

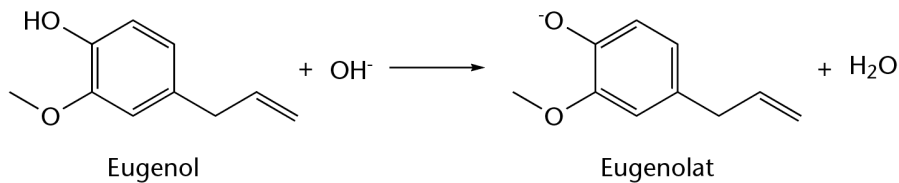


Bestemmelse af log P for eugenol

Eugenol findes i fx nelliker og anvendes som smertelindrende stof bl.a. mod tandpine, se figur 1. Eugenol virker ved at hæmme spændingsafhængige calcium- og natrium ionkanaler.

Log P for eugenol kan bestemmes ved at blande en bestemt mængde af eugenol eller kryddernellikeolie med hhv. octan-1-ol og vand hvorved eugenol vil opløses i hhv. den upolære og polære fase.

Eugenol tilhører stofklassen phenol, som er en meget svag syre med en pK_s på 9,94. Det kan derfor reagere med en stærk base som NaOH og omdannes til dens korresponderende base, eugenolat, som er en middelstærk base:



Figur 1. Kryddernellikeolie og nelliker indeholder eugenol. (Shutterstock.com/ Halil ibrahim mescioglu)

Ved efterfølgende titrering med en stærk syre som HCl vil ses to ækvivalenspunkter. Den overskydende OH⁻ reagerer så den fjernes, indtil 1. ækvivalenspunkt nås. Mellem 1. og 2. ækvivalenspunkt reagerer HCl med eugenolat så der igen dannes eugenol og ved 2. ækvivalenspunkt er alt eugenolat omdannet til eugenol.

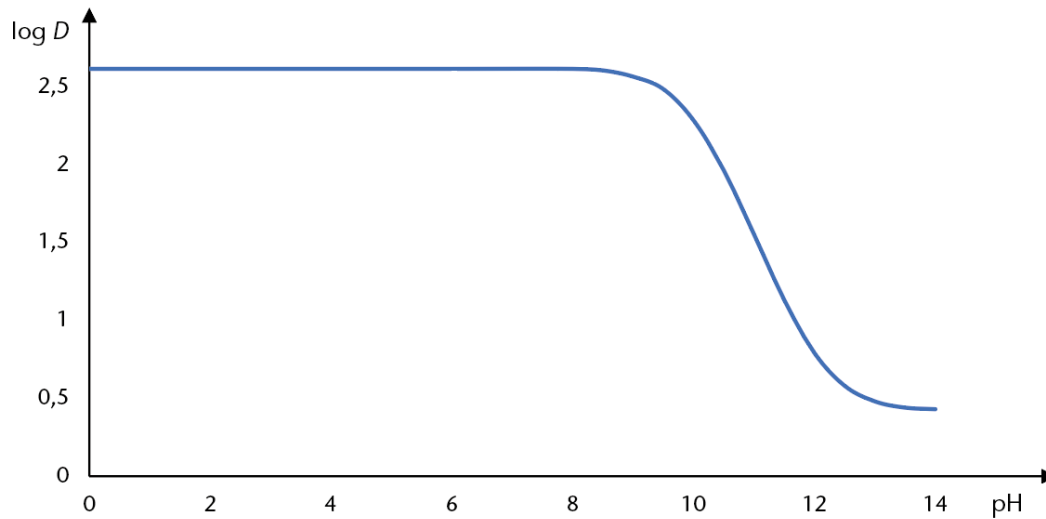
Fordelingskonstanten P beregnes som:

$$P = \frac{n_{\text{eugenol}}(\text{octan-1-ol})}{n_{\text{eugenol}}(\text{aq})}$$

For eugenol er log $P = 2,49$.

Forberedelse til eksperimentet

1. Tegn en skitse af titrerkurven.
2. Hvad viser værdien af P om opløseligheden af eugenol i hhv. octan-1-ol og vand?
3. Forklar hvorfor log P er lig med log D for eugenol indtil omkring pH 9. Inddrag figur 2.

Figur 2. Sammenhæng mellem log D og pH for eugenol.

Materialer

- Eugenol eller kryddernellikeolie (indeholder ca. 85 % eugenol)
- Octan-1-ol
- Natriumhydroxid (0,010 M) – NaOH(aq)
- Saltsyre (0,010 M) – HCl(aq)
- 1 stk. skilletragt med prop (250 mL)
- 1 stk. konisk kolbe (250 mL) med slib og prop
- 3 stk. måleglas (100, 100 og 20 mL)
- Magnetomrører med magnet
- 2 stk. bægerglas (250 og 100 mL)
- 1 stk. fuldpipette (25 mL) og pipettesuger
- Stativ med klemmer
- Burette
- Lille tragt
- pH-elektrode med tilhørende dataopsamlingsudstyr
- Puffere til kalibrering

Risici og sikkerhed

Eksperimentet udføres i stinkskab, og der bæres sikkerhedsbriller, kittel og handsker.

Undersøg H- og P-sætninger for octan-1-ol.



Fremgangsmåde

1. Afvej præcist ca. 5,0 g eugenol eller 6,0 g kryddernellikeolie og notér massen i tabel 1.
2. Overfør den afvejede eugenol til en 250 mL konisk kolbe sammen med 100 mL demineraliseret vand og 100 mL octan-1-ol.
3. Tilsæt en magnet til blandingen og sæt en prop på. Lad blandingen omrøre i ca. 30 min.
4. Hæld blandingen op i en skilletragt og lad det stå i 5-10 min for at faserne skilles ad.
5. Tap nu vandfasen ud i et 250 mL bægerglas.
6. Overfør med fuldpipette 25,0 mL af vandfasen til et 100 mL bægerglas og tilsæt 20 mL 0,010 M NaOH(aq). Opløsningen bliver svagt gul.
7. Fyld en burette med 0,010 M HCl(aq).
8. Kalibrér en pH-elektrode i LoggerPro.
9. Tænd for magnetomrøringen og mål pH i opløsningen.
10. Tilsæt nu 0,5 mL 0,010 M HCl(aq) ad gangen.
11. Fortsæt titreringen indtil der er tilsat 24 mL i alt. Læg mærke til et farveskift fra svagt gult til farveløst.
12. Gentag evt. titreringen.

Resultater

m(eugenol/kryddernellikeolie) (g)

Tabel 1.

Efterbehandling

1. Aflæs de to ækvivalenspunkter på titrercurven og notér volumen i tabel 2.

	1. ækvivalenspunkt	2. ækvivalenspunkt
V(HCl)		
n(HCl)		

Tabel 2.

2. Beregn den tilsatte stofmængde af HCl i 1. og 2.ækvivalenspunkt. Notér i tabel 2.
3. Beregn stofmængden af eugenol i 25 mL vandfase ud fra forskellen på de to beregnede stofmængder. Notér i tabel 3.
4. Beregn stofmængden af eugenol i hele vandfasen på 100 mL. Notér i tabel 3.
5. Beregn stofmængden af eugenol i den afvejede mængde og herefter stofmængden af eugenol i octan-1-ol. $M(\text{eugenol}) = 164,2 \text{ g/mol}$. Notér i tabel 3.
6. Beregn P og herefter log P . Notér i tabel 3.



EKSPERIMENT

Bestemmelse af log P for eugenol

Side 4 af 4

n(eugenol) (25 mL vandfase)	n(eugenol) (100 mL vandfase)	n(eugenol) (afvejnet eugenol)	n(eugenol) (octan-1-ol)	P	Log P

Tabel 3.

7. Sammenlign den fundne log P med tabelværdien, og angiv mulige fejlkilder i forsøget.
8. Aflæs pK_s for eugenol på titrerkurven og sammenlign med tabelværdien. Notér i tabel 4.
9. Hvordan passer farveskiftet fra gul til farveløst med den aflæste pK_s ?

pK_s (eugenol)	pK_s (eugenol) – tabelværdi

Tabel 4.

Konklusion

Lav en konklusion hvor der tages stilling til om eksperimentets formål er opfyldt.