

Berechnung von pKs -Werten

Berechnung des prozentualen Anteil der umgesetzten (protolysiert) Säuremoleküle einer schwachen Säure.

Beispiel:

Gegeben: $c_0(\text{HAc})=0,2 \text{ mol/l}$
 $\text{pH}=2,8$

Gesucht: α

Lösung: $\frac{c_0(\text{HAc})}{100} = \frac{c(\text{H}_3\text{O}^+)}{\alpha}$

$$\alpha = \frac{c(\text{H}_3\text{O}^+)}{c(\text{HAc})} \cdot 100 \quad \alpha \text{ wird als Protolysegrad bezeichnet.}$$

$$\alpha = \frac{(10^{-2,8} \text{ mol/l})}{(0,2 \text{ mol/l})} \cdot 100 = 0,79$$

Der Protolysegrad bestimmt, wie viel Prozent der Säuremoleküle protolysiert sind.

Beispiel 2:

Gegeben: $c_0(\text{HAc})=0,3 \text{ mol/l}$
 $\text{pH}=2,64$

Gesucht: α

Lösung: $\alpha = \frac{c(\text{H}_3\text{O}^+)}{c(\text{HAc})} \cdot 100$

$$\alpha = \frac{10^{-2,64} \text{ mol/l}}{0,3 \text{ mol/l}} \cdot 100 = 0,76$$

pH-Wert-Berechnung schwacher Säuren

Beispiel 3:

Gegeben: $c_0(\text{HCN})=0,2 \text{ mol/l}$
 $K_s=4,9 \cdot 10^{-10} \text{ mol/l}$

Gesucht: pH

Es werden zwei Methoden zur Berechnung durchgeführt.

1. Methode:

Lösung: $\text{pH} = \frac{1}{2} \cdot (\text{p}K_s - \lg(c_0(\text{HAc})))$

$$\text{pH} = \left(\frac{1}{2}\right) \cdot (-\lg(4,9 \cdot 10^{-10}) - \lg(0,2)) = 5,00438$$

Wir wissen aber noch nicht ob HCN eine schwache Säure ist. Deshalb berechnen wir den pH-Wert mit der p-q-Formel nochmal.

2. Methode:

$$K_S = \frac{c(H_3O^+) \cdot c(CN^-)}{c(HAc)}$$

$$c(H_3O^+) = \sqrt{K_S \cdot C(HCN)}$$

Für den pH-Wert benötigen wir die Gleichgewichtskonzentration der Hydroniumionen.

Berechnung der Gleichgewichtskonzentrationen

	HCN	H_3O^+	CN^-
c_0	0,2 mol/l	0 mol/l	0 mol/l
Änderung	x	x	x
Gleichgewichtskonzentration	0,2 mol/l – x mol/l	X mol/l	X mol/l

Mit den Werten der Tabelle stellen wir die Säurekonstante auf:

$$K_S = \frac{(x \text{ mol/l})^2}{(0,2 \text{ mol/l} - x \text{ mol/l})}$$

Darin kommt die Gleichgewichtskonzentration der Hydroniumionen quadratisch vor. Das führt zu einer quadratischen Gleichung, die sich in die Normalform überführen lässt:

$$K_S \cdot (0,2 \text{ mol/l} - x \text{ mol/l}) = (x \text{ mol/l})^2$$

$$0 = K_S \cdot (0,2 \text{ mol/l} - x \text{ mol/l}) - (x \text{ mol/l})^2$$

$$x^2 + K_S x - K_S \cdot 0,2 \text{ mol/l} = 0$$

Mit Hilfe der p-q-Formel lässt sich die Konzentration dann berechnen:

$$x_{(1/2)} = -K_S/2 \pm \sqrt{(K_S/2)^2 + K_S \cdot 0,2 \text{ mol/l}}$$

$$x_{(1/2)} = \frac{-4,9 \cdot 10^{-10} \cdot \frac{\text{mol}}{\text{l}}}{2} \pm \sqrt{\left(-\left(\frac{4,9 \cdot 10^{-10} \cdot \frac{\text{mol}}{\text{l}}}{2}\right)\right)^2 + 4,9 \cdot 10^{-10} \frac{\text{mol}}{\text{l}} \cdot 0,2 \text{ mol/l}}$$

$$x_1 = 9,899 \cdot 10^{-6} \frac{\text{mol}}{\text{l}}$$

$$x_2 = -9,899 \cdot 10^{-6} \frac{\text{mol}}{\text{l}}$$

Die $x_1 = 9,899 \cdot 10^{-6} \frac{\text{mol}}{\text{l}}$ werden nun logarithmiert somit erhalten wir 5,00437. Das ist dann der gesuchte pH-Wert. Das heißt auch außerdem, dass HCN eine schwache Säure ist. Die Näherungsformel der Methode 1 ist ziemlich genau und kann deshalb in der Regel verwendet werden.

T.Y. 20.5.2014