

**Dr. Hornyánszky Gábor**

egyetemi docens

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

# pH-számítás

---

# A pH fogalma – a pH skála

A pH a  $H^+$  ion koncentrációjának negatív logaritmus:

$$pH = - \lg [H^+]$$

A pH skála 0-14 között terjed.

A semleges kémhatásnak a  $pH = 7$  érték felel meg.

Az alatt (0-6,99) savas kémhatásról, a felett (7,01-14) lúgos kémhatásról beszélünk.

# A pH fogalma – a pH skála

A pH fogalom mellett gyakran használják a pOH fogalmát, ami az OH<sup>-</sup> ion (hidroxid ion) koncentrációjának negatív logaritmus.

$$\text{pOH} = -\lg [\text{OH}^-]$$

Vizes oldatban fenn áll a következő egyensúly:



Semleges oldatban  $[\text{H}^+] = [\text{OH}^-] = 10^{-7}$ , és  $K_v = [\text{H}^+] * [\text{OH}^-] = 10^{-14}$

Ez utóbbi egyenletet logaritmizálva adódik:  $\text{pH} + \text{pOH} = 14$

# Erős és gyenge savak (bázisok)

**A számítás menete szempontjából meg kell különböztetni erős illetve gyenge savakat, illetve bázisokat.**

Az erős savakra jellemző, hogy vizes oldatban teljes mértékben disszociált állapotban vannak.

Azaz a  $H^+$  ion koncentráció egyenlő lesz az eredeti erős sav koncentrációjával:

$$c_{\text{sav}} = c_{H^+}, \text{ azaz } pH = -\lg c_{\text{sav}}$$

# Erős és gyenge savak (bázisok)

Erős bázisok esetében a bázis koncentrációjával a hidroxid ionok koncentrációja lesz egyenlő, miután itt is teljes disszociációról vagy hidrolízisről beszélhetünk.

$$c_{\text{bázis}} = c_{\text{OH}^-}, \text{ azaz } \text{pOH} = -\lg c_{\text{bázis}}, \text{ a } \text{pH} = 14 - \text{pOH}$$

Például a 0,01 M HCl oldat pH-ja:  $c_{\text{sav}} = 0,01$ ,  $\text{pH} = -\lg 0,01 = 2$ .

A  $10^{-4}$  M NaOH oldat pH-ja:  $c_{\text{bázis}} = 10^{-4}$ ,  $\text{pOH} = -\lg 10^{-4} = 4$ ,  
 $\text{pH} = 14 - \text{pOH} = 10$ .

# Gyenge savak

**Gyenge savak esetében a disszociáció nem teljes, a folyamat egyensúlyra vezet, melyet a savi egyensúlyi állandó ( $K_s$ ) szabályoz.**

Ebben az esetben a számításnál előbb meg kell határozni a  $H^+$  ion koncentrációját, hogy ennek segítségével meghatározhassuk az oldat pH-ját.

# Gyenge savak

**Tekintsük az ecetsav példáját:**  $\text{CH}_3\text{COOH} = \text{CH}_3\text{COO}^- + \text{H}^+$

Ha meg kívánjuk határozni a  $0,1 \text{ mol/dm}^3$  koncentrációjú ecetsav oldat pH-ját az alábbi módon kell eljárni.

Töltsük ki az alábbi táblázatot:

	$\text{CH}_3\text{COOH}$	$\text{CH}_3\text{COO}^-$	$\text{H}^+$
kiindulási állapot	0,1	0	0
<u>átalakulás</u>	<u>- x</u>	<u>x</u>	<u>x</u>
egyensúlyi állapot	0,1-x	x	x

# Gyenge savak

Az ecetsav savi disszociációs állandója a tömeghatás törvényének segítségével:

$$K_s = \frac{[CH_3COO^-][H^+]}{[CH_3COOH]}, \text{ ahol } K_s = 1,78 \cdot 10^{-5} \text{ mol/dm}^3$$

Behelyettesítve a koncentrációkat az egyenletbe:

$$K_s = \frac{x^2}{(0,1-x)}$$

A másodfokú egyenletet megoldva  $x = 1,325 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3$

A keresett pH =  $-\lg [H^+] = -\lg x = 2,88$ .



# Gyenge savak

Gyenge savak esetében értelmezhetjük az ún. disszociációfokot, amely megmutatja az átalakulás mértékét.

Jele:  $\alpha$ , mértékegysége nincs.

Kiszámítása:  $\alpha = \text{átalakult mólok száma} / \text{eredeti mólok száma}$

A fenti példát tekintve:

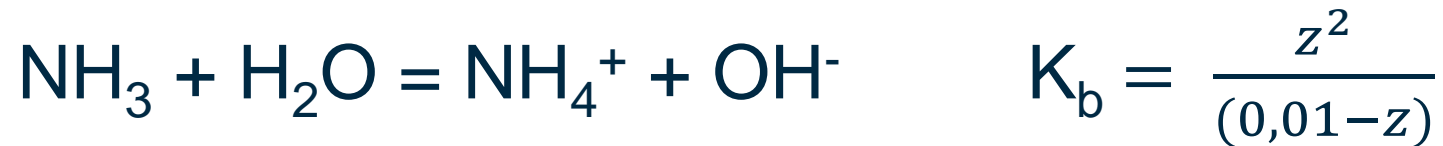
$$\alpha = x/c = 1,325 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3 / 0,1 \text{ mol/dm}^3 = 0,01325.$$

Tehát a disszociáció mértéke 1,325%.

# Gyenge bázisok

Gyenge bázisok esetében az eljárás teljesen azonos az előzővel, természetesen ez esetben  $z$  az  $\text{OH}^-$  ion koncentrációját jelöli, így logaritmus a pOH-t szolgáltatja majd, amiből a pH számítható.

Például 0,01 M ammónia oldat esetében:



kiindulási	0,01	0	0	$K_b = 1,78 \cdot 10^{-5} \text{ mol/dm}^3$
------------	------	---	---	---

<u>átalakulás</u>	<u>-z</u>	<u>z</u>	<u>z</u>	$z = 4,131 \cdot 10^{-4} \text{ mol/dm}^3$
-------------------	-----------	----------	----------	--

egyensúly	0,01-z	z	z	pOH = 3,38 azaz pH = 11,62
-----------	--------	---	---	----------------------------

# Gyenge sav disszociációja erős sav jelenlétében

**Amennyiben a gyenge sav mellett erős sav is jelen van, akkor a gyenge sav disszociációja visszaszorul, viszont az erős sav miatt a pH csökken.**

Határozzuk meg a  $0,1 \text{ mol/dm}^3$  koncentrációjú ecetsav oldat pH-ját  $0,05 \text{ mol/dm}^3$  sósav koncentráció mellett.

A korábbi táblázat az alábbi módon módosul:

	$\text{CH}_3\text{COOH} = \text{CH}_3\text{COO}^- + \text{H}^+$		
kiindulási állapot	0,1	0	0,05
átalakulás	- x	x	x
egyensúlyi állapot	$0,1-x$	x	$0,05+x$

# Gyenge sav disszociációja erős sav jelenlétében

$$K_s = \frac{[CH_3COO^-][H^+]}{[CH_3COOH]}, \text{ ahol } K_s = 1,78 \cdot 10^{-5} \text{ mol/dm}^3$$

Behelyettesítve a koncentrációkat az egyenletbe:

$$K_s = \frac{x \cdot (0,05 + x)}{(0,1 - x)}$$

A másodfokú egyenletet megoldva  $x = 3,559 \cdot 10^{-5} \text{ mol/dm}^3$

Azonban a  $[H^+] = 0,05 + x = 0,05003559 \text{ mol/dm}^3$

A keresett  $\text{pH} = -\lg [H^+] = -\lg x = 1,3$  (korábban  $\text{pH} = 2,88$ )

Ellenben  $\alpha = x/c = 3,559 \cdot 10^{-4}$ , azaz  $0,0356\%$  (korábban  $1,325\%$ )

# Gyenge sav sójának pH-ja (hidrolízis)

**Ha egy gyenge sav erős bázissal képzett sóját (pl. nátrium-acetát) vizes oldatba tesszük, akkor a gyenge sav savmaradékra reakcióba lép a vízzel, miközben hidroxid ionok keletkeznek. A folyamatot hidrolízisnek nevezzük.**

Ebben az esetben a hidrolízis egyensúlyi állandóját a  $K_s$  savi disszociációállandó segítségével a következőképpen számíthatjuk ki. Legyen a só koncentrációja  $0,2 \text{ mol/dm}^3$ .

# Gyenge sav sójának pH-ja (hidrolízis)



kiindulási állapot	0,2	0	0
<u>átalakulás</u>	<u>- y</u>	<u>y</u>	<u>y</u>
egyensúlyi állapot	0,2-y	y	y

A folyamat egyensúlyi állandója a hidrolízisállandó ( $K_h$ ).

$$K_h = \frac{y^2}{(0,2-y)}$$

# Gyenge sav sójának pH-ja (hidrolízis)

A hidrolízisállandó ( $K_h$ ) meghatározásának menete:

$$K_h = \frac{[CH_3COOH] * [OH^-]}{[CH_3COO^-]} = ([H^+] * [OH^-]) / \frac{[H^+] * [CH_3COO^-]}{[CH_3COOH]} =$$
$$([H^+] * [OH^-]) * \frac{[CH_3COOH]}{[H^+] * [CH_3COO^-]} = K_v / K_s.$$

$$\text{Tehát } K_h = K_v / K_s = 10^{-14} / 1,78 * 10^{-5} = 5,618 * 10^{-10} \text{ mol/dm}^3$$

# Gyenge sav sójának pH-ja (hidrolízis)

$K_h = \frac{y^2}{(0,2-y)}$ , de ne feledjük, ebben az esetben  $y$  az  $\text{OH}^-$  ion koncentrációját jelöli.

**Amennyiben a 0,2 és  $y$  között minimum három nagyságrend eltérés van, akkor a fenti számítás egyszerűsíthető:**

$$K_h = \frac{y^2}{(0,2-y)} \sim \frac{y^2}{0,2}, \text{ azaz } 0,2 \cdot K_h = y^2 \text{ innen } y = 1,06 \cdot 10^{-5}$$

Tehát az elhanyagolás jogos volt!

$\text{pOH} = -\lg y = 4,97$ , azaz a  $\text{pH} = 9,03$ .



# Nagyon híg erős sav pH-ja

**Ha az erős sav koncentrációja nagyon kicsi, akkor már a víz öndisszociációjának egyensúlyi folyamatát is figyelembe kell venni a pH meghatározása során.**

Számítsuk ki a  $10^{-8}$  mol/dm<sup>3</sup> koncentrációjú sósav oldat pH-ját!

A sósav teljes mértékben disszociál, így belőle  $10^{-8}$  mol/dm<sup>3</sup> H<sup>+</sup> ion származik.

A víz autoprotolízise:  $\text{H}_2\text{O} = \text{H}^+ + \text{OH}^-$   $K_v = 10^{-14}$  (mol/dm<sup>3</sup>)<sup>2</sup>

Az erős sav visszaszorítja a fenti egyensúlyt, ezért azt a következő képen írhatjuk fel:

# Nagyon híg erős sav pH-ja

Jelöljük  $u$ -val a víz disszociációjából származó ionok mennyiségét.

$$K_v = [\text{H}^+] * [\text{OH}^-] = (u + 10^{-8}) * u = 10^{-14}$$

Az egyenletet megoldva  $u = 9,512 * 10^{-8} \text{ mol/dm}^3$

Ebből a  $[\text{H}^+] = 9,512 * 10^{-8} + 10^{-8} = 1,0512 * 10^{-7} \text{ mol/dm}^3$

Így a  $\text{pH} = - \lg [\text{H}^+] = 6,98$ .

**Köszönöm a figyelmet!**