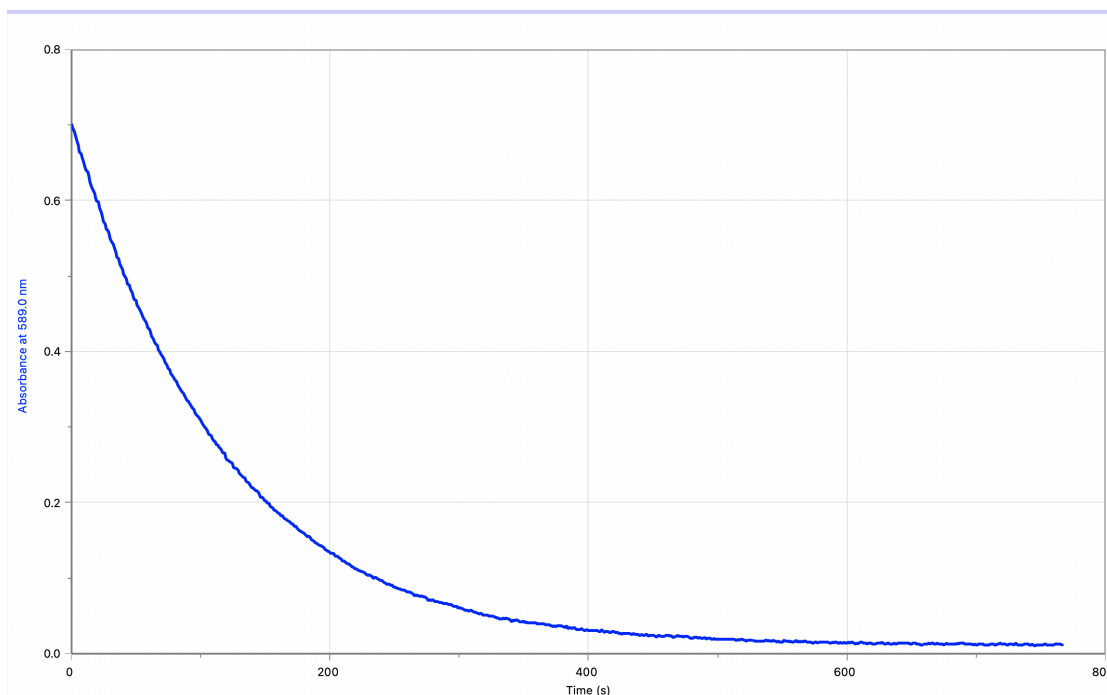
Resultater

Ved det optagne absorptionsspektrum for krystalviolet-opløsningen bestemte vi bølglængden, hvor absorptionsen er maksimal, til at være 589 nm, hvilket fremgår af nedenstående tabel.

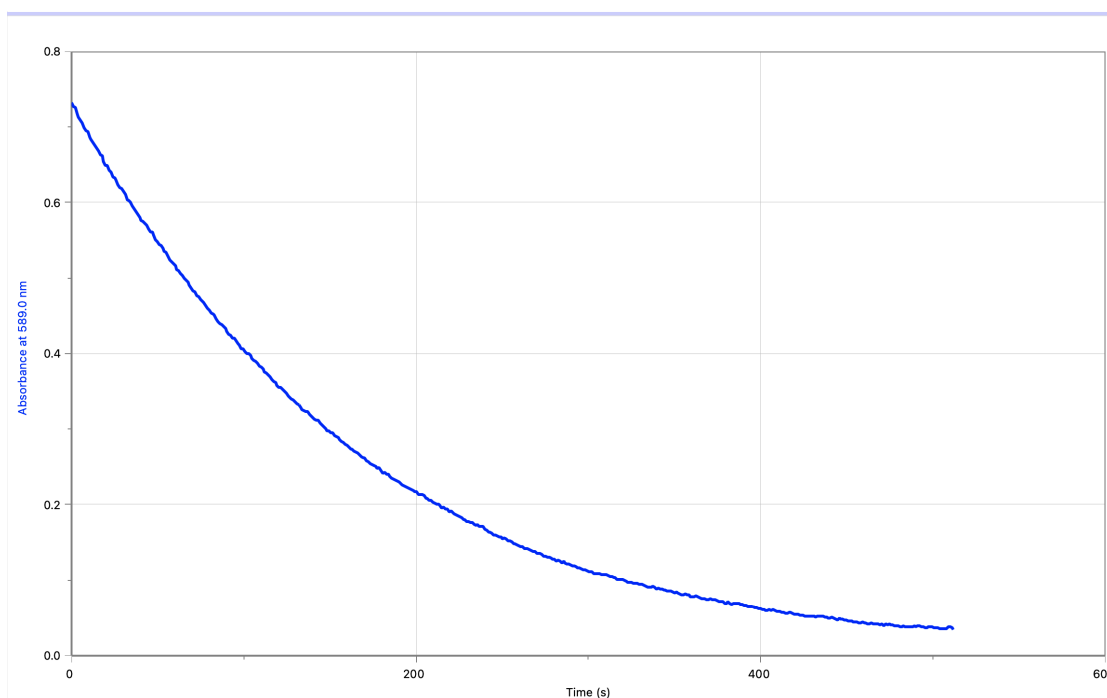
Bølglængde λ , hvor absorptionsen er maksimal/nm
--

589

Måleresultaterne for del 1 og del 2 fylder så meget, at de her udelades, men vedhæftes separat i lectio. Dog ses (t,A) -graferne for del 1 og del 2 i hhv. fig. 4 og fig. 5.



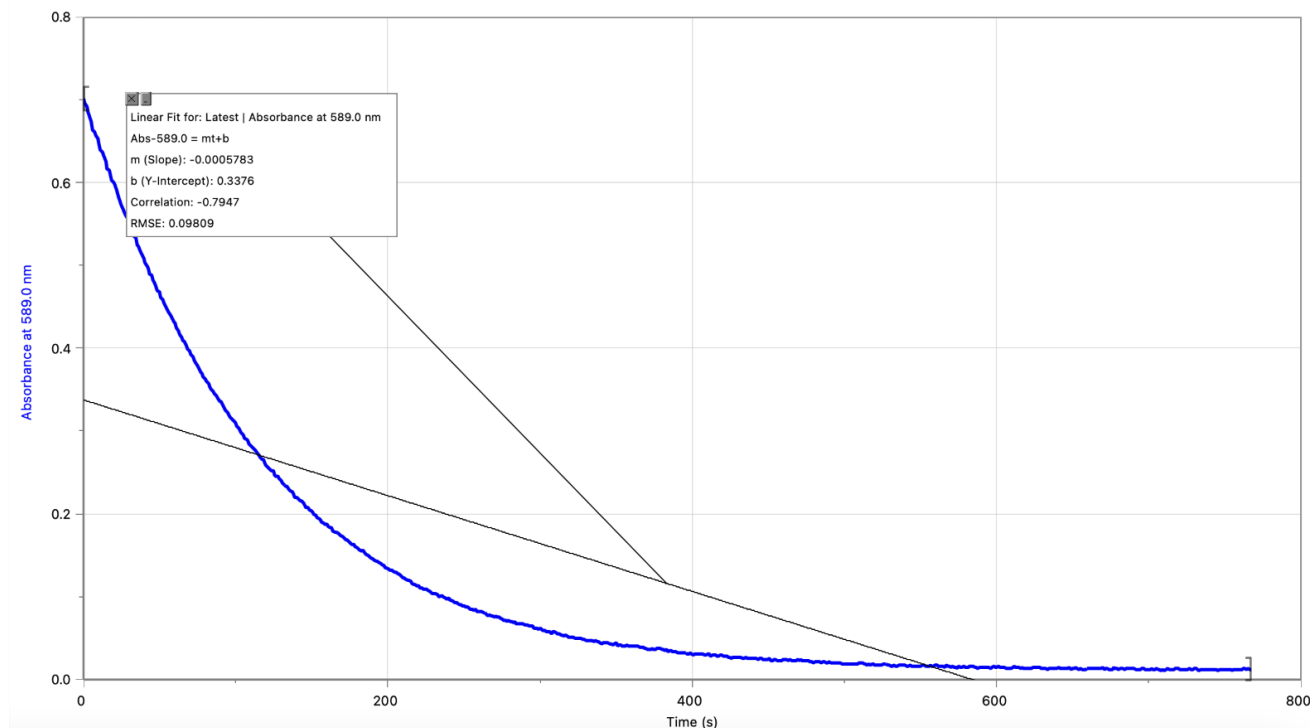
Figur 4: (t,A) -grafen for del 1 tegnet i Logger Pro



Figur 5: (t,A) -grafen for del 2 tegnet i Logger Pro

Efterbehandling og sammenfatning

Vi vil først bestemme reaktionsordenen mht. krystalviolet. Vi starter med at betragte (t, A) -graf for del 1. Hvis reaktionen er af nulte orden mht. krystalviolet, skal målepunkterne tilnærmelsesvist ligge langs en ret linje med negativ hældningskoefficient. En lineær regression laves derfor, hvilket ses i fig. 6. Betragter man afbildningen, ses det, at punkterne ikke følger den lineære sammenhæng, idet målingerne ved start og slut ligger over tendenslinjen, hvor de midterste målinger ligger under tendenslinjen. Reaktionen er altså ikke af nulte orden mht. krystalviolet.

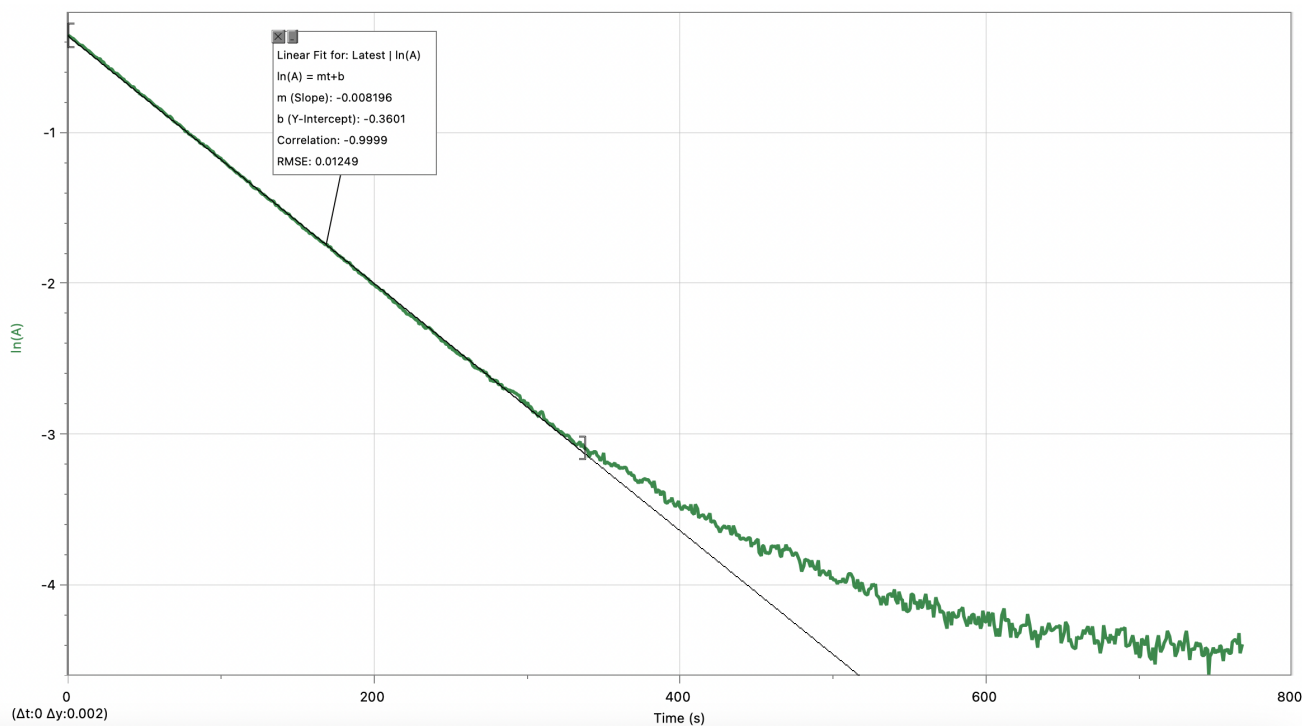


Figur 6: Lineær regression med punkterne på (t, A) -graf for del 1

Vi vil nu undersøge, om reaktionen er af første orden mht. krystalviolet. Hvis reaktionen er af første orden mht. krystalviolet, så gælder der

$$\begin{aligned}
 \ln [\text{krystalviolet}] &= -k_1 \cdot t + \ln [\text{krystalviolet}]_0 \iff \ln \left(\frac{A}{c} \right) = -k_1 \cdot t + \ln \left(\frac{A_0}{c} \right) \\
 &\iff \ln(A) - \ln(c) = -k_1 \cdot t + \ln(A_0) - \ln(c) \\
 &\iff \ln(A) = -k_1 \cdot t + \ln(A_0)
 \end{aligned} \tag{1}$$

hvor $c = \varepsilon_\lambda \cdot l$. Vi har altså vist, at hvis reaktionen er af første orden mht. krystalviolet, så vil punkterne i $(t, \ln(A))$ -graf ligge tilnærmelsesvist på en ret linje. Vi udfører derfor en lineær regression på $(t, \ln(A))$ -graf for del 1, hvilket ses i fig. 7. Målepunkterne sidst i datasættet er ikke medtaget i regressionen, da absorbansen da er så lille, at usikkerheden er meget stor.



Figur 7: Lineær regression på $(t, \ln(A))$ -graf for del 1

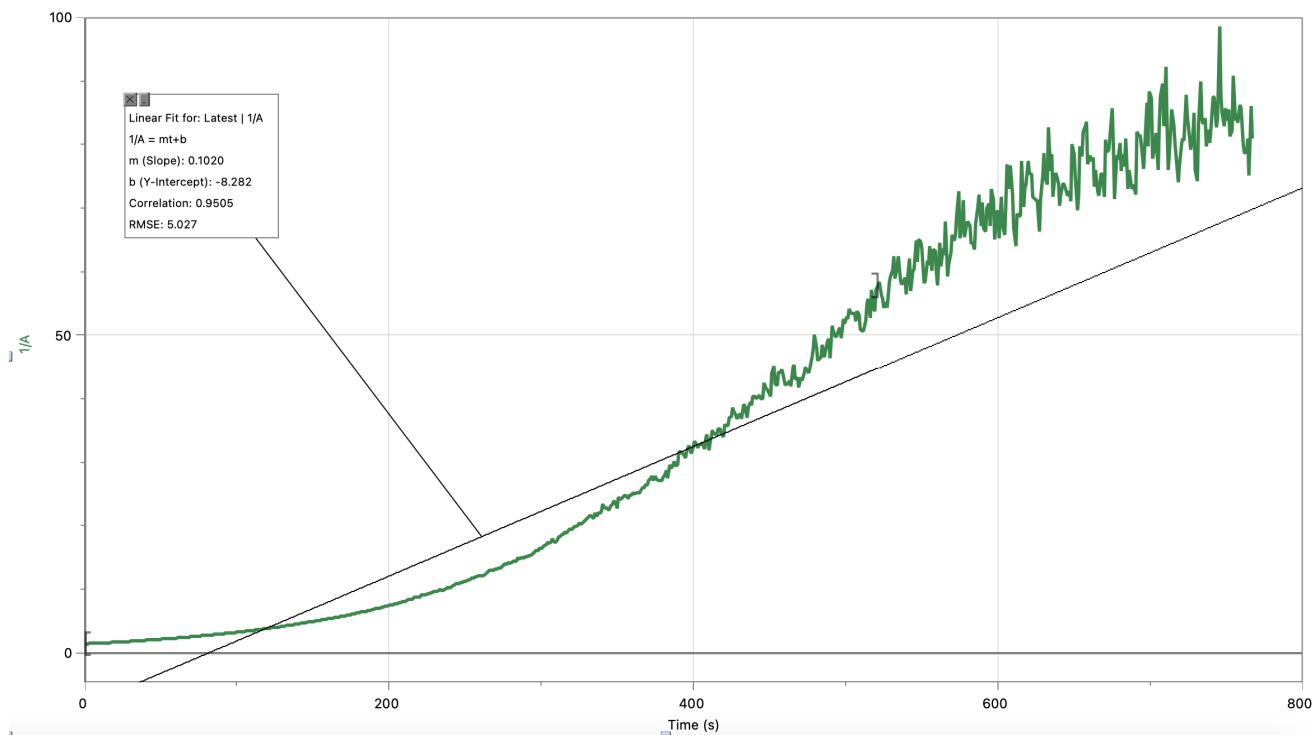
Betragter man afbildningen, ses det, at punkterne i starten næsten perfekt følger den lineære sammenhæng. Det vurderes umiddelbart, at reaktionen er af første orden. Med andre ord har vi bestemt, at

$$x = 1$$

Fra regressionen har vi derudover, at

$$\ln(A) = -0,008196 \text{ s}^{-1} \cdot t - 0,3601 \quad (2)$$

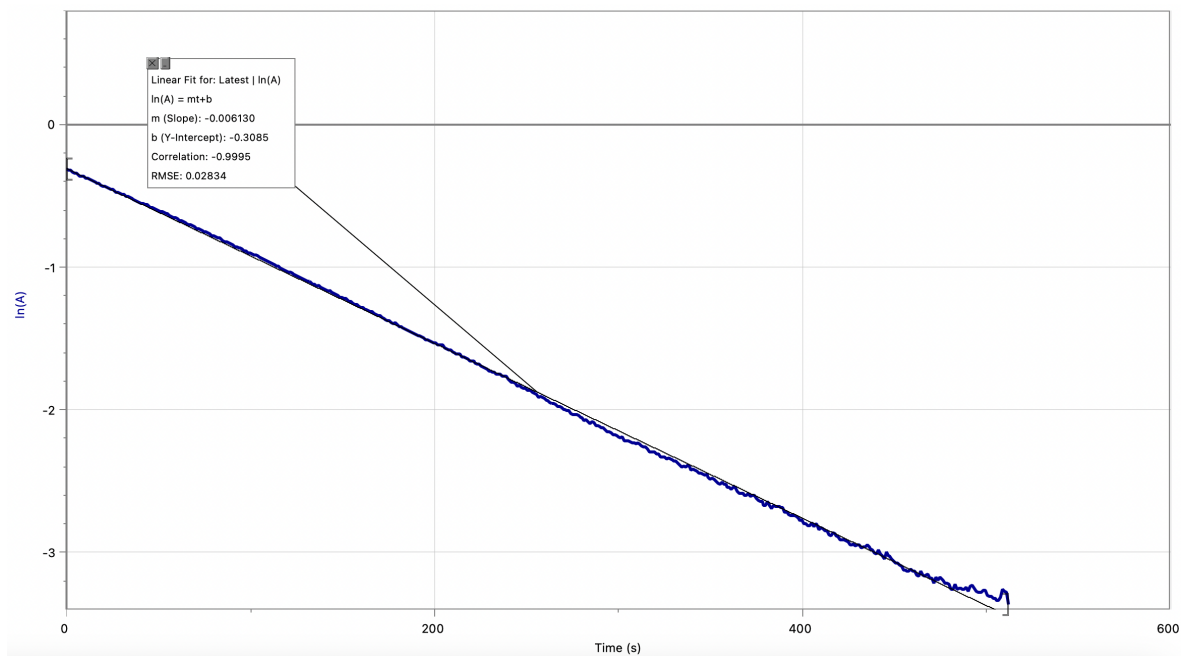
For god ordens skyld undersøger vi også, om reaktionen kunne være af anden orden mht. krystalviolet. Måleresultaterne afbildes da i et $(t, \frac{1}{A})$ -diagram, hvor målepunkterne skal ligge tilnærmelsesvist langs en ret linje med positiv hældningskoefficient, hvis reaktionen altså er af anden orden mht. krystalviolet. En lineær regression laves, hvilket ses i fig. 8.



Figur 8: Lineær regression på $(t, \frac{1}{A})$ -grafen for del 1

Som forventet ligger punkterne ikke på en ret linje, heller ikke når vi ser bort fra de sidste målepunkter. Vi kan altså konkludere, at der er tale om en førsteordensreaktion mht. krystalviolet.

Vi betragter nu $(t, \ln(A))$ -graf for del 2, hvor punkterne også må ligge tilnærmelsesvist på en ret linje, da der jo er tale om en førsteordensreaktion ift. krystalviolet. Vi laver da en lineær regression, hvilket ses i fig. 9.



Figur 9: Lineær regression på $(t, \ln(A))$ -graf for del 2

Det ses, at punkterne ligger tilnærmelsesvist på en ret linje. Fra den lineære regression har vi, at

$$\ln(A) = -0,006130 \text{ s}^{-1} \cdot t - 0,3085$$

Kombinerer vi dette med ligning 1, er det da nemt at se, at

$$k_1(\text{del 2}) = 0,006130 \text{ s}^{-1}$$

Hvis vi ligeledes kombinerer ligning 1 og 2, får vi

$$k_1(\text{del 1}) = 0,008196 \text{ s}^{-1}$$

Vi vil nu bestemme reaktionsordenen mht. hydroxid. Dette gøres ved at finde forholdet mellem $k_1(\text{del 1})$ og $k_1(\text{del 2})$. Teoretisk set har vi nemlig, at

$$\begin{aligned} \frac{k_1(\text{del 2})}{k_1(\text{del 1})} &= \frac{k \cdot \left(\frac{1}{2} \cdot [\text{OH}^-]_1\right)^y}{k \cdot [\text{OH}^-]_1^y} \\ &= \left(\frac{1}{2}\right)^y \end{aligned}$$

hvor $[\text{OH}^-]_1$ er den aktuelle stofmængdekonzentration af hydroxid i del 1. Vi beregner da denne størrelse (y beregnes med log base $\frac{1}{2}$).

$$\begin{aligned} \frac{k_1(\text{del 2})}{k_1(\text{del 1})} &= \frac{0,006130 \text{ s}^{-1}}{0,008196 \text{ s}^{-1}} \\ &= 0,747925817 \\ &\approx \left(\frac{1}{2}\right)^{0,413} \end{aligned}$$

Dette giver imidlertid **ingen mening**, da y burde være et **helt tal**. Den store afvigelse kan skyldes en fejl ved udførelsen af eksperimentet. En opsummerende tabel ses i table 1.

x	y	$k_1(\text{del 1})$	$k_1(\text{del 2})$
1	0,413	$0,00820 \text{ s}^{-1}$	$0,00613 \text{ s}^{-1}$

Tabel 1: Opsummering vigtigste resultater

Det (forkerte) generelle hastighedsudtryk for reaktionen ville da være

$$v = k \cdot [\text{krystalviolet}] \cdot [\text{OH}^-]^{0,413}$$

Til slut beregner vi halveringstiden $T_{\frac{1}{2}}$ for krystalviolet i hhv. del 1 og del 2. Da reaktionsordenen er 1 mht. krystalviolet, så må halveringstiden for krystalviolet i del 1 være

$$\begin{aligned} T_{\frac{1}{2}}(\text{del 1}) &= \frac{\ln(2)}{k_1(\text{del 1})} \\ &= \frac{\ln(2)}{0,008196 \text{ s}^{-1}} \\ &\approx 84,6 \text{ s} \end{aligned}$$

Tilsvarende må halveringstiden for krystalviolet i del 2 være

$$\begin{aligned} T_{\frac{1}{2}}(\text{del 2}) &= \frac{\ln(2)}{k_1(\text{del 2})} \\ &= \frac{\ln(2)}{0,006130 \text{ s}^{-1}} \\ &\approx 113 \text{ s} \end{aligned}$$

Halveringstiden i del 2 ville være dobbelt så stor, hvis reaktionen var af første orden mht. hydroxid. Dette er dog ikke tilfældet, da vi ikke har fået y til at være et helt tal.

Mulige fejlkilder

En mulig grund til, at vi ikke har fået y som et helt tal kunne være fejl ved pipette-afmålingerne. Derudover bliver usikkerheden relativt stor til sidst i de to forsøg, da absorbansen bliver meget lille.

Konklusion

Vi har bestemt, at reaktionen er af første orden mht. krystalviolet, men kunne ikke bestemme reaktionsordenen mht. hydroxid, da denne burde være et helt tal. Skulle vi alligevel opskrive et hastighedsudtryk for krystalviolets reaktion med hydroxid ville det være

$$v = k \cdot [\text{krystalviolet}] \cdot [\text{OH}^-]^{0,413}$$