

# pH-Berekeningen

Hierin staat informatie over het doen van pH-berekeningen aan oplossingen van zuren en basen. Het is aan te raden om het document 'Oplossingen van zuren/basen en zuur-basereacties' eerst door te nemen, omdat je moet kunnen bepalen of een zuur/base sterk of zwak is.

## Belangrijke formules

$\text{pH} = -\log([\text{H}_3\text{O}^+])$	$\text{pOH} = -\log([\text{OH}^-])$	$\text{pH} + \text{pOH} = \text{p}K_w$ (14,00 bij $T = 298 \text{ K}$ )
$[\text{H}_3\text{O}^+] = 10^{-\text{pH}}$	$[\text{OH}^-] = 10^{-\text{pOH}}$	

*Opmerkingen:* pH/pOH zijn eenheidsloos en  $[\text{H}_3\text{O}^+]/[\text{OH}^-]$  zijn in mol/L. Waarden van  $\text{p}K_w$  bij verschillende temperaturen zijn vermeld in Binas 50A (ga uit van  $T = 298 \text{ K}$  als  $T$  niet is vermeld). Voor de significantie geldt: het aantal decimalen in de pH/pOH is gelijk aan het aantal significante cijfers in de  $[\text{H}_3\text{O}^+]/[\text{OH}^-]$ .

## Stappenplan

1. Bepaal m.b.v. Binas 49 of de stof een **zuur** of **base** is en **sterk** of **zwak** en schrijf de reactievergelijking op waaruit blijkt hoe opgeloste  $\text{H}_3\text{O}^+$  of  $\text{OH}^-$  ionen ontstaan
2. *Sterk zuur/base:* bereken  $[\text{H}_3\text{O}^+]$  of  $[\text{OH}^-]$  en daarna de pH (eventueel via pOH). Je bent klaar!  
*Zwak zuur/base:* Zoek  $K_a/K_b$  op in Binas 49 en schrijf deze op. Ga naar stap 3.
3. Maak een overzichtstabel waarin je voor de opgeloste (aq) deeltjes in de evenwichtsreactie van stap 1 bijhoudt hoe de concentraties veranderen bij het instellen van het evenwicht. Zo'n tabel wordt wel een BOE-tabel genoemd (Begin/Omgezet/Evenwicht), hoewel andere boeken soms andere termen gebruiken ( $t_0$ , omgezet,  $t_{\text{ev}}$ ). Het komt op hetzelfde neer.
4. Schrijf de evenwichtsvoorwaarde op, vul de evenwichtsconcentraties in, stel de uitdrukking gelijk aan de  $K_a/K_b$  van stap 2 en los de vergelijking op
5. Je hebt nu  $[\text{H}_3\text{O}^+]$  of  $[\text{OH}^-]$ . Bereken de pH (eventueel via pOH). Je bent klaar!

## Voorbeeldopgaven

### Sterke zuren/basen

(a) Bereken de pH van een 0,90 M salpeterzuuroplossing.

1. Salpeterzuur is  $\text{HNO}_3$ , een sterk zuur.  
Reactievergelijking:  $\text{HNO}_3(\text{l}) + \text{H}_2\text{O}(\text{l}) \rightarrow \text{H}_3\text{O}^+(\text{aq}) + \text{NO}_3^-(\text{aq})$
2. Reactie is aflopend, dus  $[\text{H}_3\text{O}^+] = 0,90 \text{ mol/L}$   
 $\text{pH} = -\log([\text{H}_3\text{O}^+]) = -\log(0,90) = 0,05$

(b) 4,5 gram bariumhydroxide wordt opgelost in water tot 200 mL. Bereken de pH van de oplossing.

1. Bariumhydroxide is  $\text{Ba}(\text{OH})_2$ , een goed oplosbaar zout dat de sterke base  $\text{OH}^-$  bevat  
Reactievergelijking (oplosvergelijking):  $\text{Ba}(\text{OH})_2(\text{s}) \rightarrow \text{Ba}^+(\text{aq}) + 2 \text{OH}^-(\text{aq})$
2. Gegeven:  $m = 4,5 \text{ g}$ ,  $M(\text{Ba}(\text{OH})_2) = 171,34 \text{ g/mol}$ ,  $V = 200 \text{ mL} = 0,200 \text{ L}$   
 $n(\text{Ba}(\text{OH})_2) = \frac{m}{M} = \frac{4,5 \text{ g}}{171,34 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}} = 2,6 \cdot 10^{-2} \text{ mol} \Rightarrow n(\text{OH}^-) = 2 \cdot n(\text{Ba}(\text{OH})_2) = 5,3 \cdot 10^{-2} \text{ mol}$   
 $[\text{OH}^-] = \frac{n}{V} = \frac{5,3 \cdot 10^{-2} \text{ mol}}{0,200 \text{ L}} = 0,26 \text{ mol/L}$   
 $\text{pOH} = -\log([\text{OH}^-]) = -\log(0,26) = 0,58 \Rightarrow \text{pH} = 14,00 - \text{pOH} = 14,00 - 0,58 = 13,42$

## Zwakke zuren/basen

(c) Bereken de pH van een 0,80 M trichloorazijnzuuroplossing.

- Trichloorazijnzuur ( $\text{CCl}_3\text{COOH}$ ) is een zwak zuur.  
Reactievergelijking:  $\text{CCl}_3\text{COOH}(\text{aq}) + \text{H}_2\text{O}(\text{l}) \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+(\text{aq}) + \text{CCl}_3\text{COO}^-(\text{aq})$
- $K_z = 2,2 \cdot 10^{-1} = 0,22$  (Binas 49)
- BOE-tabel (uitleg over het invullen hiervan vind je in de volgende paragraaf):

(in mol/L)	$[\text{CCl}_3\text{COOH}]$	$[\text{H}_3\text{O}^+]$	$[\text{CCl}_3\text{COO}^-]$
<b>Begin</b>	0,80	0	0
<b>Omgezet</b>	-x	+x	+x
<b>Evenwicht</b>	0,80 - x	x	x

$$4. \quad K_z = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+][\text{CCl}_3\text{COO}^-]}{[\text{CCl}_3\text{COOH}]} \Rightarrow \frac{x^2}{0,80 - x} = 0,22 \quad \text{kwadratische vergelijking}$$

$$x^2 = 0,22(0,80 - x) \quad \text{beide leden vermenigvuldigd met } 0,80 - x$$

$$x^2 = 0,176 - 0,22x \quad \text{haakjes weggewerkt}$$

$$x^2 + 0,22x - 0,176 = 0 \quad \text{rechterlid op 0 herleid}$$

$$x = 0,32 \quad \text{via abc-formule (Binas 36C); neem alleen de positieve uitkomst}$$

- $[\text{H}_3\text{O}^+] = x = 0,32 \text{ mol/L}$   
 $\text{pH} = -\log([\text{H}_3\text{O}^+]) = -\log(0,32) = 0,49$

*Opmerking:* een 0,80 M trichloorazijnzuuroplossing kan worden verkregen door bijvoorbeeld 0,80 mol  $\text{CCl}_3\text{COOH}$  op te lossen in water tot een volume van 1,0 L. De concentratie van 0,80 mol/L is de **analytische concentratie**, aangeduid met  $c$ , dus  $c(\text{CCl}_3\text{COOH}) = 0,80 \text{ mol/L}$ . Bij evenwicht geldt echter dat  $[\text{CCl}_3\text{COOH}] = 0,48 \text{ mol/L}$  en  $[\text{CCl}_3\text{COO}^-] = [\text{H}_3\text{O}^+] = 0,32 \text{ mol/L}$ , want een deel van het trichloorazijnzuur wordt omgezet in het trichlooracetaat. De evenwichtsconcentratie van 0,48 mol/L is de **actuele concentratie** van trichloorazijnzuur, aangeduid met  $[\text{CCl}_3\text{COOH}]$ . Gegeven molariteiten van oplossingen zijn bijna altijd analytische concentraties.

(d) Bereken de pH van 5 M ammonia.

- Ammonia is ammoniak ( $\text{NH}_3$ ) opgelost in water.  $\text{NH}_3$  is een zwakke base.  
Reactievergelijking:  $\text{NH}_3(\text{aq}) + \text{H}_2\text{O}(\text{l}) \rightleftharpoons \text{NH}_4^+(\text{aq}) + \text{OH}^-(\text{aq})$
- $K_b = 1,8 \cdot 10^{-5}$  (Binas 49)
- BOE-tabel:

(in mol/L)	$[\text{NH}_3]$	$[\text{NH}_4^+]$	$[\text{OH}^-]$
<b>Begin</b>	5	0	0
<b>Omgezet</b>	-x	+x	+x
<b>Evenwicht</b>	5 - x	x	x

$$4. \quad K_b = \frac{[\text{NH}_4^+][\text{OH}^-]}{[\text{NH}_3]} \Rightarrow \frac{x^2}{5 - x} = 1,8 \cdot 10^{-5}$$

Vergelijking oplossen (zie opgave (c) voor tussenstappen) geeft  $x = 9 \cdot 10^{-3}$

- $[\text{OH}^-] = x = 9 \cdot 10^{-3} \text{ mol/L}$   
 $\text{pOH} = -\log([\text{OH}^-]) = -\log(9 \cdot 10^{-3}) = 2,0 \Rightarrow \text{pH} = 14,00 - \text{pOH} = 14,00 - 2,0 = 12,0$

## Hoe vul je een BOE-tabel in?

Het invullen van de BOE-tabel wordt geïllustreerd aan de hand van opgave (c). De analytische concentratie van de trichloorazijnzuuroplossing,  $c(\text{CCl}_3\text{COOH})$ , is 0,80 mol/L. Bij de beginsituatie doen we alsof de reactie met water nog helemaal niet verloopt, dus we vullen in  $[\text{CCl}_3\text{COOH}]_{\text{begin}} = c(\text{CCl}_3\text{COOH}) = 0,80 \text{ mol/L}$  en  $[\text{CCl}_3\text{COO}^-]_{\text{begin}} = 0$ . Voor pH-neutraal water geldt dat  $[\text{H}_3\text{O}^+] = 1,0 \cdot 10^{-7} \text{ mol/L}$ , maar deze waarde is zo klein dat hij verwaarloosd mag worden, dus  $[\text{H}_3\text{O}^+]_{\text{begin}} \approx 0$ .

(in mol/L)	$[\text{CCl}_3\text{COOH}]$	$[\text{H}_3\text{O}^+]$	$[\text{CCl}_3\text{COO}^-]$
<b>Begin</b>	<b>0,80</b>	<b>0</b>	<b>0</b>
<b>Omgezet</b>			
<b>Evenwicht</b>			

Een deel van het  $\text{CCl}_3\text{COOH}$  zal met water reageren en omgezet worden tot  $\text{CCl}_3\text{COO}^-$  en  $\text{H}_3\text{O}^+$ .  $[\text{CCl}_3\text{COOH}]$  zal dus met een onbekende hoeveelheid afnemen. We geven dit aan met een verandering/omzetting van  $-x \text{ mol/L}$ . Op deze manier gedefinieerd is  $x$  een positief getal.

(in mol/L)	$[\text{CCl}_3\text{COOH}]$	$[\text{H}_3\text{O}^+]$	$[\text{CCl}_3\text{COO}^-]$
<b>Begin</b>	0,80	0	0
<b>Omgezet</b>	$-x$		
<b>Evenwicht</b>			

Voor het verder invullen van de 'Omgezet' rij, kijken we naar de reactievergelijking; dit is *de enige rij* van de tabel waarvoor we de reactievergelijking nodig hebben. Als  $[\text{CCl}_3\text{COOH}]$  met  $x \text{ mol/L}$  afneemt, zullen zowel  $[\text{H}_3\text{O}^+]$  als  $[\text{CCl}_3\text{COO}^-]$  met  $x \text{ mol/L}$  toenemen (1: 1 : 1 molverhouding).

(in mol/L)	$[\text{CCl}_3\text{COOH}]$	$[\text{H}_3\text{O}^+]$	$[\text{CCl}_3\text{COO}^-]$
<b>Begin</b>	0,80	0	0
<b>Omgezet</b>	$-x$	$+x$	$+x$
<b>Evenwicht</b>			

De 'Evenwicht' rij is simpelweg de som van de twee bovenste rijen. De tabel is nu ingevuld.

(in mol/L)	$[\text{CCl}_3\text{COOH}]$	$[\text{H}_3\text{O}^+]$	$[\text{CCl}_3\text{COO}^-]$
<b>Begin</b>	0,80	0	0
<b>Omgezet</b>	$-x$	$+x$	$+x$
<b>Evenwicht</b>	<b><math>0,80 - x</math></b>	<b><math>x</math></b>	<b><math>x</math></b>

Er zijn ook opgaven waarin de pH van een oplossing van een zwak zuur/base gegeven wordt en waarin je de analytische concentratie van het zuur moet bepalen. Voorbeeld: een  $\text{HNO}_2$ -oplossing heeft een pH van 3,00. Wat is de analytische concentratie van het zuur?  $[\text{HNO}_2]_{\text{begin}}$  is nu onbekend ( $x$ ) en  $[\text{H}_3\text{O}^+]_{\text{begin}} = [\text{NO}_2^-]_{\text{begin}} = 0$ . De gegeven pH betekent dat  $[\text{H}_3\text{O}^+]_{\text{evenwicht}} = 1,0 \cdot 10^{-3} \text{ mol/L}$ . Nu de verandering in  $[\text{H}_3\text{O}^+]$  bekend is ( $+1,0 \cdot 10^{-3} \text{ mol/L}$ ), kan de gehele tabel ingevuld worden.

(in mol/L)	$[\text{HNO}_2]$	$[\text{H}_3\text{O}^+]$	$[\text{NO}_2^-]$
<b>Begin</b>	$x$	0	0
<b>Omgezet</b>	$-1,0 \cdot 10^{-3}$	$+1,0 \cdot 10^{-3}$	$+1,0 \cdot 10^{-3}$
<b>Evenwicht</b>	$x - 1,0 \cdot 10^{-3}$	$1,0 \cdot 10^{-3}$	$1,0 \cdot 10^{-3}$

### Optioneel: wanneer mag de kwadratische vergelijking vereenvoudigd worden?

In de voorbeeldopgaven over zwakke zuren/basen losten we kwadratische vergelijkingen op:

$$\frac{x^2}{0,80 - x} = 0,22 \text{ (c) en } \frac{x^2}{5 - x} = 1,8 \cdot 10^{-5} \text{ (d).}$$

In veel gevallen is de concentratieverandering vrij klein ten opzichte van de beginconcentratie van het zuur of de base. Misschien geldt dus  $0,80 - x \approx 0,80$  of  $5 - x \approx 5$ . Als we de noemers in bovenstaande vergelijkingen mogen vervangen door 0,80 en 5, krijgen we kwadratische vergelijkingen die veel eenvoudiger op te lossen zijn, want de *abc*-formule is niet nodig. Worteltrekken volstaat dan.

**Vuistregel:** je mag de noemer vereenvoudigen als  $\frac{c_z}{K_z} > 100$  (zuren) of  $\frac{c_b}{K_b} > 100$  (basen).

Voor opgave (c) geldt dat  $c_z = 0,80$  mol/L en  $K_z = 0,22$ , dus  $\frac{c_z}{K_z} = 3,6 < 100$ , dus hier mag de noemer niet vereenvoudigd worden. Oplossen via de *abc*-formule, zoals gedaan in de uitgewerkte opgave, is dus noodzakelijk. Hier kwam uit dat  $x = 0,32$  en die waarde is inderdaad niet te verwaarlozen ten opzichte van 0,80.

Voor opgave (d) geldt dat  $c_b = 5$  mol/L en  $K_b = 1,8 \cdot 10^{-5}$ , dus  $\frac{c_b}{K_b} = 3 \cdot 10^5 > 100$ , dus hier mag de noemer wel vereenvoudigd worden. We krijgen dan:

$$\frac{x^2}{5} = 1,8 \cdot 10^{-5} \Rightarrow x^2 = 9 \cdot 10^{-5} \Rightarrow x = 9 \cdot 10^{-3}, \text{ dezelfde oplossing als bij het gebruik van de } abc\text{-formule.}$$

Deze waarde is inderdaad te verwaarlozen ten opzichte van 5.