



一次改性实验计算

作者：非非

日期：2024/12/14

目 录

涉及到的计算一 配置 500mL 质量分数为 16% 的乙酸溶液	1
1.1 已知条件	1
1.2 基本方程	1
1.3 求解过程	1
1.4 求解结果	1
1.5 配置步骤	1
1.6 注意事项	2
涉及到的计算二 配置 500mL pH 为 5.6 的醋酸缓冲溶液	3
2.1 已知条件	3
2.2 亨德森-哈塞尔巴尔赫方程	3
2.3 求解过程	3
2.4 求解结果	4
2.5 配置步骤	4
2.6 注意事项	4
文献引用	5

涉及到的计算一 配置 500mL 质量分数为 16% 的乙酸溶液

1.1 已知条件

- 目标溶液体积: $V_t = 500ml$
- 目标溶液质量分数: $\omega = 16\% = 0.16$
- 冰醋酸(无水乙酸)密度: $\rho_{CH_3COOH} = 1.049g/ml$
- 水的密度: $\rho_{H_2O} = 1g/ml$

1.2 基本方程

$$V_t = V_{H_2O} + V_{CH_3COOH} \quad (1.1)$$

$$\rho_t V_t = \rho_{H_2O} V_{H_2O} + \rho_{CH_3COOH} V_{CH_3COOH} \quad (1.2)$$

$$0.16 = \frac{\rho_{CH_3COOH} V_{CH_3COOH}}{\rho_{H_2O} V_{H_2O} + \rho_{CH_3COOH} V_{CH_3COOH}} \quad (1.3)$$

1.3 求解过程

从方程式 (1.3) 开始推导 V_{H_2O} 的表达式:

$$0.16 = \frac{\rho_{CH_3COOH} V_{CH_3COOH}}{\rho_{H_2O} V_{H_2O} + \rho_{CH_3COOH} V_{CH_3COOH}} \quad (1.4)$$

$$0.16(\rho_{H_2O} V_{H_2O} + \rho_{CH_3COOH} V_{CH_3COOH}) = \rho_{CH_3COOH} V_{CH_3COOH} \quad (1.5)$$

$$0.16\rho_{H_2O} V_{H_2O} = \rho_{CH_3COOH} V_{CH_3COOH} - 0.16\rho_{CH_3COOH} V_{CH_3COOH} \quad (1.6)$$

$$0.16\rho_{H_2O} V_{H_2O} = 0.84\rho_{CH_3COOH} V_{CH_3COOH} \quad (1.7)$$

$$V_{H_2O} = \frac{0.84\rho_{CH_3COOH}}{0.16\rho_{H_2O}} \times V_{CH_3COOH} \quad (1.8)$$

将已知的密度值代入式 (1.8):

$$V_{H_2O} = \frac{0.84 \times 1.049}{0.16 \times 1} \times V_{CH_3COOH} \quad (1.9)$$

$$V_{H_2O} = 5.50725 V_{CH_3COOH} \quad (1.10)$$

将式 (1.10) 代入式 (1.1):

$$500 = 5.50725 V_{CH_3COOH} + V_{CH_3COOH} \quad (1.11)$$

$$500 = 6.50725 V_{CH_3COOH} \quad (1.12)$$

$$V_{CH_3COOH} = \frac{500}{6.50725} = 76.83737ml \quad (1.13)$$

由式 (1.1) 求得 V_{H_2O} :

$$V_{H_2O} = 500 - 76.83737 = 423.16262ml \quad (1.14)$$

1.4 求解结果

- 无水乙酸(冰醋酸)体积: $V_{CH_3COOH} = 76.83737ml$
- 水的体积: $V_{H_2O} = 423.16262ml$

1.5 配置步骤

- 量取水的体积 $V_{H_2O} = 400ml$
- 小心量取无水乙酸(冰醋酸)体积 $V_{CH_3COOH} = 76.83737ml$
- 将步骤 2 中量取的酸缓慢加入步骤 1 中量取的水中边加边搅拌,转移至容量瓶中定容。

1.6 注意事项

实际操作时,应先加入约 400 ml 水,再缓慢加入 76.83737 ml 无水乙酸,最后用水稀释至 500ml 刻度,以确保安全和准确。

涉及到的计算二 配置 500mL pH 为 5.6 的醋酸缓冲溶液

为获得最高最优的缓冲容量,我们选择一个较高的总浓度。考虑到实际应用和溶解度限制,这里选总浓度为 0.5 mol/L。使用三水合醋酸钠结晶体(醋酸钠三水合物)和无水乙酸,配置 500 mL pH=5.6 的醋酸缓冲溶液。

2.1 已知条件

- 缓冲体系:乙酸(CH_3COOH)和醋酸根离子(CH_3COO^-)
- 乙酸电离常数 $pK_a \approx 4.76$
- 目标 $pH = 5.6$
- 选择总浓度 $c_t = 0.5\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$

2.2 亨德森-哈塞尔巴尔赫方程

Henderson-Hasselbalch equation 形式如下(或查阅分析化学书籍 [11])

$$pH = pK_a + \log\left(\frac{[\text{CH}_3\text{COO}^-]}{[\text{CH}_3\text{COOH}]}\right) \quad (2.1)$$

代入已知值得,

$$5.6 = 4.76 + \log\left(\frac{[\text{CH}_3\text{COO}^-]}{[\text{CH}_3\text{COOH}]}\right) \quad (2.2)$$

求得,

$$\frac{[\text{CH}_3\text{COO}^-]}{[\text{CH}_3\text{COOH}]} = 10^{0.84} \approx 6.918 \quad (2.3)$$

2.3 求解过程

缓冲溶液中乙酸(CH_3COOH)和醋酸根离子(CH_3COO^-)的总浓度。具体来说,总浓度 (c_t) 是指这两种物质在溶液中浓度的总和。

最优缓冲能力的总浓度通常取决于所选的缓冲体系和目标 pH 值,一般来说,当缓冲溶液的浓度较高时,缓冲能力也会更强。然而,最优缓冲容量并没有固定的数值,而是与实际应用相关。通常情况下,我们会选择一个既能保证较高缓冲容量,又不至于因为溶解度限制或其他因素造成溶液不稳定的浓度。

这里我们取总浓度为 0.5 mol/L 作为缓冲溶液的浓度,这个浓度值已经较为理想。对于许多缓冲溶液系统来说,浓度范围一般是 0.1 mol/L 到 1 mol/L,在这个范围内,缓冲容量比较高且相对稳定。

$$c_t = [\text{CH}_3\text{COO}^-] + [\text{CH}_3\text{COOH}] = 0.5\text{mol}\cdot\text{L}^{-1} \quad (2.4)$$

$$[\text{CH}_3\text{COO}^-] = 6.918 \times [\text{CH}_3\text{COOH}] \quad (2.5)$$

$$6.918 \times [\text{CH}_3\text{COOH}] + [\text{CH}_3\text{COOH}] = 0.5\text{mol}\cdot\text{L}^{-1} \quad (2.6)$$

$$7.918 \times [\text{CH}_3\text{COOH}] = 0.5\text{mol}\cdot\text{L}^{-1} \quad (2.7)$$

$$[\text{CH}_3\text{COOH}] = \frac{0.5}{7.918} \approx 0.0631\text{mol}\cdot\text{L}^{-1} \quad (2.8)$$

$$[\text{CH}_3\text{COO}^-] = 0.5 - 0.0631 = 0.4369\text{mol}\cdot\text{L}^{-1} \quad (2.9)$$

总体积为 500 mL:

$$n_{\text{CH}_3\text{COOH}} = 0.0631\text{mol}\cdot\text{L}^{-1} \times 0.5\text{L} = 0.03155 \text{ mol} \quad (2.10)$$

$$n_{\text{CH}_3\text{COO}^-} = 0.4369\text{mol}\cdot\text{L}^{-1} \times 0.5\text{L} = 0.21845 \text{ mol} \quad (2.11)$$

醋酸钠三水合物($\text{CH}_3\text{COONa}\cdot 3\text{H}_2\text{O}$)的摩尔质量:

$$M = 136.09\text{g}\cdot\text{mol}^{-1} \quad (2.12)$$

则醋酸钠三水合物的质量计算如下,

$$m_{\text{CH}_3\text{COONa}\cdot 3\text{H}_2\text{O}} = 0.21845 \text{ mol} \times 136.09\text{g}\cdot\text{mol}^{-1} \approx 29.73 \pm 0.01\text{g} \quad (2.13)$$

无水乙酸密度约为 $1.049 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$,摩尔质量为 $60.05 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$,则无水冰醋酸的体积计算如下,

$$n_{\text{CH}_3\text{COOH}} = 0.03155 \text{ mol} \quad (2.14)$$

$$m_{\text{CH}_3\text{COOH}} = 0.03155 \text{ mol} \times 60.05 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1} \approx 1.895 \text{ g} \quad (2.15)$$

$$V_{\text{CH}_3\text{COOH}} = \frac{1.895 \text{ g}}{1.049 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}} \approx 1.81 \text{ cm}^3 \approx 1.81 \pm 0.01 \text{ mL} \quad (2.16)$$

2.4 求解结果

1. 29.73 g 醋酸钠三水合物
2. 1.81 mL 无水冰醋酸

2.5 配置步骤

1. 称取 29.73 g 醋酸钠三水合物,溶于约 400 mL 蒸馏水中。
2. 小心量取 1.81 mL 无水冰醋酸,缓慢加入上述溶液中,搅拌均匀。
3. 用蒸馏水定容至 500 mL。
4. 用校准过的 pH 计测量溶液 pH 值,如需要可微调 pH 至 5.6。

2.6 注意事项

1. 此配方提供了较高的缓冲容量,适用于需要强缓冲能力的实验。
2. 确保所有组分完全溶解。
3. 配制过程中应在通风橱中进行,避免吸入过多醋酸蒸气。
4. 储存时注意密封,避免吸收空气中的 CO_2 影响 pH 值。

文献引用

- [1] 武汉大学, 分析化学 (第 6 版) (上册), 第 6 版 本. 高等教育出版社, 2016, 页 134–135.