

pH-Berekeningen

Hierin staat informatie over het berekenen van de pH van 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. De uitgewerkte voorbeelden verduidelijken het stappenplan.

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 $[\text{H}_3\text{O}^+]/[\text{OH}^-]$. Op de havo wordt het deeltje H^+ in plaats van H_3O^+ gebruikt.

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 H_3O^+ of 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_z of 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 vaak een BOE-tabel genoemd (**B**egin/**O**mgezet/**E**venwicht).
4. Schrijf de evenwichtsvoorwaarde op, vul de evenwichtsconcentraties in, stel de uitdrukking gelijk aan de K_z/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 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 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 (CCl_3COOH) 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 (zie volgende paragraaf voor uitleg over het invullen hiervan):

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

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

$x^2 = 0,22(0,80 - x)$ beide leden vermenigvuldigd met 0,80 - x
 $x^2 = 0,176 - 0,22x$ haakjes weggewerkt
 $x^2 + 0,22x - 0,176 = 0$ rechterlid op 0 herleid
 $x = 0,32$ via abc-formule (Binas 36C); neem alleen de positieve uitkomst

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

(d) Bereken de pH van 5 M ammonia.

- Ammonia is ammoniak (NH_3) opgelost in water. 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)	$[\text{NH}_3]$	$[\text{NH}_4^+]$	$[\text{OH}^-]$
Begin	5	0	0
Omgezet	-x	+x	+x
Evenwicht	5 - x	x	x

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

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

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

Analytische vs. actuele concentratie

Een 0,80 M trichloorazijnzuuroplossing kan worden verkregen door bijvoorbeeld 0,80 mol CCl_3COOH op te lossen in water tot een volume van 1 L. De concentratie van 0,80 mol/L is de **analytische concentratie**, aangeduid met c , dus $c(\text{CCl}_3\text{COOH}) = 0,80$ mol/L. Bij evenwicht geldt echter dat $[\text{CCl}_3\text{COOH}] = 0,48$ mol/L en $[\text{CCl}_3\text{COO}^-] = 0,32$ mol/L, want een deel van het trichloorazijnzuur wordt omgezet in trichlooracetaat (zie opgave (c)). 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.

Hoe vul je een BOE-tabel in?

Het invullen van de BOE-tabel¹ 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 niet begonnen is, 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)	$[\text{CCl}_3\text{COOH}]$	$[\text{H}_3\text{O}^+]$	$[\text{CCl}_3\text{COO}^-]$
Begin	0,80	0	0
Omgezet			
Evenwicht			

Een deel van het CCl_3COOH zal met water reageren en omgezet worden tot CCl_3COO^- en H_3O^+ . $[\text{CCl}_3\text{COOH}]$ 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)	$[\text{CCl}_3\text{COOH}]$	$[\text{H}_3\text{O}^+]$	$[\text{CCl}_3\text{COO}^-]$
Begin	0,80	0	0
Omgezet	$-x$		
Evenwicht			

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 (kijk naar de molverhouding).

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

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

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

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 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 tabel ingevuld worden.

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

¹ Wordt ook wel BRE-tabel of BAE-tabel genoemd

Optioneel: vereenvoudigen van de kwadratische vergelijking

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 eenvoudig op te lossen zijn, zonder gebruik van de *abc*-formule. 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 echt 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.