

Indholdsfortegnelse

Beregning af en opløsnings pH-værdi	2
<i>pH værdi i en opløsning af en stærk syre.....</i>	<i>3</i>
<i>pH værdi i en opløsning af en stærk base.....</i>	<i>3</i>
<i>pH værdi i en opløsning af en ikke-stærk syre</i>	<i>4</i>
<i>pH værdi i en opløsning af en ikke-stærk base</i>	<i>5</i>
<i>pH-værdi i en pufferopløsning</i>	<i>6</i>
Valg af indikator ved kolorimetrisk syre-base titrering	8
Bjerrumdiagram	8
Oversigt over beregning af pH ved syre-basetitrering.....	10
<i>Eksempler på pH-beregninger ved titrerkurver</i>	<i>10</i>
Før der tilsættes NaOH (det vil sige før titreringen begynder)	11
Efter tilsætning af 5,00 mL natriumhydroxid	11
Efter tilsætning af 20,00 mL natriumhydroxid	12
Efter tilsætning af 20,05 mL natriumhydroxid	13
Formler til beregning af pH-værdi.....	15
Fra Databog Fysik Kemi, 11. udgave, 4. oplag, 2012, side 34	17

Beregning af en opløsnings pH-værdi

Ved beregning af en opløsnings pH-værdi, også kaldet opløsningens surhedsgrad, skal man først afgøre:

1. Hvilken type opløsning, skal der beregnes pH for?

Der skelnes mellem følgende to situationer:

- Den vandige opløsning indeholder udelukkende en syre eller en base.
- Den vandige opløsning indeholder en blanding af en syre og dens korresponderende base (pufferopløsning).

Hvis man har tilfælde a, skal man herefter afgøre:

2. Hvis man har en vandig opløsning af en syre:

Indeholder den vandige opløsning en stærk syre eller en ikke-stærk syre?

- Hvis $pK_s < 0$, er syren stærk. Gå til afsnittet "pH værdi i en opløsning af en stærk syre", på side 3.
Vigtige stærke syrer er: saltsyre (HCl), svovlsyre (H₂SO₄) og salpetersyre (HNO₃).
- Hvis $pK_s > 0$, er syren ikke-stærk. Gå til afsnittet "pH værdi i en opløsning af en ikke-stærk syre", på side 4.

Tilsvarende hvis man har en vandig opløsning af en base:

- Hvis $pK_b < 0$, er basen stærk. Gå til afsnittet "pH værdi i en opløsning af en stærk base", på side 3.
Vigtige stærke baser er: oxid (O²⁻) og hydroxid (HO⁻ eller OH⁻).
- Hvis $pK_b > 0$, er basen ikke-stærk. Gå til afsnittet "pH værdi i en opløsning af en ikke-stærk base", på side 5.

Hvis man har tilfælde b:

3. Gå til afsnittet "pH-værdi i en pufferopløsning", på side 6.

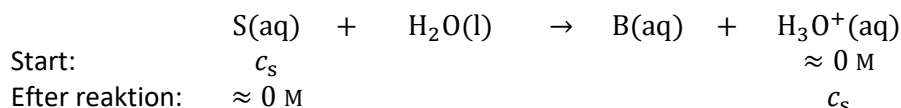
Når typen af opløsning er fastagt, kan man afgøre hvilke formler og eventuelle reaktionsskemaer, som kan opskrives. Alt dette gøres for at analysere situationen og gennemføre diverse beregninger. Man står herefter tilbage med en matematisk model til at beregne pH-værdien ud fra. Beregninger vil give mulige løsninger, som herefter skal vurderes i en kemisk sammenhæng. Helt generelt gælder, at når man har udført en matematisk korrekt beregning af pH-værdien, så **vurderer man altid til sidst om resultatet er meningsfuldt**. Dette gøres ved at forholde sig til: En syre opløst i vand vil altid give en pH-værdi, der er mindre end 7 (kan være tæt på 7), og en base opløst i vand vil altid give en pH-værdi, der er større end 7 (kan være tæt på 7). Hvis man fx beregner en pH-værdi for en opløsning af en syre, som bliver større end 7, skal man vurdere om, der er en fejl i beregningerne, eller om der er en forudsætning for brug af diverse formler, som ikke er overholdt (fx hvis koncentrationen af syre er meget lille). Tilsvarende for baser, hvor opløsningens pH-værdi dog skal være større end 7.

pH værdi i en opløsning af en stærk syre

Hvis stofmængdekonzentrationen af en stærk syre er større end $1 \cdot 10^{-6}$ M, og syren er en monohydron syre¹ (eller kan antages at kunne betragtes som en sådan), så kan pH-værdien beregnes ved brug af formelen²

$$\text{pH} = -\log(c_s)$$

Argumentet for formelen er, at reaktionen mellem stærk syre og vand vil være fuldstændig forskudt mod højre, og derfor vil stofmængdekonzentrationen af oxonium svare til den formelle stofmængdekonzentration af stærk syre.



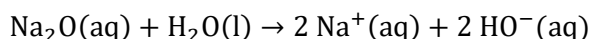
Eksempel: Beregn pH i en opløsning af 0,12 M HCl(aq). Saltsyre er en stærk syre (da $\text{p}K_s < 0$) og den formelle stofmængdekonzentration er større end $1 \cdot 10^{-6}$ M. Derfor kan surhedsgraden beregnes ved:

$$\text{pH} = -\log(c_s) = -\log(0,12) = 0,9208$$

I en opløsning af 0,12 M HCl beregnes pH-værdien til 0,92.

pH værdi i en opløsning af en stærk base

Det forudsættes, at stofmængdekonzentrationen af stærk base er større end $1 \cdot 10^{-6}$ M i det følgende. Skal pH-værdien beregnes, bestemmes først hvor stor den aktuelle stofmængdekonzentration af hydroxid ($[\text{HO}^-]$) bliver i opløsningen. Fx vil saltet natrium(1+)oxid, Na_2O , danne to hydroxid på grund af reaktion med vand:



Dernæst beregnes størrelsen pOH ³

$$\text{pOH} = -\log([\text{HO}^-])$$

Herefter benyttes følgende formel for sammenhængen mellem pH og pOH (tallet 14,00 gælder ved 25 °C):

$$\text{pH} + \text{pOH} = 14,00$$

Argumentet for metoden svarer til beregning af pH i en opløsning af stærk syre.

Eksempel: Beregn pH i en opløsning af 0,12 M NaOH.

Saltet natriumhydroxid er let opløseligt og vil i vandig opløsning give de to ioner: Na^+ og HO^- . Den aktuelle stofmængdekonzentration af hydroxid vil derfor svare til den formelle stofmængdekonzentration af

¹ Monohydron syre betyder, at syren kun kan afgive en H^+ . I ældre kemibøger kaldes dette for en monoprot syre.

² Formelt er $\text{pH} = -\log([\text{H}_3\text{O}^+]/\text{M})$ eller her $\text{pH} = -\log(c_s/\text{M})$. Baggrunden er, at man kun kan beregne logaritmen til et tal, ikke til et tal med en enhed. Derfor "fjernes" enheden ved division med M. For ikke at gøre formlerne unødigt komplekse i deres udseende, så ses bort fra dette i denne note.

³ Udtrykket kan også opskrives ved: $\text{pOH} = -\log([\text{OH}^-])$. Der er ingen forskel i beregningen.

natriumhydroxid, det vil sige $[\text{HO}^-] = 0,12 \text{ M}$. Først udregnes pOH og dernæst pH ved brug af ovenstående formler:

$$\text{pOH} = -\log([\text{HO}^-]) = -\log(0,12) = 0,9208$$

$$\text{pH} + \text{pOH} = 14,00$$

$$\Updownarrow$$

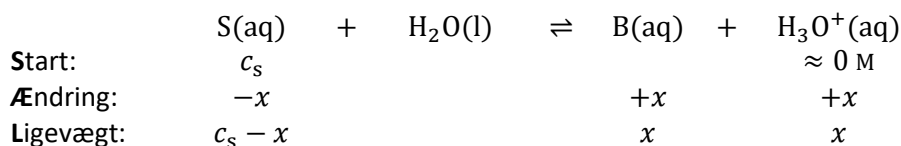
$$\text{pH} = 14,00 - \text{pOH}$$

$$\text{pH} = 14,00 - 0,9208 = 13,0792$$

I en opløsning af 0,12 M NaOH er surhedsgraden beregnet til pH værdien 13,08.

pH værdi i en opløsning af en ikke-stærk syre

For en ikke-stærk syre (S) vil der indstille sig en kemisk ligevægt, hvor B angiver den korresponderende base til syren S:



Størrelsen $c_s - x$ fremkommer, fordi der gælder følgende: Når et S reagerer med et vandmolekyle, vil der dannes et B. Derfor vil summen af stofmængden af S og B være konstant, hvilket betyder at summen af stofmængdekonzentrationerne af S og B hele tiden vil være lig med c_s . Det vil sige:

$$c_s = [\text{S}] + [\text{B}] \Leftrightarrow [\text{S}] = c_s - [\text{B}]$$

Tilsvarende vil der også være lige store stofmængder af B og oxonium, da disse dannes i forholdet 1:1, dvs.

$$[\text{B}] = [\text{H}_3\text{O}^+]$$

Ved anvendelse af ligevægtsloven for kemisk ligevægt $Y = K_s$ (hvor K_s er styrkekonstanten for syren) fås:

$$K_s = \frac{[\text{B}] \cdot [\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{S}]} = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+] \cdot [\text{H}_3\text{O}^+]}{c_s - [\text{H}_3\text{O}^+]}$$

$$K_s = \frac{x^2}{c_s - x}$$

Ved blandt andet at bruge ligevægtsloven har vi fået opstillet en matematisk ligning, som kan løses. Der er tale om en andengradsligning, og derfor vil der ofte være to løsninger. Dette giver normalt ikke et problem for kemiske systemer, som her ved beregning af pH. Som regel vil den ene af løsningerne nemt kunne afvises som irrelevant, fx hvis x er negativ (vi kan jo ikke have en negativ stofmængdekonzentration af oxonium).

For ikke-stærke syrer er metoden til beregning af pH i en opløsning derfor omsat til løsning af ovenstående matematiske ligning. Løsningen giver x som er lig med $[\text{H}_3\text{O}^+]$ og for at bestemme pH benyttes herefter definitionen af pH (formel (2) i oversigten på side 15).

Sommetider er K_s ikke opgivet i en opgave, men i stedet for er opgivet syrens styrkeeksponent, pK_s . Er dette tilfældet beregnes først K_s ud fra formelen (11) i oversigten på side på side 15.

Eksempel: Beregn pH i en opløsning af 0,12 M CH_3COOH . Ethansyre er en ikke-stærk syre med en pK_s værdi på 4,76 (en såkaldt svag syre, da pK_s værdien er større end 4). Det vil sige $K_s = 10^{-pK_s}$ M. Derfor kan opstilles følgende ligning ud fra ligevægtsloven:

$$K_s = \frac{x^2}{c_s - x}$$

$$10^{-4,76} \text{ M} = \frac{x^2}{0,12 \text{ M} - x}$$



Ligningen løses for x vha. CAS-værktøjet WordMat.

$$x = -0,001452793 \text{ M} \quad \vee \quad x = 0,001435415 \text{ M}$$

Her kan bruges et andet CAS-værktøj, fx Maple eller TI-Nspire og dets solve-funktion. Da x skal være større end nul, bliver stofmængdekonzentrationen af oxonium lig med: $[\text{H}_3\text{O}^+] = 0,0014 \text{ M}$. pH-værdien beregnes herefter ved brug af formel (2):

$$\text{pH} = -\log(0,001435415) = 2,843023$$

I en opløsning af 0,12 M CH_3COOH er pH-værdien beregnet til 2,84.

pH værdi i en opløsning af en ikke-stærk base

Basen B er en ikke-stærk base. Udgangspunktet er følgende:

	B(aq)	+	$\text{H}_2\text{O(l)}$	$\rightleftharpoons$	S(aq)	+	$\text{HO}^-(\text{aq})$
Start:	c_b						$\approx 0 \text{ M}$
Ændring:	$-x$				$+x$		$+x$
Ligevægt:	$c_b - x$				x		x

Metoden svarer til beregningen for ikke-stærk syre, men det er ikke oxonium, som bestemmes ved løsning af den opstillede ligningen, men den aktuelle stofmængdekonzentration af hydroxid.

$$K_b = \frac{[\text{S}] \cdot [\text{HO}^-]}{[\text{B}]} \Rightarrow K_b = \frac{[\text{S}] \cdot [\text{HO}^-]}{c_b - [\text{S}]} \Rightarrow K_b = \frac{[\text{HO}^-] \cdot [\text{HO}^-]}{c_b - [\text{HO}^-]}$$

$$K_b = \frac{x^2}{c_b - x}$$

Det er $[\text{HO}^-]$, som beregnes i ovenstående. Derfor skal formlerne (4) og (6) i oversigten på side på side 15 benyttes efterfølgende. Hvis ikke K_b eller pK_b er opgivet, men i stedet K_s eller pK_s , kan formlerne (9) og (14) benyttes til at bestemme K_b eller pK_b .

Eksempel: Beregn pH i en opløsning af 0,12 M CH_3COONa . Ionen ethanoat (CH_3COO^-) er den korresponderende base til ethansyre. Derfor bliver pK_b lig med: $pK_b = 14,00 - 4,76 = 9,24$. Ethanoat er en ikke-stærk base (faktisk en svag base, da pK_b er større end 4), og derfor kan surhedsgraden bestemmes ved løsning af (benytter CAS lommeregnerens solve-funktion):

$$K_b = \frac{x^2}{c_b - x} \Rightarrow 10^{-9,24} \text{ M} = \frac{x^2}{0,12 \text{ M} - x}$$



Ligningen løses for x vha. CAS-værktøjet WordMat.

$$x = 8,309513 \cdot 10^{-6} \text{ M} \quad \vee \quad x = -8,310089 \cdot 10^{-6} \text{ M}$$

Da stofmængdekonzentrationen af hydroxid skal være positiv, er $[\text{HO}^-]$ 0,0000083095 M. pH-værdien beregnes herefter ved at benytte formlen (4) og (6) på side 15 i oversigten:

$$\begin{aligned} \text{pOH} &= -\log(0,0000083095) = 5,080425 \\ \text{pH} + \text{pOH} &= 14,00 \Rightarrow \text{pH} = 14,00 - 5,080425 = 8,919575 \end{aligned}$$

I en opløsning af 0,12 M CH_3COONa er pH-værdien beregnet til 8,92.

pH-værdi i en pufferopløsning

Ved blanding af en ikke-stærk syre og dets korresponderende base kan dannes et puffersystem. Egenskaber ved et sådant puffersystem er, at tilsætning af (mindre) mængder af base eller syre kun i mindre grad vil påvirke blandingens pH-værdi; tilsættes en stærk syre til en pufferopløsning, vil puffersystemets base omdannes til dets korresponderende syre, og tilsættes en stærk base til en pufferopløsning, vil puffersystemets syre omdannes til dets korresponderende base. Men da både puffersystemets syre og dets korresponderende base er ikke-stærke, vil ændringen i blandingens pH-værdi blive mindre end hvis opløsningen udelukkende indeholdt en stærk syre eller base.

Et givent puffersystem er mest effektivt omkring dets syres $\text{p}K_s$ -værdi. Pufferområdet er typisk i intervallet $[\text{p}K_s - 1; \text{p}K_s + 1]$. Fx ethansyres $\text{p}K_s$ -værdi er 4,76, og derfor vil et puffersystem bestående af ethansyre og ethanoat (korresponderende base til ethansyre) være mest effektivt i pH intervallet $[3,76; 5,76]$. Udenfor dette pH-interval er blandingen af ethansyre/ethanoat ikke effektiv til at mindske påvirkningen ved tilsætning af stærk syre eller stærk base. Skal man derfor benytte en pufferopløsning tæt på fx blods pH-værdi (ca. 7,4), skal man ikke benytte en blanding af ethansyre/ethanoat, men en blanding af fx dihydrogenphosphat/hydrogenphosphat ($\text{p}K_s$ -værdi for dihydrogenphosphat er 7,21). Et puffersystem opstår også i forbindelse med titrering af en ikke-stærk syre med en stærk base (eller titrering af en ikke-stærk base med en stærk syre).

pH-værdien i et puffersystem kan beregnes, hvis man kender stofmængdekonzentrationerne af den ikke-stærke syre og dens korresponderende base (puffersystemet). Man kan ikke benytte de tidligere beskrevne fremgangsmåder til beregning af pH-værdien, da disse alle tager udgangspunkt i, at syren (henholdsvis basen) ikke er blandet med dets korresponderende base (henholdsvis korresponderende syre). Ved at omskrive ligevægtsudtrykket for den ikke-stærke syre (S) og dets korresponderende base (B), kan man opnå en formel til beregning af pH-værdien i en pufferopløsning:

$$K_s = \frac{[\text{B}] \cdot [\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{S}]}$$



$$\text{pH} = \text{p}K_s + \log\left(\frac{[\text{B}]}{[\text{S}]}\right)$$

Den sidste ligning kaldes for **pufferligningen**. Da puffersystemets syre S og base B findes i samme blanding, vil volumen V være ens i de to koncentrationer. Derfor kan pufferligningen også skrives på følgende måde:

$$\text{pH} = \text{p}K_s + \log\left(\frac{[\text{B}]}{[\text{S}]}\right) \Leftrightarrow \text{pH} = \text{p}K_s + \log\left(\frac{n_B}{n_S}\right)$$

Et par eksempler.

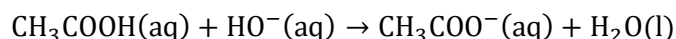
Eksempel 1: Beregn pH i en blanding af 0,10 M ethansyre og 0,12 M ethanoat. Da ethansyre og ethanoat er korresponderende syre-base par og $\text{p}K_s$ for ethansyre er 4,76, benyttes pufferligningen:

$$\text{pH} = \text{p}K_s + \log\left(\frac{[\text{B}]}{[\text{S}]}\right) \Rightarrow \text{pH} = 4,76 + \log\left(\frac{0,12 \text{ M}}{0,10 \text{ M}}\right) = 4,839181$$

I blandingen bliver pH-værdien 4,84.

Eksempel 2: En opløsning af 20,0 mL 0,104 M ethansyre titreres med en 0,100 M natriumhydroxid. Beregn pH-værdien i blandingen, når der er tilsat 11,3 mL natriumhydroxid.

Ved titreringen sker følgende reaktion



Man kan opstille et skema, som ligner SÆL-skemaet fra tidligere. **Skemaet viser dog ikke en ligevægt og benytter stofmængder** i stedet for stofmængdekonzentrationer.

	$\text{CH}_3\text{COOH}(\text{aq})$	+	$\text{HO}^-(\text{aq})$	$\rightarrow$	$\text{CH}_3\text{COO}^-(\text{aq})$	+	$\text{H}_2\text{O}(\text{l})$
Før tilsætning	$n_{S \text{ før}}$		0 mol		$\approx 0 \text{ mol}$		∞
Tilsætning:			n_{HO^-}				
Efter tilsætning:	$n_{S \text{ efter}} = n_{S \text{ før}} - n_{\text{HO}^-}$		0 mol		$n_{B \text{ efter}} = n_{\text{HO}^-}$		∞

Stofmængden af ethansyre før tilsætning af natriumhydroxid, det vil sig før titreringen begynder, er lig med:

$$n_{S \text{ før}} = c_S \cdot V_S = 0,104 \frac{\text{mol}}{\text{L}} \cdot 0,0200 \text{ L} = 0,00208 \text{ mol}$$

Den tilsatte stofmængde hydroxid (stærk base) er lig med:

$$n_{\text{HO}^-} = c_{\text{NaOH}} \cdot V_{\text{NaOH}} = 0,100 \frac{\text{mol}}{\text{L}} \cdot 0,0113 \text{ L} = 0,00113 \text{ mol}$$

Da natriumhydroxid er en stærk base, vil den reagere fuldstændigt med en tilsvarende stofmængde ethansyre. Herved vil der forsvinde 0,00113 mol af den oprindelige stofmængde ethansyre, således at der efter tilsætningen er 0,00095 mol ethansyre tilbage. Samtidig er der dannet 0,00113 mol ethanoat ved reaktionen ovenfor. Opsat i skemaet ser det ud på følgende måde:

	$\text{CH}_3\text{COOH}(\text{aq})$	+	$\text{HO}^-(\text{aq})$	$\rightarrow$	$\text{CH}_3\text{COO}^-(\text{aq})$	+	$\text{H}_2\text{O}(\text{l})$
Før tilsætning	0,00208 mol		0 mol		≈ 0 mol		∞
Tilsætning:			0,00113 mol				
Efter tilsætning:	0,00095 mol		0 mol		0,00113 mol		∞

Man har nu en blanding af den ikke-stærke ethansyre og dens korresponderende base ethanoat, og herved kan pufferligningen benyttes til beregning af pH i blandingen:

$$\text{pH} = \text{p}K_s + \log\left(\frac{n_B}{n_S}\right) \Rightarrow \text{pH} = 4,76 + \log\left(\frac{0,00113 \text{ mol}}{0,00095 \text{ mol}}\right) = 4,835355$$

I blandingen bliver pH-værdien 4,84.

Valg af indikator ved kolorimetrisk syre-base titrering

Ved kolorimetrisk titrering vælges en syre-base indikator. Valget er knyttet til korresponderende syre-basepars pufferområde. Syre-baseindikatorer er som regel svage syrer, som har to forskellige farver for dets syreform og dets korresponderende baseform. Ved valget af en syre-base indikator tages der nemlig udgangspunkt i, at pH ved titreringens ækvivalenspunkt ligger i indikatorens pufferområde:

$$[\text{p}K_{s \text{ indikator}} - 1; \text{p}K_{s \text{ indikator}} + 1]$$

Syre-base indikatoren vil (normalt) ikke have en puffervirkning i forhold til titreringen, da indikatoren tilsættes i meget lille mængde.

Eksempel: Ved en syre-base titrering af en svag syre forventes et omslag (ækvivalenspunkt) omkring pH 9. Derfor vil phenolphthalein være et godt valg af indikator, da denne har en $\text{p}K_s$ værdi på 9,4 og et omslagsinterval mellem 8,2 og 10,0. Til gengæld vil methylrødt være et dårligt valg af indikator, da $\text{p}K_s$ for methylrødt er 4,95 og dets omslagsinterval er 4,8 til 6,0, altså væsentligt før titreringens ækvivalenspunkt omkring pH 9.

Bjerrumdiagram

For en ikke-stærk syre S og dens korresponderende base B kan man definere en syrebrøk og en basebrøk. Antag at man har en stofmængde på n_S af syren og n_B af dens korresponderende base, og at syrebrøken betegnes med x_S og basebrøken betegnes med x_B . Syrebrøken henholdsvis basebrøken defineres ved:

$$x_S = \frac{n_S}{n_S + n_B} \quad \text{og} \quad x_B = \frac{n_B}{n_S + n_B}$$

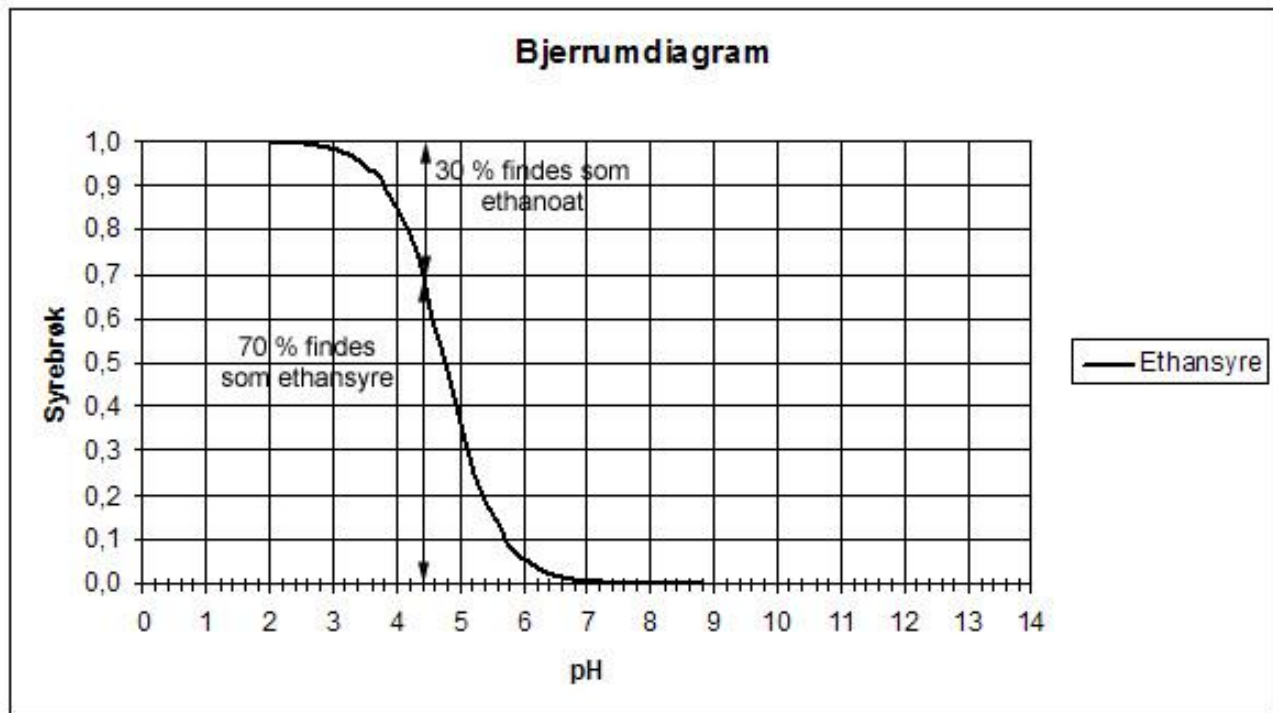
Det kan vises, at pufferligningen kan omskrives til følgende formel ved brug af definitionen af syrebrøken:

$$\text{pH} = \text{p}K_s + \log\left(\frac{1 - x_S}{x_S}\right)$$

Ovenstående formel kan omskrives til følgende, som giver syrebrøken som funktion af opløsningens pH-værdi:

$$x_S = \frac{1}{1 + 10^{\text{pH} - \text{p}K_s}}$$

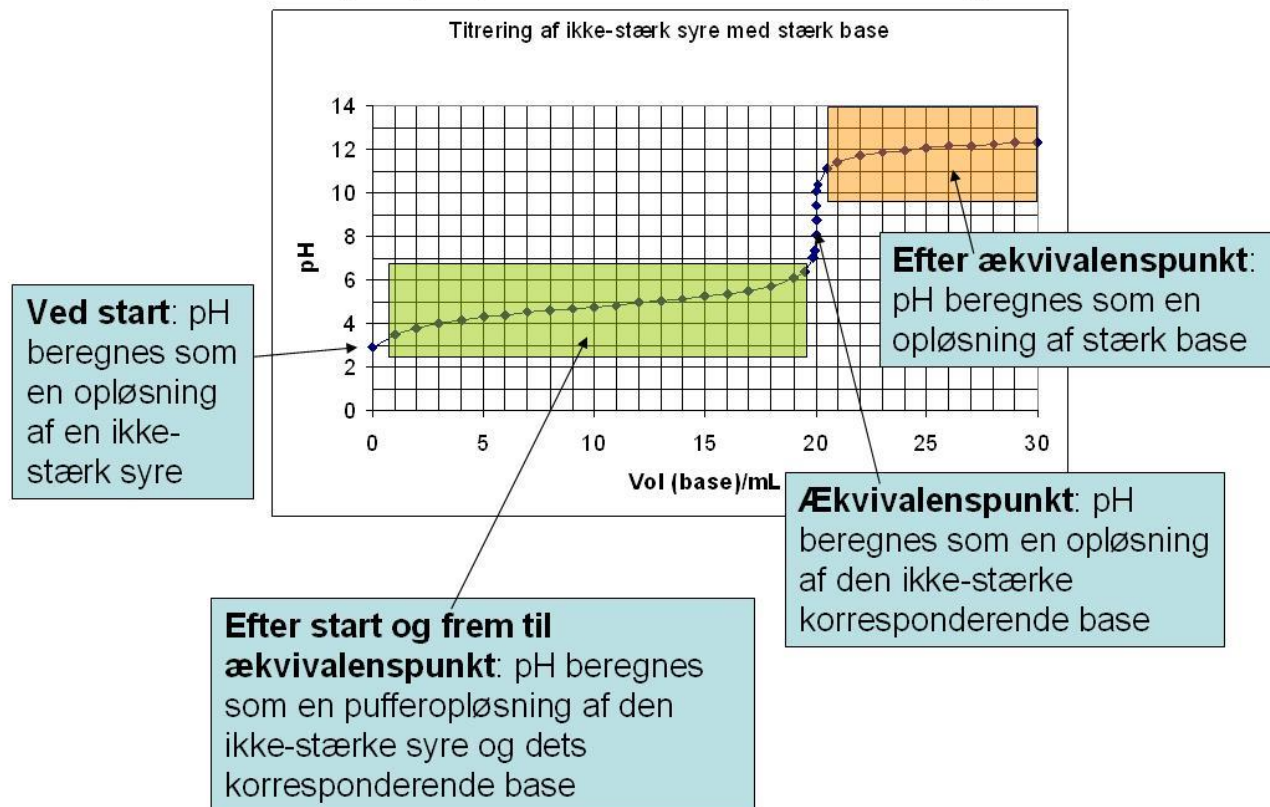
Formlen giver mulighed for at tegne et **bjerrumdiagram**. Et eksempel ses for ethansyre/ethanoat på figuren nedenfor.



Bjerrumdiagrammet kan benyttes til at bestemme fordelingen mellem syren S og dets korresponderende base B. Kort sagt, ved en given pH-værdi kan man bestemme hvor stor en andel som findes på syreformen S og hvor stor en andel som findes på baseformen B. I eksemplet ovenfor kan ses, at ved pH 4,4 findes 70 % (syrebrøken er 0,70) som ethansyre og resten 30 % (1,00-0,70) som ethanoat.

Oversigt over beregning af pH ved syre-basetitrering

Beregning af pH i forbindelse med en titreringskurve

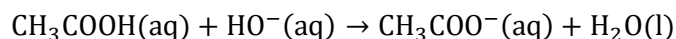


Oversigt over beregning af pH ved syre-basetitrering

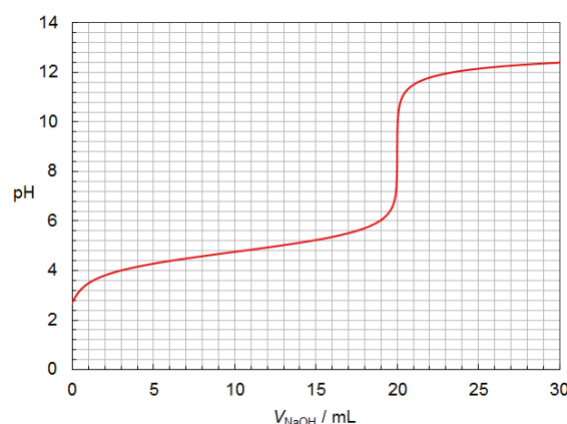
Eksempler på pH-beregninger ved titrerkurver

Der skal regnes på følgende: 10,0 mL 0,200 M CH_3COOH (ethansyre) titreres med 0,100 M NaOH (natriumhydroxid). Ækvivalenspunktet opnås, når der er tilsat 20,0 mL 0,100 M NaOH.

Reaktionen undervejs er følgende (da natriumhydroxid er et letopløseligt salt og natrium(1+) er uden syre-base virkning, udelades Na^+ af nedenstående reaktionsskema):



En titrerkurve for titreringen vil have følgende udseende:



Før der tilsættes NaOH (det vil sige før titreringen begynder)

Der er tale om en vandig opløsning af en ikke-stærk syre. Metoden til beregning af opløsningens pH værdi er givet i afsnittet **pH værdi i en opløsning af en ikke-stærk syre** på side 4:

$$K_s = \frac{x^2}{c_s - x} \Rightarrow 10^{-4,76} \text{ M} = \frac{x^2}{0,200 \text{ M} - x}$$



Ligningen løses for x vha. CAS-værktøjet WordMat.

$$x = 0,001855628 \text{ M} \quad \vee \quad x = -0,001873006 \text{ M}$$

Da x skal være større end nul, bliver stofmængdekonzentrationen af oxonium lig med $[\text{H}_3\text{O}^+] = 0,0018556 \text{ M}$. pH-værdien beregnes herefter ved brug af formel (2):

$$\text{pH} = -\log(0,001855628) = 2,731509$$

I en opløsning af 0,200 M CH_3COOH er pH værdien beregnet til 2,73.

Efter tilsætning af 5,00 mL natriumhydroxid

Når der er tilsat 5,00 mL af den stærke base NaOH, vil der dannes korresponderende base til ethansyre, dvs. ethanoat (CH_3COO^-). Dvs nu haves en blanding af en ikke-stærk syre og dets korresponderende base, altså en pufferopløsning. For at beregne pH skal derfor benyttes pufferligningen. Metoden til beregning af opløsningens pH værdi i en pufferopløsning er givet i afsnittet **pH-værdi i en pufferopløsning** på side 6.

$$\text{pH} = \text{p}K_s + \log\left(\frac{n_B}{n_S}\right)$$

Størrelsen af $\text{p}K_s$ kan bestemmes ved tabelopslag (for ethansyre er $\text{p}K_s = 4,76$), og derfor er problemet at bestemme størrelserne n_S og n_B , dvs.

stofmængder af ethansyre og ethanoat efter at den angivne mængde stærk base er tilsat.

Fra start er der en stofmængde af ethansyre på:

$$n_{\text{CH}_3\text{COOH}} = c_{\text{CH}_3\text{COOH}} \cdot V_{\text{CH}_3\text{COOH}} = 0,200 \frac{\text{mol}}{\text{L}} \cdot 0,0100 \text{ L} = 0,00200 \text{ mol}$$

Der er tilsat en stofmængde af titrator, natriumhydroxid, som er:

$$n_{\text{NaOH}} = c_{\text{NaOH}} \cdot V_{\text{NaOH}} = 0,100 \frac{\text{mol}}{\text{L}} \cdot 0,0050 \text{ L} = 0,000500 \text{ mol}$$

Da $n_{\text{CH}_3\text{COOH}}$ er større end n_{NaOH} , vil der være overskud af ethansyre, efter tilsætning af natriumhydroxid. Da forholdet mellem hydroxid og ethansyre er 1:1 (se reaktionsskema), vil der "forsvinde" en stofmængde af ethansyre, som svarer til stofmængden af tilsat natriumhydroxid. Tilbage vil der være følgende stofmængde af ethansyre:

$$n_S = n_{\text{CH}_3\text{COOH}} - n_{\text{NaOH}} = 0,00200 \text{ mol} - 0,000500 \text{ mol} = 0,0015 \text{ mol}$$

Ved reaktionen dannes den korresponderende base ethanoat. Da forholdet mellem hydroxid og ethanoat er 1:1, vil der dannes samme stofmængde af ethanoat, som der er tilsat af hydroxid:

$$n_B = n_{\text{CH}_3\text{COO}^-} = n_{\text{NaOH}} = 0,000500 \text{ mol}$$

Samlet i en tabel der viser stofmængderne før og efter tilsætning af titrator, ser det sådan ud:

	$\text{CH}_3\text{COOH(aq)}$	+	$\text{HO}^-(\text{aq})$	$\rightarrow$	$\text{CH}_3\text{COO}^-(\text{aq})$	+	$\text{H}_2\text{O(l)}$
Før tilsætning	0,00200 mol		0 mol		$\approx 0 \text{ mol}$		∞
Tilsætning:			0,000500 mol				
Efter tilsætning:	0,0015 mol		0 mol		0,000500 mol		∞

Så kan pH beregnes ved pufferligningen, formel (16):

$$\text{pH} = \text{p}K_s + \log\left(\frac{n_B}{n_S}\right) = 4,76 + \log\left(\frac{0,000500 \text{ mol}}{0,0015 \text{ mol}}\right) = 4,282879$$

Efter tilsætning af 5,00 mL natriumhydroxid vil pH være lig med 4,28.

Beregn for tilsætning af 10,00 mL (facit:4,76)

Beregn for tilsætning af 15,00 mL (facit:5,24)

Beregn for tilsætning af 19,90 mL (facit:7,06)

Beregn for tilsætning af 19,95 mL (facit:7,36)

Efter tilsætning af 20,00 mL natriumhydroxid

Når der er tilsat 20,00 mL NaOH, vil ækvivalenspunktet være nået. Det kan ses ved, at stofmængden af tilsat titrator (NaOH) er lig med stofmængden af ethansyre, der var fra start:

$$n_{\text{CH}_3\text{COOH}} = c_{\text{CH}_3\text{COOH}} \cdot V_{\text{CH}_3\text{COOH}} = 0,200 \frac{\text{mol}}{\text{L}} \cdot 0,0100 \text{ L} = 0,00200 \text{ mol}$$

$$n_{\text{NaOH}} = c_{\text{NaOH}} \cdot V_{\text{NaOH}} = 0,100 \frac{\text{mol}}{\text{L}} \cdot 0,02000 \text{ L} = 0,00200 \text{ mol}$$

Ved at benytte en skematisk oversigt over hvad der var i kolben før titreringen startede, hvad der er tilsat kolben under titreringen og hvad der er i kolben efter tilsætningen fås:

	$\text{CH}_3\text{COOH(aq)}$	+	$\text{HO}^-(\text{aq})$	$\rightarrow$	$\text{CH}_3\text{COO}^-(\text{aq})$	+	$\text{H}_2\text{O(l)}$
Før tilsætning	0,00200 mol		0 mol		$\approx 0 \text{ mol}$		∞
Tilsætning:			0,00200 mol				
Efter tilsætning:	0 mol		0 mol		0,00200 mol		∞

Ved titreringen dannes den korresponderende base til ethansyre. Da al ethansyre og hydroxid har reageret, er opløsningen kun en "ren" opløsning af den ikke-stærke base ethanoat. Metoden til beregning af opløsningens pH værdi for en ikke-stærk base er givet i afsnittet **pH værdi i en opløsning af en ikke-stærk base** på side 5.

Ved denne metode skal den formelle koncentration af basen, ethanoat, kendes. Den formelle koncentration af basen beregnes ud fra formlen:

$$c_{\text{CH}_3\text{COO}^-} = \frac{n_{\text{CH}_3\text{COO}^-}}{V_{\text{opløsning}}}$$

I formelen er stofmængden $n_{\text{CH}_3\text{COO}^-}$ lig med den stofmængde ethanoat, som er dannet ved titreringen, som fremgår af den skematiske oversigt ovenfor. $V_{\text{opløsning}}$ er det samlede volumen af opløsningen i kolben. Dvs. summen af volumen af titrand (ethansyreopløsning), der var fra start, samt volumen af tilsat titrator (NaOH) frem til ækvivalenspunktet:

$$c_{\text{CH}_3\text{COO}^-} = \frac{n_{\text{CH}_3\text{COO}^-}}{V_{\text{opløsning}}} = \frac{0,00200 \text{ mol}}{0,0100 \text{ L} + 0,0200 \text{ L}} = 0,06667 \frac{\text{mol}}{\text{L}}$$

Herefter følger beregningen af pH, som givet på side 5:

$$K_b = \frac{x^2}{c_b - x} \Rightarrow 10^{-9,24} \text{ M} = \frac{x^2}{0,06667 \text{ M} - x}$$



Ligningen løses for x vha. CAS-værktøjet WordMat.

$$x = -6,194203 \cdot 10^{-6} \text{ M} \quad \vee \quad x = 6,193627 \cdot 10^{-6} \text{ M}$$

Da stofmængdekonzentrationen af hydroxid skal være positiv, er $[\text{HO}^-]$ 0,000006193627 M. pH-værdien beregnes herefter ved at benytte formelen (4) og (6) på side 15 i oversigten:

$$\begin{aligned} \text{pOH} &= -\log(0,000006193627) = 5,208055 \\ \text{pH} + \text{pOH} &= 14,00 \Rightarrow \text{pH} = 14,00 - 5,20805 = 8,79195 \end{aligned}$$

pH i opløsningen ved ækvivalenspunktet er 8,79.

Efter tilsætning af 20,05 mL natriumhydroxid

Der er i dette tilfælde tilsat et overskud af titrator (NaOH) i forhold til den oprindelige stofmængde af ethansyre. Dette kan ses ved:

$$n_{\text{CH}_3\text{COOH}} = c_{\text{CH}_3\text{COOH}} \cdot V_{\text{CH}_3\text{COOH}} = 0,200 \frac{\text{mol}}{\text{L}} \cdot 0,0100 \text{ L} = 0,00200 \text{ mol}$$

$$n_{\text{NaOH}} = c_{\text{NaOH}} \cdot V_{\text{NaOH}} = 0,100 \frac{\text{mol}}{\text{L}} \cdot 0,02005 \text{ L} = 0,002005 \text{ mol}$$

Ved at benytte en skematisk oversigt over hvad der var i kolben før titreringen startede, hvad der er tilsat kolben under titreringen og hvad der er i kolben efter tilsætningen fås:

	$\text{CH}_3\text{COOH}(\text{aq})$	+	$\text{HO}^-(\text{aq})$	$\rightarrow$	$\text{CH}_3\text{COO}^-(\text{aq})$	+	$\text{H}_2\text{O}(\text{l})$
Før tilsætning	0,00200 mol		0 mol		$\approx 0 \text{ mol}$		∞
Tilsætning:			0,002005 mol				
Efter tilsætning:	0 mol		0,000005 mol		0,00200 mol		∞

Dvs. at der er et overskud af hydroxid der ikke har reageret. Da hydroxid er en stærk base og ethanoat et en temmelig svag base ($\text{p}K_b = 9,24$) kan man se bort fra betydningen af ethanoat i forbindelse med at bestemme pH i opløsningen. Det svarer derfor til at bestemme pH af en "ren" stærk base (NaOH). Metoden

til beregning af opløsningens pH værdi for en ikke-stærk base er givet i afsnittet **pH værdi i en opløsning af en stærk base** på side 3.

For at beregne pH skal den aktuelle koncentration af den stærke base hydroxid kendes. Denne er lig med:

$$[\text{HO}^-] = \frac{n_{\text{HO}^-}}{V_{\text{opløsning}}} = \frac{0,000005 \text{ mol}}{0,010 \text{ L} + 0,02005 \text{ L}} = 0,000166389351 \frac{\text{mol}}{\text{L}}$$

$$\text{pOH} = -\log([\text{HO}^-]) = -\log(0,000166389351) = 3,778874$$

$$\text{pH} = 14,00 - \text{pOH} = 14,00 - 3,778874 \approx 10,22113$$

Det vil sige, efter der er tilsat 20,05 mL NaOH, bliver pH lig med 10,22.

Beregn pH efter tilsætning af 25,00 mL NaOH (facit: 12,15)

Formler til beregning af pH-værdi

Vigtige begreber: Syrens styrekonstant K_s , syrens styrkeeksponent pK_s , basens styrekonstant K_b , basens styrkeeksponent pK_b formel stofmængdekonzentration af syre c_s henholdsvis base c_b .

$$[H_3O^+] \cdot [HO^-] = 1,0 \cdot 10^{-14} \text{ M} \quad (\text{ved } 25^\circ \text{C}) \quad (1)$$

$$\text{pH} = -\log([H_3O^+]) \quad (2)$$

$$[H_3O^+] = 10^{-\text{pH}} \text{ M} \quad (3)$$

$$\text{pOH} = -\log([HO^-]) \quad (4)$$

$$[HO^-] = 10^{-\text{pOH}} \text{ M} \quad (5)$$

$$\text{pH} + \text{pOH} = 14,00 \quad (\text{ved } 25^\circ \text{C}) \quad (6)$$

$$\text{pH} = -\log(c_s) \quad (\text{for stærk syre hvor } c_s > 10^{-6} \text{ M}) \quad (7)$$

$\text{pH} = -\log(x)$ (for ikke-stærk syre)
hvor x bestemmes ud fra løsning af ligningen

$$K_s = \frac{x^2}{c_s - x} \quad (8)$$

Ved løsning kan fx benyttes et CAS værktøj som WordMat eller lignende.

$$K_s \cdot K_b = 1,0 \cdot 10^{-14} \text{ M}^2 \quad (9)$$

(for et korresponderende syre-basepar ved 25°C)

$$\text{p}K_s = -\log(K_s) \quad (10)$$

$$K_s = 10^{-\text{p}K_s} \text{ M} \quad (11)$$

$$\text{p}K_b = -\log(K_b) \quad (12)$$

$$K_b = 10^{-\text{p}K_b} \text{ M} \quad (13)$$

$$\text{p}K_s + \text{p}K_b = 14,00 \quad (\text{ved } 25^\circ \text{C}) \quad (14)$$

$\text{pOH} = -\log(x)$ (for ikke-stærk base)
hvor x bestemmes ud fra løsning af ligningen

$$K_b = \frac{x^2}{c_b - x} \quad (15)$$

Ved løsning kan fx benyttes et CAS værktøj som WordMat eller lignende.

Når pOH kendes, benyttes formel (6) til beregning af pH.

Pufferligningen findes i tre udgaver:

1. $\text{pH} = \text{p}K_s + \log\left(\frac{[\text{B}]}{[\text{S}]}\right)$ Hvis koncentrationen af syren og dens korresponderende base kendes.
2. $\text{pH} = \text{p}K_s + \log\left(\frac{n_B}{n_S}\right)$ Hvis stofmængderne af syren og dens korresponderende base kendes. (16)
3. $\text{pH} = \text{p}K_s + \log\left(\frac{1-x_S}{x_S}\right)$ Hvis syrebrøken af syren for en blanding af et korresponderende syre-basepar kendes

$$x_S = \frac{n_S}{n_S + n_B} \quad (\text{Syrebrøken. Andelen af stoffet på syreform}) \quad (17)$$

$$x_B = \frac{n_B}{n_S + n_B} \quad (\text{Basebrøken. Andelen af stoffet på baseform}) \quad (18)$$

$$x_S + x_B = 1 \quad (19)$$

$$x_S = \frac{1}{1 + 10^{\text{pH} - \text{p}K_s}} \quad (\text{Syrebrøken som funktion af opløsningens pH-værdi}) \quad (20)$$

Indikatorer - fra Databog Fysik Kemi, 11. udgave, 4. oplag, 2012, side 34

Tallet i parentes efter farven er den bølglængde (i nm), hvor der er maksimal absorption af lys.

