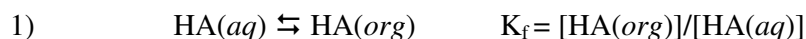


Jämviktsprojekt:

Fettlösliga fenoler.

I laborationen "Enhetsoperationer" studerade du extraktionen av den gula pikrinsyran, 2,4,6-trinitrofenol. Fenoler kan vara toxiska, i synnerhet för vattenlevande varelser, men också för människor. Några exempel på miljöfarliga fenoler är klorfenoler, som är mellanprodukter för tillverkning av ogräsmedel, och nitrofenoler, som är biprodukter vid tillverkning av sprängämnen. Fettlösligheten är av stor betydelse för toxicitet och långsiktig miljöpåverkan, och kan studeras genom att mäta fördelningsjämvikten i ett tvåfasssystem med vatten (*aq*) och ett organiskt lösningsmedel (*org*, oftast 1-oktanol):

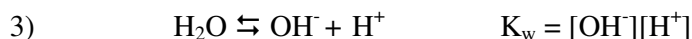


där HA betecknar en fenol och K_f är fördelningskonstanten.

Fettlösligheten mäts ofta som $\log P = \log_{10}(K_f)$. Om ett ämne har $\log P > 3$ klassas det som *bioackumulerbart*, dvs. det finns risk att ämnet anrikas i organismernas fettvävnad, mer ju högre upp i näringskedjan man kommer. För ämnen som är svaga syror eller baser kompliceras mätningar av fettlöslighet av att protolysjämvikter i vattenfasen producerar icke fettlösliga joner. Fenoler är svaga syror och protolyseras i vatten:



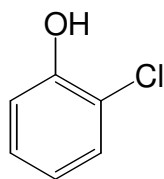
Jonerna A^- och H^+ övergår inte i oktanolfasen. Eftersom fenoler i allmänhet är mycket svaga syror, måste man ta hänsyn till vattnets autoprotolys:



$$-\log_{10}(K_w) = \text{p}K_w = 14.00 \text{ vid } 25^\circ\text{C}.$$

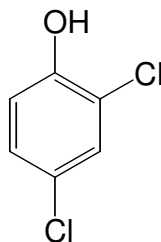
Uppgift: Beräkna med Newtons metod, för var och en av fenolerna nedan lösta i rent vatten i en halt av 10 ppm (w/w) vid 25°C , följande värden:

1. pH i den rena vattenlösningen.
2. pH vid jämvikt efter tillsats av 1 vol% 1-oktanol.
3. Fördelningen på $\text{HA}(aq)$, A^- och $\text{HA}(org)$ i % av totalmängden av fenol i 2.



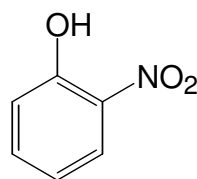
2-klorofenol

pKa 8.48
logP 2.15



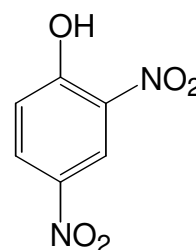
2,4-diklorofenol

7.89
3.23



2-nitrofenol

7.23
1.76



2,4-dinitrofenol

4.09
1.67

Matlab-beräkningar.

Jämviktsekvationerna leder till ett system av algebraiska ekvationer

$$f(x)=0$$

där vektorn x innehåller de okända koncentrationerna. Vi löser ekvationssystemet med Newtons metod. I varje steg av algoritmen beräknar vi residualen

$$b=f(x)$$

och Jacobimatrisen

$$B=Df(x),$$

löser det linjäriserade ekvationssystemet

$$Bh=b$$

och uppdaterar

$$x=x-h.$$

Matlabfunktionen `Newtonprotolys.m` med anropet

```
[b, B, x2, pH]=Newtonprotolys(x1)
```

gör ett steg av Newtons metod. Läs den så att du förstår den. Kör den så här:

```
>> x=[1;1;1;1]
>> [b, B, x, pH]=Newtonprotolys(x)
```

och upprepa tills den konvergerar. Om man anropar funktionen med endast en returvariabel:

```
b=Newtonprotolys(x)
```

levererar den endast residualen $b=f(x)$. Det betyder att vi kan också använda funktionen som indata till vårt egna program `newton.m` så här:

```
>> x=newton(@Newtonprotolys, x, 1e-6)
```

Använd `Newtonprotolys.m` för att lösa uppgift 1. Redigera filen för olika värden på konstanterna.

För uppgift 2 och 3 behöver du redigera filen och lägga in en jämviktsekvation till.