

Experimentelle Bestimmungen von Verteilungskoeffizienten in Octanol-Wasser-Systemen

Tamara Donner
Kantonsschule Kollegium Schwyz

Ziel: Bestimmung von Verteilungskoeffizienten bestimmter Carbonsäuren bzw. Amine in Octanol-Wasser-Systemen; Untersuchung des mathematischen Zusammenhangs zwischen $\log K_{ow}$ und Kettenlänge.

Ein Verteilungskoeffizient ($\log K_{ow}$) im Octanol-Wasser-System beschreibt einen Spezialfall eines chemischen Gleichgewichts. In meinem Experiment wurden die Konzentrationsverhältnisse von Substanzen zwischen der organischen Octanolphase und der wässrigen Phase bestimmt. Der n-Octanol-Wasser-Verteilungskoeffizient der verschiedenen Substanzen spielt eine grosse Rolle in der Toxikologie sowie in der Pharmakologie (Arzneimittelforschung).



Die verwendeten Substanzen waren folgende Carbonsäuren und Amine:

Die aliphatischen Carbonsäuren:

- Ameisensäure (HCOOH)
- Essigsäure (CH_3COOH)
- Propansäure ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COOH}$)
- Valeriansäure ($\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_2$)

Die aromatischen Carbonsäuren:

- Salicylsäure ($\text{C}_7\text{H}_6\text{O}_3$)
- Acetylsalicylsäure ($\text{C}_9\text{H}_8\text{O}_4$)

Die Amine:

- Ethylamin ($\text{C}_2\text{H}_7\text{N}$)
- Pentylamin ($\text{C}_5\text{H}_{13}\text{N}$)

Zur Bestimmung der Verteilungskoeffizienten der verwendeten Substanzen wurde folgende allgemeine Vorgehensweise angewendet:

1. Die 1-M bzw. 0,01-M Lösungen wurden hergestellt.
2. Pro Substanz wurden 3 Ansätze mit 100 ml der hergestellten Lösung und 100 ml Octanol vermischt und anschliessend ca. 14 h mit dem Magnet rührer gerührt.
3. Nun wurden die Gemische in die Scheidetrichter umgefüllt und für die Phasentrennung ca. 6 h stengelassen.
4. Die organische Phase und die wässrige Phase wurden getrennt, um anschliessend durch Titration (Carbonsäuren) bzw. Ionenchromatografie* (Amine) die Konzentration in der wässrigen Phase zu bestimmen.

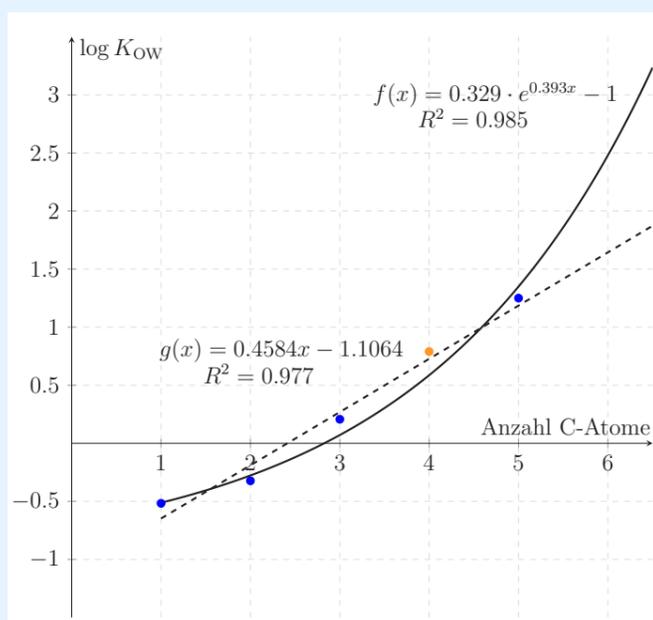
Wichtige Aussagen:

$\log K_{ow} > 0$ = grössere Fettlöslichkeit
 $\log K_{ow} < 0$ = grössere Wasserlöslichkeit

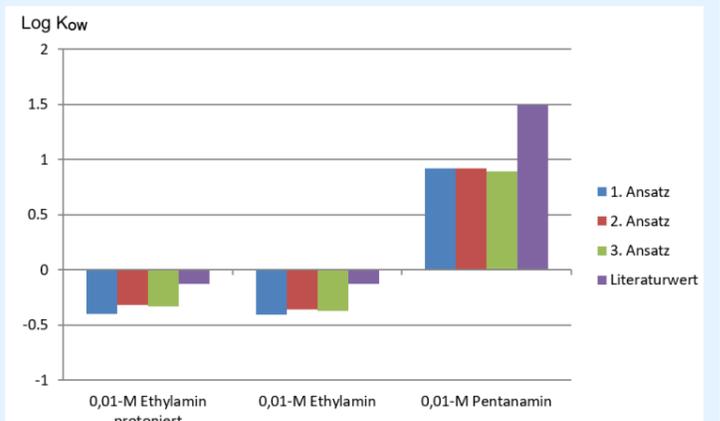
Je länger die C-Kette bei den aliphatischen Carbonsäure ist, desto grösser ist der Verteilungskoeffizient.

Der Verteilungskoeffizient wurde mit der folgenden Formel berechnet:

$\text{Log } K_{ow} = \log (\text{Konzentration der Substanz in der octanolreichen Phase}) / (\text{Konzentration der Substanz in der wässrigen Phase})$



An die Daten der aliphatischen Carbonsäuren (blaue Punkte) lässt sich sowohl eine lineare als auch eine Exponentialfunktion mit jeweils gutem Bestimmtheitswert anpassen, wobei die Übereinstimmung beim exponentiellen Fit noch etwas besser ist. Generell liegen alle bestimmten K_{ow} im Vergleich mit (allerdings berechneten) Literaturdaten (U.S. National Library of Medicine) systematisch tiefer. Die lineare Funktion liefert zwar den besseren Vorhersagewert für die Butansäure (orange), was jedoch aufgrund der systematischen Abweichungen zu den Literaturwerten keine klare Schlussfolgerung zugunsten eines linearen Zusammenhangs zwischen Kettenlänge und K_{ow} erlaubt.



Unerwartete Probleme bei den Analyse-Ergebnissen der IC verunmöglichten bei den Aminen eine weitergehende, mathematisch sinnvolle Auswertung der Daten.

*Ein herzlicher Dank geht an das Berzelius Projekt der PH St. Gallen.

Quellenverzeichnis: Goss Kai-Uwe(2019): Oktanol-Wasser-Verteilungskoeffizient: <https://www.chemie-schule.de/KnowHow/Oktanol-Wasser-Verteilungskoeffizient>, Stand: 18.06.2019