

PŮVODNÉ OZNÁMENIA

Výpočet koncentrácie vodíkových iónov v roztoku viacerých kyselín alebo zásad

J. KLAS

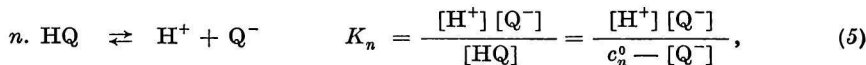
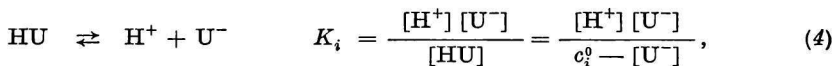
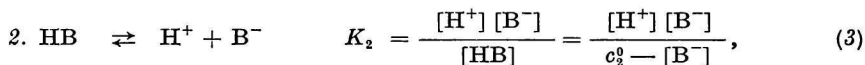
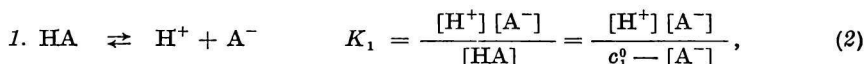
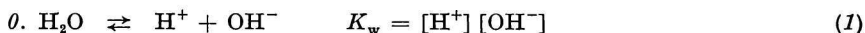
*Katedra anorganickej chémie Slovenskej vysokej školy technickej,
Bratislava*

Odvodzuje sa všeobecná rovnica, platná pre koncentráciu vodíkových (resp. hydroxidových) iónov vo vodnom roztoku ľubovoľného počtu kyselín (alebo zásad), ktoré disociujú do prvého stupňa. Navrhuje sa iteračná metóda pre praktický výpočet koncentrácie vodíkových iónov.

V tejto práci sa nadväzuje na práce E. Bishopa a L. Meitesa [1, 2], ktorí odvodili presnú rovnicu pre koncentráciu vodíkových iónov v prípade roztoku jednej kyseliny alebo zásady, tak, že sa odvodzuje všeobecná rovnica pre roztoky obsahujúce ľubovoľný počet kyselín alebo zásad. Rovnica je vhodná i pre praktický výpočet a v prípade použitia iteračnej metódy sa koncentrácia vodíkových iónov môže pomerne rýchlo a jednoducho vypočítať s vyhovujúcou presnosťou bežnými výpočtovými prostriedkami.

Teoretická časť

Ak uvažujeme vodný roztok n kyselín (ktoré sú málo disociované), proces disociácie sa môže vyjadriť ($n + 1$) rovnicami:



kde analytická koncentrácia i -tej kyseliny $c_i^0 = [\text{U}^-] + [\text{HU}]$; ostatné označenia vyplývajú z rovníc.

V dôsledku elektroneutrality roztoku platí:

$$[\text{H}^+] = [\text{A}^-] + [\text{B}^-] + \dots + [\text{U}^-] + \dots + [\text{Q}^-] + [\text{OH}^-] \quad (6)$$

Vyjadrením koncentrácie iónov ($[\text{A}^-]$, ..., $[\text{Q}^-]$) na základe rovníc (2—5) podľa i -tej kyseliny: $[\text{U}^-] = K_i c_i^0 / (K_i + [\text{H}^+])$ a koncentrácie iónov $[\text{OH}^-]$ podľa rovnice (1):

$[\text{OH}^-] = K_w/[\text{H}^+]$ a po dosadení týchto veličín do vzťahu (6) dostávame všeobecnú rovnicu:

$$[\text{H}^+] = \frac{K_1 c_1^0}{K_1 + [\text{H}^+]} + \frac{K_2 c_2^0}{K_2 + [\text{H}^+]} + \dots + \frac{K_i c_i^0}{K_i + [\text{H}^+]} + \dots + \frac{K_n c_n^0}{K_n + [\text{H}^+]} + \frac{K_w}{[\text{H}^+]}, \quad (7)$$

ktorá vyjadruje koncentráciu vodíkových iónov v roztokoch obsahujúcich n kyselín.

Podľa tejto rovnice v parciálnych prípadoch roztokov jednej, dvoch, troch, ... kyselín možno koncentráciu vodíkových iónov vyjadriť v podobe algebrického mnohočlena $(n + 2)$ -tého stupňa.

Pre roztok jednej kyseliny ($c_2^0 = c_3^0 = c_n^0 = 0$) podľa (7):

$$[\text{H}^+] = \frac{K_1 c_1^0}{K_1 + [\text{H}^+]} + \frac{K_w}{[\text{H}^+]}. \quad (8)$$

Túto rovnicu môžeme podľa [2] upraviť na tvar

$$[\text{H}^+]^2 + K_1 [\text{H}^+] - (c_1^0 K_1 + K_w) [\text{H}^+] - K_w K_1 = 0 \quad (9)$$

Rovnice pre roztoky dvoch, troch alebo viacerých kyselín sú parciálnymi prípadmi všeobecnej rovnice (7), ktoré v prípade vyjadrovania vo forme algebrických mnohočlenov okrem pomernej zložitosti majú obmedzenú platnosť. Okrem toho rovnica (7) je vhodná aj pre praktický výpočet koncentrácie vodíkových iónov iteračnou metódou [3]. Uvedená rovnica sa môže uvádzať v skrátenej forme:

$$[\text{H}^+] = F([\text{H}^+]), \quad (10)$$

kde podľa (7):

$$F([\text{H}^+]) = \sum_{i=1}^{i=n} \frac{K_i c_i^0}{K_i + [\text{H}^+]} + \frac{K_w}{[\text{H}^+]}. \quad (11)$$

Pre vodný roztok n zásad platí rovnica

$$[\text{OH}^-] = \sum_{i=1}^{i=n} \frac{K'_i c_i^0}{K'_i + [\text{OH}^-]} + \frac{K_w}{[\text{OH}^-]}, \quad (12)$$

analogická rovnici (7). K'_i a c_i^0 sú konštanty disociácie a analytické koncentrácie zásad. Ostatné vzťahy, ako aj metóda výpočtu koncentrácie hydroxidových iónov sú analogické v tom zmysle, že namiesto koncentrácie vodíkových iónov sa uvažuje koncentrácia hydroxidových iónov.

РАСЧЕТ КОНЦЕНТРАЦИЙ ВОДОРОДНЫХ ИОНОВ В РАСТВОРЕ НЕСКОЛЬКИХ КИСЛОТ ИЛИ ОСНОВАНИЙ

Я. Клас

Кафедра неорганической химии Словацкого политехнического института,
Братислава

В работе описывается вывод общего уравнения для расчета концентрации водородных (или гидроксильных) ионов в водном растворе любого числа (n) кислот (или оснований), диссоциирующих до первой степени:

$$[\text{H}^+] = \sum_{i=1}^{=n} \frac{K_i c_i^0}{K_i + [\text{H}^+]} + \frac{K_w}{[\text{H}^+]} = F([\text{H}^+]),$$

где $[\text{H}^+]$ = концентрация водородных ионов,

K_i, c_i^0 = константа диссоциации и аналитическая концентрация i -той кислоты,

K_w = произведение ионов воды.

(Для расчета концентрации $[\text{OH}^-]$ в растворе n -оснований применимо аналогичное уравнение.)

Практический расчет концентраций можно произвести сравнительно легко итерационным методом.

Preložila T. Dillingierová

BERECHNUNG DER WASSERSTOFFIONENKONZENTRATION IN LÖSUNGEN MEHRERER SÄUREN ODER BASEN

J. Klas

Lehrstuhl für anorganische Chemie an der Slowakischen Technischen Hochschule,
Bratislava

In der vorliegenden Arbeit wird eine allgemein gültige Formel zur Berechnung der Wasserstoffionenkonzentration abgeleitet, und zwar für die wäßrige Lösung einer beliebigen Anzahl (n) von Säuren oder Basen, die in der ersten Stufe dissoziieren:

$$[\text{H}^+] = \sum_{i=1}^{i=n} \frac{K_i c_i^0}{K_i + [\text{H}^+]} + \frac{K_w}{[\text{H}^+]} = F([\text{H}^+]),$$

wobei $[\text{H}^+]$ = Wasserstoffionenkonzentration,

K_i, c_i^0 = Dissoziationskonstante und analytische Konzentration der i -ten Säure,

K_w = Ionenprodukt des Wassers.

Die praktische Berechnung der Konzentrationen kann nach der Iterationsmethode leicht durchgeführt werden.

Preložil M. Liška

LITERATÚRA

1. Bishop E., *Anal. Chim. Acta* **28**, 299 (1963).
2. Meites L., Bishop E., *Anal. Chim. Acta* **29**, 484 (1963).
3. Demidovič B. P., Maron I. A., *Osnovy vyčísľiteľnej matematiki*, 135. Gosudarstvennoje izdatelstvo fiziko-matematičeskoj literatury, Moskva 1963.

Do redakcie došlo 24. 12. 1964

Adresa autora:

Inž. Ján Klas, Katedra anorganickej chémie SVŠT, Bratislava, Jánska 1.