

Studiewijzer Chemie 2
Chemische evenwichten



Jessica Zweers
(ZWJE)

Inhoudsopgave

Inleiding.....	4
.....	5
Week 1	5
1. De gaswetten	6
2. Oplossingen	10
3. Oplosbaarheid.....	11
4. Verzadigde oplossingen.....	12
5. Concentraties in oplossingen.....	13
6. Molariteit.....	14
7. Percentages, promillages etc.....	24
8. Verdunningen	28
Week 2	33
9. Thermodynamica	34
10. Enthalpie.....	36
11. Entropie	37
12. Gibbs vrije energie	38
13. De bomcalorimeter	40
14. Reactiesnelheid.....	46
Voorbeeld tentamenvragen	49
Week 3	50
15. Evenwichtsreacties.....	51
16. Rekenen met evenwichtsreacties	55
17. Het principe van LeChatelier en het verschuiven van evenwichten	61
Voorbeeld tentamenvraag	63
Week 4	64
18. Zuren	65
19. Basen	68
20. Zuurconstanten	71
21. Baseconstanten.....	74
22. De waterconstante	75
23. Zuur-base paren	77
24. Het omrekenen van de K_a naar de K_b	80
25. Rekenen met pH en pOH	82
26. Rekenen aan het oplossen van een sterk zuur of een sterke base in water	86
27. Rekenen aan het oplossen van een zwak zuur of een zwakke base in water	88
28. Zuur-base reacties.....	92

Voorbeeld tentamenvragen	94
Week 5	95
29. Meerwaardige zuren	96
30. Amfolieten	101
Week 6	103
31. De Henderson Hasselbalch-vergelijking	104
32. Buffers	108
Voorbeeld tentamenopgaven.....	114
Antwoorden	115

Inleiding

Chemie 2 gaat over chemisch rekenen. Voor veel studenten blijkt dit een erg lastig vak te zijn, omdat er veel verschillende formules en rekenstappen gedaan moeten worden. Bij dit vak is het daarom erg belangrijk om zelf veel te oefenen met de lesstof. **Het boek doorlezen is niet afdoende om dit vak te halen!** Het lastigste bij Chemie 2 is om zelf te bepalen welke formules er gebruikt moeten worden. Met name wanneer er veel stappen nodig zijn om tot het eindantwoord te komen, is het belangrijk dat je zelf weet welke stappen er genomen moeten worden. Dit leer je alleen door zelf veel te oefenen. Per onderdeel staan een paar opgaven vetgedrukt. Wanneer je deze goed kunt, hoeft je de andere opgaven niet te doen. De niet-vetgedrukte opgaven zijn bedoeld als extra oefening.

Colleges

Elke week zijn er twee colleges van elk 90 minuten. Het zal per les verschillen hoe deze 90 minuten worden ingedeeld. Een groot deel zal bestaan uit het zelf maken van opgaven. De werkcollegeopgaven staan niet in de deze studiewijzer. Deze zullen tijdens de lessen uitgereikt worden en worden ook op BlackBoard geplaatst. De uitwerkingen van de werkcollegeopgaven komen **niet** op Blackboard. Er zullen weinig powerpoint sheets gebruikt worden bij dit vak. De uitleg zal grotendeels plaats vinden op het bord. Zorg dus dat je tijdens de lessen aantekeningen maakt. De sheets die wel worden getoond, worden ook op BlackBoard geplaatst.

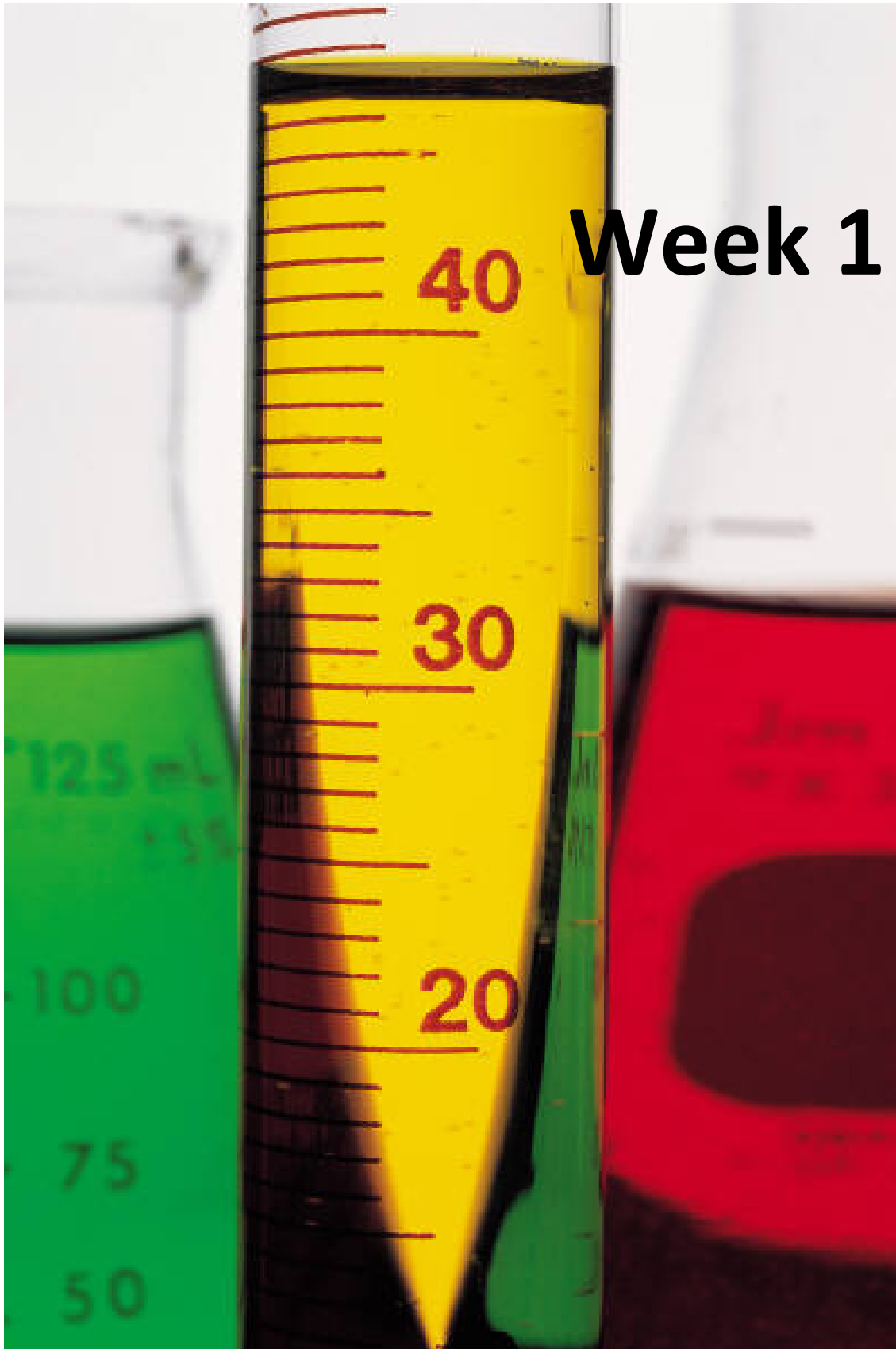
Formuleblad

Voor het tentamen dien je zelf een eenzijdig, handgeschreven formuleblad samen te stellen. Hierop mogen alleen formules staan en geen hele zinnen. Houd vanaf het begin het formuleblad bij en gebruik deze ook tijdens het maken van de opgaven, om te controleren of het formuleblad compleet en duidelijk genoeg is.

Rekenmachine

Tijdens het tentamen zijn rekenmachines toegestaan, maar mobiele telefoons niet. Zorg daarom dat je vanaf het begin van het vak een goede rekenmachine meeneemt naar de hoorcolleges en werkcolleges.

	Lesstof
Week 1 Oplossen en verdunnen	Denniston paragraaf 5.1, 6.1 t/m 6.3, 6.5 Studiewijzer paragraaf 1 t/m 8
Week 2 Thermodynamica	Denniston paragraaf 7.1 t/m 7.3 Studiewijzer paragraaf 9 t/m 14
Week 3 Chemische evenwichten	Denniston paragraaf 7.4 Studiewijzer paragraaf 15 t/m 17
Week 4 Zuren en basen	Denniston paragraaf 8.1 t/m 8.3 Studiewijzer paragraaf 18 t/ 28
Week 5 Buffers	Denniston paragraaf 8.4 Studiewijzer paragraaf 29 en 30
Week 6 Enzymkinetiek	Denniston paragraaf 8.4 Studiewijzer paragraaf 31 en 32
Week 7 Herhaling	



1. De gaswetten

Zoals bij de reactievergelijking van verbrandingen al te zien was, ontstaan er bij sommige reacties gassen, of zijn gassen als reactanten betrokken bij een reactie. Hoeveelheden gassen worden doorgaans niet afgewogen, maar de hoeveelheid wordt doorgaans in een volume aangegeven. De hoeveelheid gas die in een bepaald volume zit hangt af van de **druk** en de **temperatuur**.

Deze paragraaf is bedoeld om uit te leggen hoe er gerekend kan worden met volumes van gassen die ontstaan bij reacties.

Ideale gassen

Veel gassen gedragen zich volgens bepaalde wetten als het gaat om volume, temperatuur, druk, hoeveelheid etc. De gassen die deze wetten volgen noemen we **ideale gassen**. Tenzij anders vermeld, gaan we er vanuit dat elk gas zich als een ideaal gas gedraagt.

Symbolen en eenheden

- **Volume (V)** wordt doorgaans gemeten in **liter** (dm³), maar soms ook wel in kubieke meters (m³)
- **Temperatuur (T)** wordt **altijd** weergegeven in **Kelvin** (let op! Dus geen Celcius!!!). In formules moet je dus ook altijd de temperatuur in Kelvin invullen. Om om te rekenen van graden Celsius naar Kelvin tel je er 273 graden bij op (het nulpunt van Kelvin ligt bij -273 °C).
- Voor **druk (P)** zijn er verschillende eenheden. Bij berekeningen wordt de eenheid **atmosfeer** (atm) doorgaans gebruikt. Een andere eenheid is Pascal (Pa). Om om te rekenen tussen deze beide eenheden:
 $1 \text{ atm} = 1,01 \cdot 10^5 \text{ Pa} (= 101 \text{ kPa})$.

Wet van Boyle

Deze wet beschrijft dat het volume van een gas **omgekeerd evenredig** is met de druk. Dus hoe hoger de druk, hoe kleiner het volume. Als je gas dus samenperst (bijvoorbeeld in een fietsband), dan neemt de druk in de fietsband toe.

De verhouding tussen druk en volume is constant: $P \cdot V = \text{constant}$

Wanneer je in één bepaalde situatie de temperatuur en de druk weet, dan kun je berekenen hoe de druk/volume bij een andere druk of volume zal zijn. Hierbij is een **belangrijke voorwaarde** dat de hoeveelheid gas (hoeveel mol) en de temperatuur **gelijk blijven**. Geld deze voorwaarde niet, dan mag je deze wet niet gebruiken!

$$P_1 \cdot V_1 = P_2 \cdot V_2$$

P_1 = druk in situatie 1 (atm)

P_2 = druk in situatie 2 (atm)

V_1 = het volume in situatie 1 (l)

V_2 = volume in situatie 2 (l)

De wet van Charles

Deze wet beschrijft dat het volume van een gas **recht evenredig** is aan de temperatuur van een gas. Dus hoe groter de temperatuur, hoe groter het volume. Gassen zetten dus uit wanneer je ze verwarmt (denk aan een luchtballon). De verhouding tussen volume en temperatuur is constant:

$$\frac{V}{T} = \text{constant}$$

Ook hier kun je vanuit een bekende situatie berekenen hoe het volume of de temperatuur zal zijn in een andere situatie. Hierbij is een **belangrijke voorwaarde** dat de druk en de hoeveelheid gas (hoeveel mol) **gelijk blijven**.

$$\frac{V_1}{T_1} = \frac{V_2}{T_2}$$

V1 = volume in situatie 1 (l)

T1 = temperatuur in situatie 1 (K)

V2 = volume in situatie 2 (l)

T2 = temperatuur in situatie 2 (K)

Nb. Let erop dat je in Kelvin rekent!

De gecombineerde gaswet

Zoals de naam al doet vermoeden is de gecombineerde gaswet een combinatie van de wetten van Charles en Boyle:

$$\frac{P_1 * V_1}{T_1} = \frac{P_2 * V_2}{T_2}$$

P1 = druk in situatie 1 (atm)

V1 = volume in situatie 1 (l)

T1 = temperatuur in situatie 1 (K)

P2 = druk in situatie 2 (atm)

V2 = volume in situatie 2 (l)

T2 = temperatuur in situatie 2 (K)

Hierbij is de enige voorwaarde dat de hoeveelheid gas gelijk blijft.

De wet van Avogadro

De laatste gaswet is de wet van Avogadro. Deze stelt dat **een gelijke hoeveelheid gas (in mol) altijd hetzelfde volume heeft bij gelijke druk of temperatuur**. Dat betekent dus dat elk gas hetzelfde volume heeft, zolang je er maar evenveel mol van hebt. Een ballon met 1 mol zuurstof zal dus exact even groot zijn als een ballon met 1 mol helium. Helium is veel lichter dan lucht en deze ballon zal dan ook opstijgen, maar het volume van beide ballon is exact gelijk.

Het molaire volume van gas

Uit de wet van Avogadro volgt dat 1 mol gas bij **standaard temperatuur en druk** (STP = standaard temperature and pressure) **altijd** hetzelfde volume heeft.

Het volume van 1 mol gas is bij 273 Kelvin en 1 atm druk dus **altijd** 22,4 liter, ongeacht welk gas het is. Dit volume van 1 mol gas bij STP noemen we het molaire volume.

De ideale gaswet

De ideale gaswet is de wet waarin **alle voorgaande gaswetten** mee genomen worden (dus ook de wet van Avogadro.

$$P * V = n * R * T$$

Hierbij is R de gasconstante: R = 0,0821 (L atm/K mol)

P = druk (atm)

V = volume (l)

n = hoeveelheid gas (mol)

T = temperatuur (K)

Deze wet kun je altijd toepassen zolang je alle gegevens hebt om de vergelijking in te vullen.

Voorbeeld

Een ballon bevat 1,00 liter ideaal gas bij 20 °C Celsius. De kamer waarin de ballon zich bevindt warmt op tot 32 °C, maar de druk blijft gelijk. Wat is nu het volume van de ballon?

Situatie 1: Volume = 1 liter
 Temperatuur = 20 °C = 293 K

Situatie 2: Volume = onbekend
 Temperatuur = 32 °C = 305 K

De druk blijft gelijk en de hoeveelheid gas ook, dus kan de wet van Charles gebruikt worden:

$$\frac{V_1}{T_1} = \frac{V_2}{T_2}$$

Invullen: $\frac{1}{293} = \frac{V_2}{305}$

Om V2 te berekenen kan je de formule omschrijven door beide kanten van de vergelijking te vermenigvuldigen met 305:

$$V_2 = \frac{1 * 305}{293} = 1,04 \text{ liter}$$

Dus bij 32 °C is de ballon iets groter en heeft een volume van 1,04 liter.

Voorbeeld

Wat is het volume van 6,00 mol CO₂ bij 25 °C en 1 atmosfeer? (Het molaire volume is 22,4 liter bij STP)

Optie 1

1 mol CO₂ heeft een volume van 22,4 liter bij 1 atm en 273 K.

6 mol CO₂ heeft dus een volume van 6 * 22,4 = 134,4 liter bij STP.

Nu moeten we dit volume nog omrekenen naar de gevraagde situatie:

V1 = 134,4 liter	V2 = onbekend
T1 = 273 K	T2 = 25 °C = 298 K
P1 = 1 atm	P2 = 1 atm

Omdat de druk gelijk blijft kun je de wet van Charles gebruiken (hoewel je ook de gecombineerde gaswet prima kunt gebruiken).

$$\frac{V_1}{T_1} = \frac{V_2}{T_2}$$

Invullen: $\frac{134,4}{273} = \frac{V_2}{298}$

Om V2 te berekenen kunnen we beide kanten van de vergelijking vermenigvuldigen met 298:

$$V2 = \frac{134,4 * 298}{273} = 146,7 \text{ liter}$$

Dus het volume van 6,00 mol CO₂ bij 25 °C en 1 atmosfeer is 147 liter.

Optie 2

Je kunt ook met de ideale gaswet deze rekensom in één keer oplossen.

P = 1 atm

V = onbekend

N = 6,00 mol

R = 0,0821 L atm/K mol

T = 298 K

Invullen: $P * V = n * R * T$

$$1 * V = 6,00 * 0,0821 * 298$$

$$V = \frac{6,00 * 0,0821 * 298}{1} = 146,8 \text{ liter}$$

Nu kom je dus nagenoeg op hetzelfde antwoord uit, namelijk 147 liter.

Het maakt niet uit welke van deze aanpakken je gebruikt om tot je antwoord te komen, zolang de berekening er maar bij staat en deze klopt.

Oefeningen

1. Bereken het volume van 2,5 mol O₂ bij 20 °C en 1 atmosfeer. (Het molaire volume is 22,4 liter bij STP)
2. Je verbrandt 1,0 mol sucrose (C₁₂H₂₂O₁₁)
 - a) Geef de reactievergelijking van de verbranding van sucrose
 - b) Hoeveel mol zuurstof is er nodig voor deze reactie?
 - c) Bereken het volume dat deze zuurstof zal hebben bij 20 °C en 1 atm.
3. **Je eet een tablet druivensuiker (5 gram glucose). Wat is het volume CO₂ dat je uitademt wanneer deze druivensuiker in je lichaam volledig wordt verbrand? Ga uit van een temperatuur van 20 °C en 1 atmosfeer druk.**

2. Oplossingen

Een oplossing is een homogeen (uniform) mengsel van één of meerdere substanties. De stof die in de grootste hoeveelheid aanwezig is, wordt het **oplosmiddel** (in het Engels **solvent**) genoemd. Dit is vaak water, maar kan ook een andere vloeistof zijn, zoals alcohol, aceton, etc. het kan zelfs zijn dat het oplosmiddel geen vloeistof is, maar een gas (bijvoorbeeld in lucht) of een vaste stof (zoals bij metaallegeringen). De stoffen die in kleinere hoeveelheden aanwezig zijn in een oplossing worden **opgeloste stoffen (solutes)** genoemd.

Niet elk mengsel van stoffen is een oplossing. Van een echte oplossing kun je de onderdelen niet scheiden via filtratie. De opgeloste stoffen 'zakken ook niet uit', dus als je een oplossing laat staan, dan zullen de opgeloste stoffen dus niet naar de bodem zinken. De deeltjes in een echte oplossing worden één nieuwe vloeistof, die helder is (niet per se **kleurloos**). Wanneer je met een lamp door zo'n oplossing schijnt, zal deze het licht niet verstrooien. Hierdoor wordt de baan van het licht niet zichtbaar.

Wanneer een mengsel geen echte oplossing is, dan kunnen de stoffen wel gescheiden worden door filtratie. Wanneer de deeltjes in zo'n niet echte oplossing heel klein zijn, spreken we van een **colloïdale suspensie**. De deeltjes zijn dan kleiner dan 1 nm. Op het eerste oog lijkt zo'n colloïdale suspensie vaak helder, omdat de deeltjes te klein zijn om te zien, maar wanneer je met een lamp op zo'n oplossing schijnt, dan zie je de baan van het licht door de oplossing, omdat de deeltjes wel het licht verstrooien (zie figuur 2). Dit is bijvoorbeeld ook het geval als de zon schijnt in een stoffige ruimte, je ziet dan precies de baan van het zonlicht. Ook bij mist kun je de baan van het licht van de koplampen van de auto's zien, omdat het licht verstrooid wordt.

Wanneer de deeltjes groter zijn, dan ziet de oplossing er troebel uit. Zo'n oplossing noemen we een **suspensie**. Suspensies zakken na verloop van tijd uit.

Wanneer **twee vloeistoffen** niet goed oplossen (bijvoorbeeld olie en water), dan spreken we van een **emulsie**. Dit zijn troebele oplossingen, waarbij de vloeistoffen zich ook van elkaar zullen scheiden. Wanneer je olie en water samenvoegt en goed schud, dan zul je eerst een wittige oplossing krijgen, die uiteindelijk weer in twee losse vloeistoffen verandert (olie boven en water onder).



Figuur 1. (figuur 6.1 uit Denniston). Het verschil tussen een colloïdale oplossing (links) en een echte oplossing (rechts). Beiden lijken helder te zijn, maar bij de colloïdale oplossing is de baan van de lamp door de oplossing zichtbaar (het licht wordt verstrooid) en bij de echte oplossing zie je dat niet.

3. Oplosbaarheid

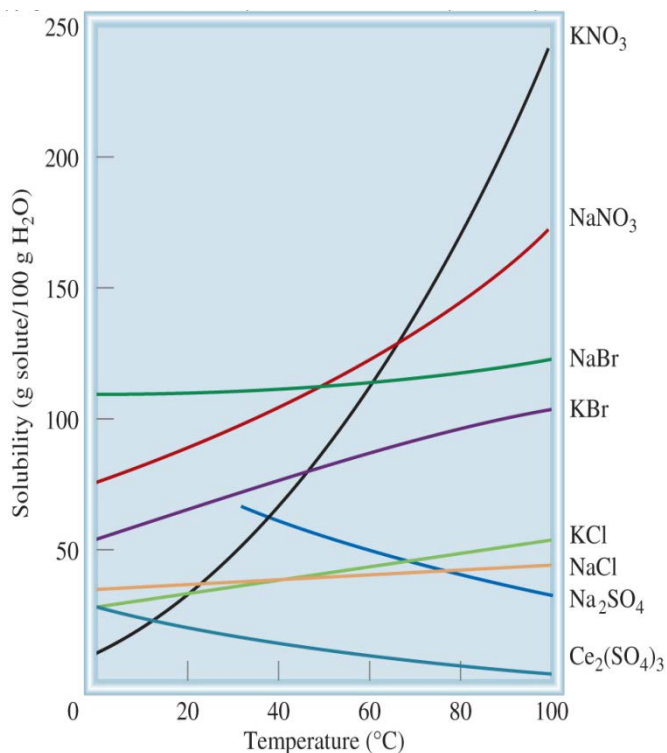
De **mate van oplosbaarheid** van een stof hangt af van een aantal factoren. Om de oplosbaarheid te bepalen, wordt bepaald hoeveel gram van een stof er opgelost kan worden in **100 gram water**.

Factoren die de oplosbaarheid bepalen:

1. **Like dissolves like:** een polaire stof zal goed oplossen in een polair oplosmiddel (bijvoorbeeld water) en een apolaire stof zal goed oplossen in een apolair oplosmiddel (bijv. hexaan, benzeen). Hoe groter het verschil in polariteit, hoe slechter de oplosbaarheid zal zijn.

2. **Temperatuur:** veel stoffen lossen beter op bij een hogere temperatuur (bijvoorbeeld suiker en zout), maar andere stoffen lossen beter op bij een lagere temperatuur (zie figuur 3). Het laatste blijkt bijvoorbeeld wanneer je ammonia gebruikt om een oppervlak te ontvetten voordat je gaat verven. Hiervoor wordt ammonia opgelost in water. Dat gaat beter in koud water, dus hiervoor wordt geen warm water gebruikt.

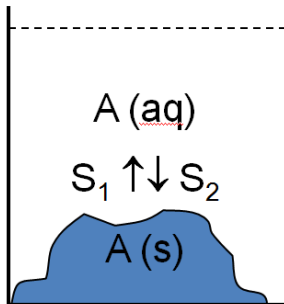
3. **Druk:** druk heeft weinig invloed op de oplosbaarheid van vaste stoffen en vloeistoffen, maar een grote invloed op de oplosbaarheid van gassen. Voor de oplosbaarheid geldt de **wet van Henry**. Deze wet stelt: hoe hoger de druk, hoe meer gas er opgelost kan worden in een vloeistof. Dit is bijvoorbeeld van groot belang voor duikers, ze kunnen een levensbedreigende ziekte genaamd de **caissonziekte** oplopen wanneer zij te snel van grote diepte opstijgen. Opgelost gas in hun bloed wordt dan ineens gas wanneer de druk afneemt, waardoor zij gasbelletjes in hun bloedvaten krijgen.



Figuur 2. (figuur 6.2 uit Denniston). Oplosbaarheid in g opgeloste stof/100 g water. Sommige stoffen, zoals KNO_3 en KBr , KCl , hebben een toenemende oplosbaarheid bij een hogere temperatuur. van andere stoffen, zoals Na_2SO_4 en $\text{Ce}_2(\text{SO}_4)_3$ neemt de oplosbaarheid juist af bij een hogere temperatuur.

4. Verzadigde oplossingen

Een verzadigde oplossing is een oplossing waarin de maximale hoeveelheid van een stof is opgelost. Extra stof (die dus niet meer kan oplossen) ligt doorgaans op de bodem. Er bestaat een **dynamisch evenwicht** tussen de stof in oplossing en de niet opgeloste stof. Dat wil zeggen dat telkens een deel van de niet-opgeloste stof in de oplossing gaat, terwijl een deel van de opgeloste stof neerslaat (niet-opgelost wordt). Beide kanten op treedt deze reactie even sterk op, waardoor er op elk moment evenveel stof in oplossing is, maar het zijn telkens andere moleculen die opgelost zijn.



Figuur 3. Een dynamisch evenwicht in een verzadigde oplossing. Op elk moment gaat een deel van de niet-opgeloste stof $A(s)$ in oplossing (pijlje omhoog). Tegelijkertijd slaat een deel van de opgeloste stof $A(aq)$ neer (pijlje naar beneden).

5. Concentraties in oplossingen

In de scheikunde worden erg vaak oplossingen gebruikt. Hierbij is het belangrijk om te weten hoeveel stof er in de oplossing zit, dus welke **concentratie** een stof heeft. Deze concentratie kan op verschillende manieren weergegeven worden:

- **molariteit** (mol/L of M). Hierbij wordt dus gekeken naar het **aantal moleculen** in de oplossing. Molariteit wordt weergegeven als mol per liter of molair (M). Beide zijn exact hetzelfde. **Let erop dat mol en molair NIET hetzelfde zijn.** Let dus altijd goed op of je te maken hebt met mol of molair.
- **massa/volume percentages**. Hierbij wordt de hoeveelheid **gram** van een stof per **volume** oplosmiddel gebruikt.
- **massa/massa percentages**. Deze werken nagenoeg hetzelfde als massa/volume percentages, maar nu wordt de hoeveelheid **gram** van een stof per **massa** van het oplosmiddel gebruikt.

Deze drie manieren om concentraties te berekenen worden in de volgende paragrafen uitgebreid uitgelegd.

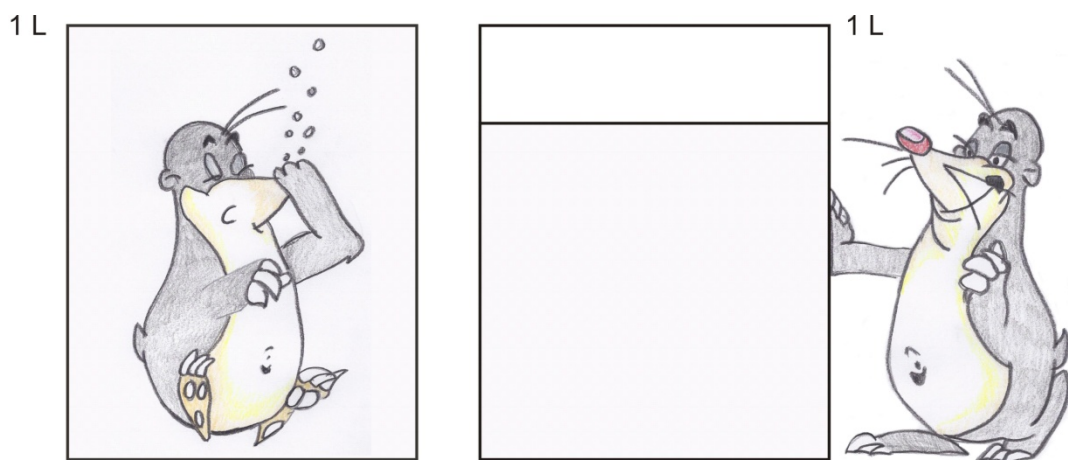
6. Molariteit

Symbolen

De **concentratie** van een stof is de hoeveelheid van die stof in een volume oplosmiddel. Het **symbool** van concentratie is de kleine letter 'c'. Er zijn verschillende eenheden voor concentratie, zoals **molair**, wat wordt geschreven als hoofdletter **M** (molair = **mol per liter**). De concentratie in molair wordt ook wel de **molariteit** genoemd.

Molariteit

De molariteit is de concentratie in mol per liter. Dit is **niet** een aantal mol stof + 1 liter water, maar een aantal mol stof **aangevuld** tot 1 liter water (zie figuur 5). Vooral als je grote hoeveelheden stof op wilt lossen in een kleine hoeveelheid vloeistof is dit erg van belang. Als je bijvoorbeeld 60 gram suiker oplost in 100 ml, dan moet je eerst de suiker in een bekersglas doen en deze dan aanvullen tot 100 ml. Je zult merken dat je minder dan 100 ml nodig hebt, omdat het suiker ook al veel ruimte inneemt.



Figuur 4. Een mol per liter is altijd een mol **aangevuld** tot 1 liter. Dus niet 1 mol + 1 liter, omdat een mol ook een volume heeft.

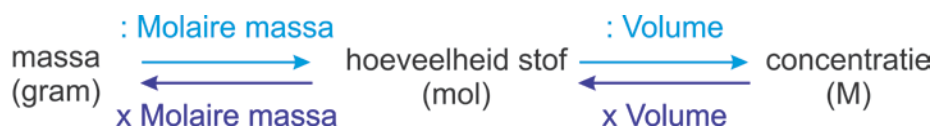
De concentratie in molair (M) bereken je als volgt:

$$\text{Concentratie (M)} = \frac{\text{hoeveelheid stof (mol)}}{\text{volume (liter)}}$$

$$c = \frac{n}{V}$$

Hierbij is c de concentratie in mol per liter, is n de hoeveelheid stof in mol en V het volume in liter.

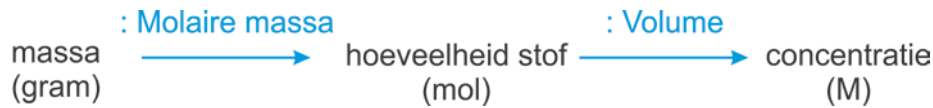
Hieronder is een overzicht weergegeven over hoe je om kunt rekenen tussen de massa, de hoeveelheid stof en de concentratie.



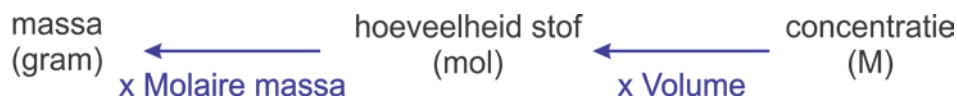
Rekenen met molariteit

Bij het rekenen met molariteit moet je eerst bepalen welke gegevens je weet en welke je moet hebben. Je kunt bepalen waar je staat in het schema en welke stappen je moet zetten om naar je eindantwoord te komen. Er zijn verschillende opties, zoals

Het berekenen van **de concentratie** wanneer je een **massa** van een stof oplost



Het berekenen van de **massa** van een stof uit de **concentratie**



Het berekenen van het volume dat benodigd is om de hoeveelheid van een bepaalde stof op te lossen



Hieronder staat een algemeen stappenplan om dit soort vragen met behulp van dit schema te rekenen.

Stappenplan

1. **Lees** de vraag goed door en schrijf de **gegevens** op die je weet (massa's, hoeveelheden, concentraties etc.)
2. Reken alle gegevens om naar **gram, mol en liter** (dus geen microliters, kilogrammen etc.)
3.
 - a. **Vul** de gegevens in in het schema en
 - b. markeer in het schema welke waarde je '**antwoord**' is.
 - c. Bepaal welke **route** je kunt nemen om met je gegevens bij het antwoord te komen.
4. Begin met de eerste stap, bereken het tussenantwoord en vul het in.
Herhaal indien nodig stap 4 tot je bij je antwoord bent.
5. **Controleer** of je antwoord logisch is en of de significantie en de eenheden kloppen en of de stofnaam goed vermeld is.

Rekenvoorbeelden

Nu volgen drie rekenvoorbeelden die worden uitgewerkt. Probeer de voorbeeldvragen eerst zelf te maken met behulp van het **stappenplan** en het **schema** alvorens naar de uitwerkingen te kijken. De vragen zijn:

1. Je lost 500 mg paracetamol ($C_8H_9NO_2$) op in 100 ml water. Wat is de molariteit van deze oplossing?
2. Hoeveel gram natronloog (NaOH) moet je oplossen om 35 deciliter van een 200 mM NaOH oplossing te maken?

3. Voor een experiment heb je een flesje met 5,00 mg steriel ATP (MW = 517,18 g/mol). Je wilt een steriele 10,0 mM ATP oplossing maken. Hoeveel steriel water moet je met een naald injecteren door het rubberen dopje in de fles?

Voorbeeld 1

Je lost 500 mg paracetamol ($C_8H_9NO_2$) op in 100 ml water. Wat is de molariteit van deze oplossing?

1. Schrijf de gegevens op die je weet

Je weet: de massa van de paracetamol en het volume

$$m_{\text{paracetamol}} = 500 \text{ mg}$$

$$V = 100 \text{ ml} = 0,100 \text{ L}$$

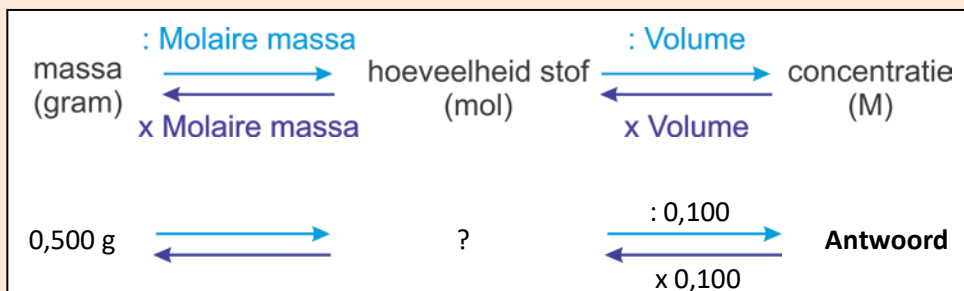
Je moet berekenen: de concentratie paracetamol (M)

2. Bereken de massa en het volume om naar grammen en liters

Je weet de massa van de paracetamol: $m_{\text{paracetamol}} = 500 \text{ mg} = 0,500 \text{ gram}$

Je weet het volume van de oplossing: $V = 100 \text{ ml} = 0,100 \text{ liter}$

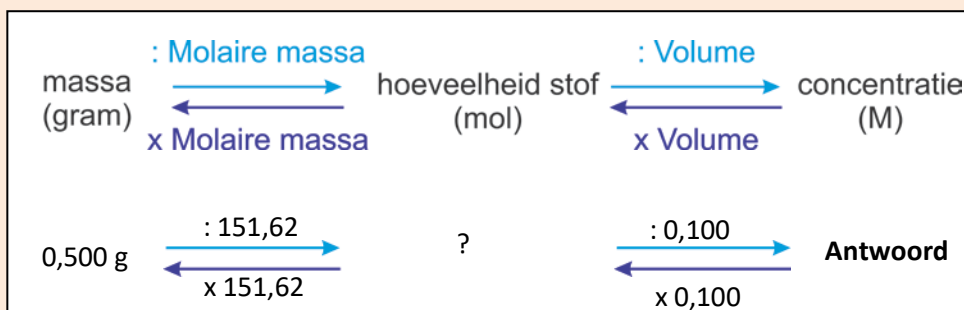
3. Vul de gegevens die je weet in in het schema



Om bij je antwoord te komen moet je eerst van de massa naar de hoeveelheid mol. Hiervoor heb je de molaire massa nodig.

Molaire massa: C	8 x 12,01 =	96,08
H	9 x 1,008 =	9,072
N	1 x 14,01 =	14,01
O	2 x 16,00 =	32,00+
		151,162 g/mol

4. Vul de molaire massa in in het schema

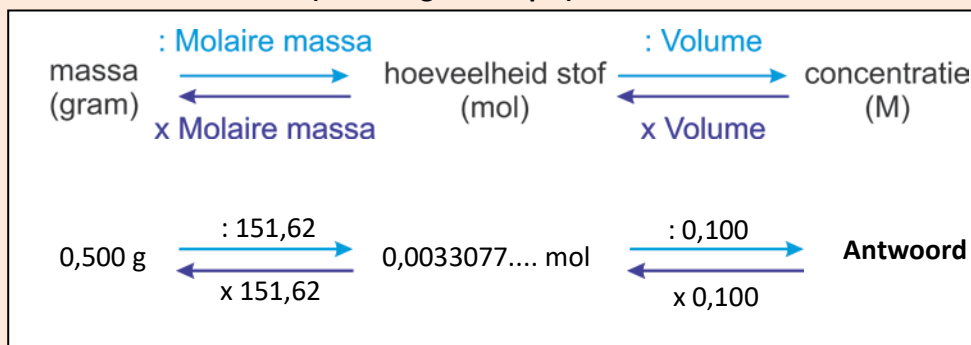


Nu kun je de hoeveelheid stof in mol berekenen door de massa te delen door 151,62:

$$n = \frac{m}{M} = \frac{0,5 \text{ (g)}}{151,162 \text{ (g/mol)}} = 0,0033077 \dots = 3,3077 \dots \cdot 10^{-3} \text{ mol paracetamol}$$

Het is handig om hier met de **wetenschappelijke notatie** te werken (10^{-3}) om schrijffoutjes en typefoutjes te voorkomen. Je gaat nog verder rekenen met dit getal, dus je mag **niet afronden**.

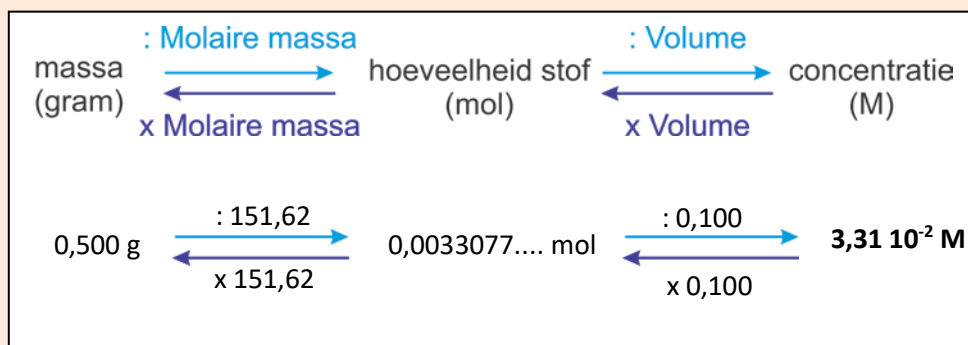
4. Invullen in het schema (herhaling van stap 4)



Nu je de hoeveelheid stof in mol weet kun je je antwoord berekenen door te delen door het volume:

$$c = \frac{n}{V} = \frac{0,0033077... \text{ (mol)}}{0,100 \text{ (l)}} = 0,033077... \text{ M} = 3,31 \cdot 10^{-2} \text{ M paracetamol}$$

Je bent nu bij je eindantwoord gekomen, deze mag je afronden. Let hierbij op de **significantie**. De gegevens in de vraag hebben beide een significantie van 3 cijfers, dus het eindantwoord moet ook afgerond worden op 3 getallen.



Antwoord: de concentratie paracetamol is dus $3,31 \cdot 10^{-2} \text{ M}$ wanneer je 500 mg paracetamol oplost in 100 ml water.

5. Controleer of je antwoord logisch is en of eenheid en stofnaam zijn vermeld.

Je hebt nu een concentratie gekregen die vrij klein is, maar je begon ook met maar 500 mg. Controleer of je de juiste eenheid en de naam van de stof erbij hebt geschreven.

Voorbeeld 2

Hoeveel gram natronloog (NaOH) moet je oplossen om 350 deciliter van een 200 mM NaOH oplossing te maken?

1. Schrijf de gegevens op die je weet

Je weet: de concentratie en het volume

Je moet berekenen: hoeveel gram natronloog je nodig hebt

$$c_{\text{NaOH}} = 200 \text{ mM}$$

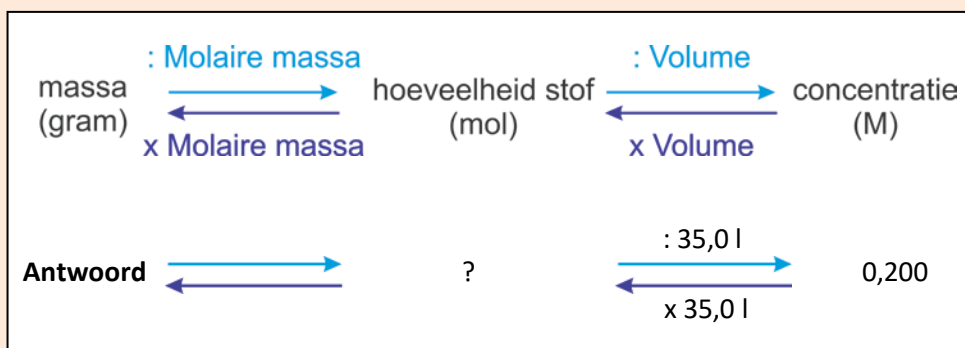
$$V = 350 \text{ dl}$$

2. Bereken de concentratie en het volume in molair en liters

Je weet de concentratie in mM: concentratie = 200 mM = 0,200 M

Je weet het volume van de oplossing: $V = 350 \text{ dl} = 35,0 \text{ l}$

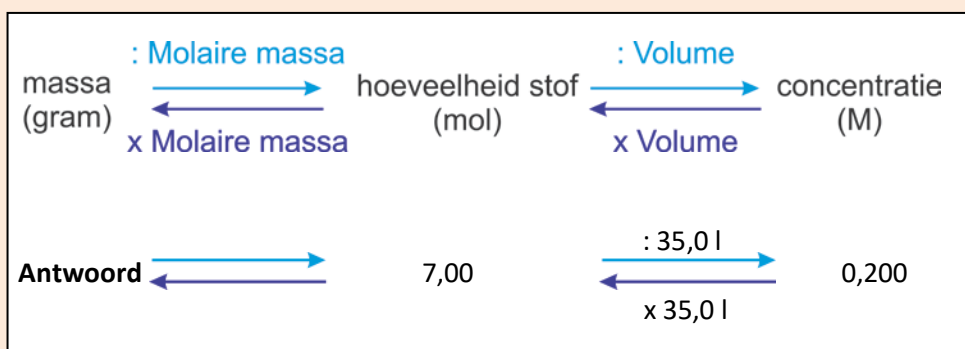
3. Vul de gegevens die je weet in in het schema



Je ziet dat je genoeg gegevens hebt om van de concentratie naar de hoeveelheid stof om te rekenen, door de concentratie te vermenigvuldigen met 35,0:

$$n = c \times V = 0,200 \times 35,0 = 7,00 \text{ mol}$$

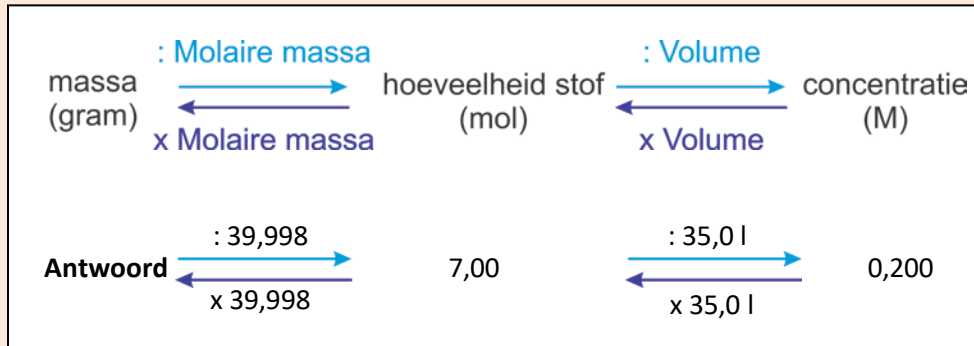
4. Invullen in het schema:



Voor het antwoord moet je nu nog van de hoeveelheid stof omrekenen naar het gewicht in gram. Hiervoor moet je eerst de molmassa berekenen:

$$\begin{array}{llll} M_{\text{NaOH}} = & \text{Na} & 1 \times 22,99 & = 22,99 \\ & \text{O} & 1 \times 16,00 & = 16,00 \\ & \text{H} & 1 \times 1,008 & = \underline{1,008} \\ & & & 39,998 \text{ g/mol} \end{array}$$

4. Invullen in het schema (herhaling van stap 4)



Je kunt nu het antwoord berekenen door de hoeveelheid stof te delen door 39,998:

$$m = n \times M = 7,00 \text{ (mol)} \times 39,998 \text{ (g/mol)} = 279,986 = 280 \text{ gram NaOH}$$

Je bent nu bij je eindantwoord gekomen, deze mag je afronden. Let hierbij op de **significantie**. De gegevens in de vraag hebben beiden een significantie van 3 cijfers, dus het eindantwoord moet ook afgerond worden op 3 getallen.

Antwoord: je moet 280 gram NaOH oplossen in 350 dl water om een concentratie van 200 mM NaOH te verkrijgen.

5. Controleer of je antwoord logisch is en of eenheid en stofnaam zijn vermeld.

Je maakt nu een groter volume (35 liter), dus verwacht je ook dat je meer moet afwegen dan wanneer je een klein pilletje oplost in wat water, zoals bij de vorige vraag. Controleer of je de juiste eenheid (g) en de naam van de stof erbij hebt geschreven.

Voorbeeld 3

Voor een experiment heb je een flesje met 5,00 mg steriel ATP (MW = 517,18 g/mol). Je wilt een steriele 10,0 mM ATP oplossing maken. Hoeveel steriel water moet je met een naald injecteren door het rubberen dopje in de fles?

1. Schrijf de gegevens op die je weet

Je weet: de massa ATP en de eindconcentratie

Je moet berekenen: het volume water dat je toe moet voegen.

Gegevens: $m_{\text{ATP}} = 5,00 \text{ mg}$
 $c = 10,0 \text{ mM}$
 $M_{\text{ATP}} = 517,18 \text{ g/mol}$

2. Bereken de concentratie en de massa om naar molair en grammen

Je weet de concentratie in mM: $10 \text{ mM} = 0,0100 \text{ M}$

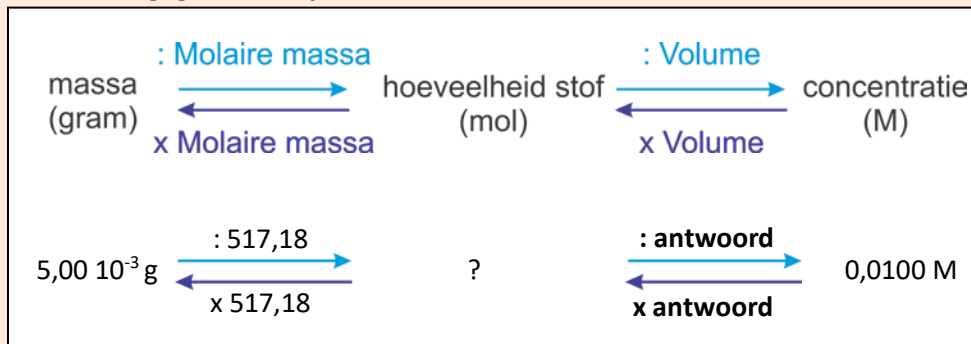
Je weet de massa ATP in mg: $5,00 \text{ mg} = 5,00 \cdot 10^{-3} \text{ g}$

Je kunt nu dus je gegevens aanvullen:

$m_{\text{ATP}} = 5,00 \text{ mg} = 5,00 \cdot 10^{-3} \text{ g}$

$c = 10,0 \text{ mM} = 0,0100 \text{ M}$

3. Vul de gegevens die je weet in in het schema:

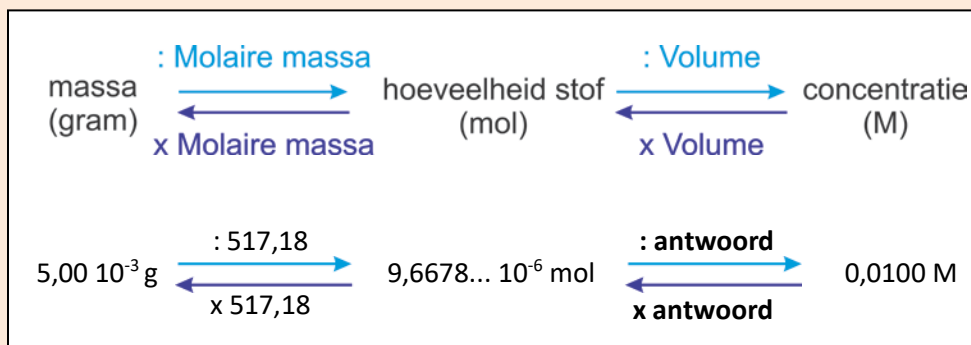


Je ziet dat je voldoende gegevens hebt om de hoeveelheid stof in mol te berekenen:

$$n = \frac{m}{M} = \frac{5,00 \cdot 10^{-3} \text{ (g)}}{517,18 \text{ (g/mol)}} = 9,6678... \cdot 10^{-6} \text{ mol}$$

Het is handig om hier met de **wetenschappelijke notatie** te werken (10^{-6}) om schrijffoutjes en typefoutjes te voorkomen. Je gaat nog verder rekenen met dit getal, dus je mag **niet afronden**.

4. Invullen in het schema:



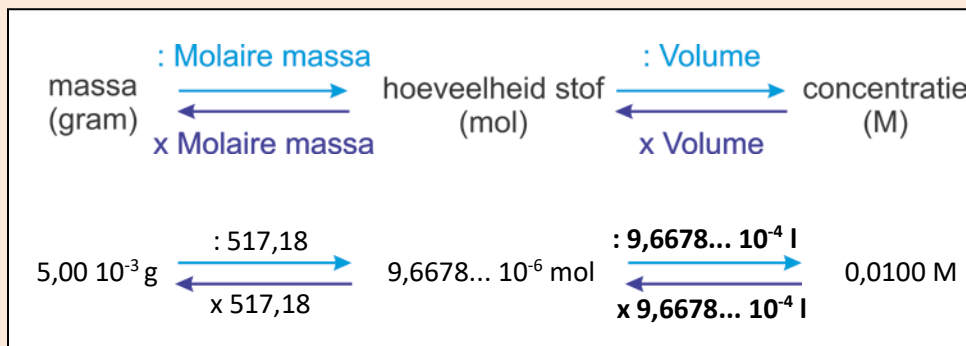
In het schema kun je nu zien dat je de hoeveelheid stof en de concentratie weet, maar niet het volume. Je weet dus dat:

$$\text{concentratie (M)} = \frac{\text{hoeveelheid stof (mol)}}{\text{volume (l)}}$$

Door de hoeveelheid stof te delen door de eindconcentratie, kun je het volume bepalen:

$$V = \frac{n}{c} = \frac{9,6678... \cdot 10^{-6} \text{ (mol)}}{0,0100 \text{ (M)}} = 9,6678... \cdot 10^{-4} \text{ l} = 0,967 \text{ ml} = 967 \mu\text{l}$$

Je bent nu bij je eindantwoord gekomen, deze mag je afronden. Let hierbij op de **significantie**. De gegevens in de vraag hebben beiden een significantie van 3 cijfers, dus het eindantwoord moet ook afgerond worden op 3 getallen.



Antwoord: je moet $9,67 \cdot 10^{-4} \text{ ml}$ water injecteren (= 0,967 ml) om een concentratie van 10,0 mM ATP te verkrijgen.

5. Controleer of je antwoord logisch is en of eenheid en stofnaam zijn vermeld.

Wanneer je bij deze laatste stap twijfelt of je het goed hebt gedaan, dan kun je dat eenvoudig controleren door uit te rekenen of de hoeveelheid mol gedeeld door het volume inderdaad 0,100 M is:

$$\text{concentratie (M)} = \frac{9,6678... \cdot 10^{-6} \text{ (mol)}}{9,6678... \cdot 10^{-4} \text{ (l)}} = 0,0100 \text{ M} \quad \textbf{KLOPT!!!!}$$

Je hebt een vrij klein volume nodig, maar je lost ook maar 500 mg ATP op. Controleer of je de juiste eenheid en de naam van de stof erbij hebt geschreven. Omdat je een heel klein getal hebt kun je het antwoord omrekenen naar milliliters of microliters.

Oefeningen

Maak bij de oefeningen gebruik van het stappenplan en het schema.

1. Je lost een tablet met 500 mg ibuprofen ($MW = 206,3 \text{ g/mol}$) op in 125 ml water. Wat is de molariteit van deze oplossing?
2. Je lost 10 gram H_3PO_4 op in 500 milliliter water. Wat is de molariteit van deze oplossing?
3. Je hebt 100 ml van een 0,25 M zoutoplossing nodig. Hoeveel gram zout ($NaCl$) moet je afwegen?
4. Je wilt een 0,100 M Natriumacetaat ($NaCH_3COO$) oplossing maken. Je hebt 4,38 gram natriumacetaat afgewogen. Hoeveel water moet je hieraan toevoegen?
5. Je lost 400 gram zout ($NaCl$) op in 1,0 liter water.
 - a. Wat is de molariteit van de zoutoplossing?
 - b. Hoeveel natriumatomen zitten er in 175 milliliter van deze oplossing?
6. In melk zit 121 mg calcium per 100 ml melk
 - a. Bereken de molariteit van calcium in van calcium in melk
 - b. In onderstaande tabel staat de aanbevolen dagelijkse hoeveelheid calcium per persoon in mg/dag. Bereken hoeveel glazen melk (een glas is 200 ml) een 5-jarig kind per dag moet drinken om aan deze hoeveelheid te voldoen. Ga er vanuit dat de melk zijn enige bron van calcium is.
 - c. Bereken hoeveel liter melk een 71-jarige vrouw per week nodig zou hebben als 37 % van haar calciuminname uit melk komt.

Leeftijd (in jaren)	ADH voor meisjes en vrouwen (mg/dag)	ADH voor jongens en mannen (mg/dag)
1–3	500	500
4–8	700	700
9–13	1100	1200
14–18	1100	1200
19–50	1000	1000
51–70	1100	1100
>70	1200	1200
Zwangeren	1000	n.v.t.
Bij borstvoeding	1000	n.v.t.

7. Manisch-depressieve patiënten krijgen lithium (Li^+) voorgeschreven om stemmingswisselingen tegen te gaan. Omdat per patiënt de lithiumconcentratie in bloed sterk varieert na inname van eenzelfde hoeveelheid lithium, wordt de lithiumconcentratie per patiënt bepaald om een optimale werking van het lithium te verkrijgen. De ideale concentratie 1 uur na inname van een lithiumtablet is 0,6-0,8 mmol lithium per liter bloed. Onder 0,4 mmol/liter is het lithium niet voldoende werkzaam en boven 1,0 mmol/liter is er een grote kans op vervelende bijwerkingen.
 - a. Hoeveel milligram lithium heeft een persoon met 5,3 liter bloed in zijn lichaam wanneer de lithiumconcentratie 0,7 mmol per liter is?
 - b. Het lithium in de tabletten bestaat vaak uit lithiumcarbonaat (Li_2CO_3). Hoeveel mol lithium (Li^+) bevat één tablet met 300 mg Li_2CO_3 ?
 - c. Een patiënt lost normaal gesproken één tablet van 300 mg lithiumcarbonaat op in 150 ml water. Wat is de molariteit van het lithium (Li^+) in deze oplossing?

- d. Na het oplossen van een tablet ziet de patiënt op de verpakking staan dat hij tabletten heeft gekregen met 500 mg lithiumcarbonaat in plaats van 300 mg. Hoeveel milliliter van zijn oplossing moet hij innemen om toch zijn gebruikelijke dosis binnen te krijgen?

8. Op een pot pindakaas staat dat 100 gram pindakaas 0,25 gram natrium bevat.

- Hoeveel gram natrium smeert je op 1 boterham (15 g pindakaas)?
- Als al het natrium in de pindakaas aanwezig is als zout (NaCl), hoeveel gram zout zit er dan in een pot pindakaas van 600 gram?

Wetenschappers hebben bepaald dat je 575 mg natrium per dag nodig hebt, maar dat meer ongezond is.

- Hoeveel mol natrium heb je per dag nodig?
- Als alle natriuminname uit zout (NaCl) komt, hoeveel gram zout mag je dan per dag eten?
- Hoeveel van deze aanbevolen dagelijkse hoeveelheid zout krijg je binnen als je 15 gram pindakaas eet?

9. Je doet twee schepjes suiker in je kop thee. Er zit 150 ml thee in het kopje en één schep suiker (sucrose, $C_{12}H_{22}O_{11}$) weegt 6 gram.

- Bereken de molariteit van de suiker in de thee.
- De thee heeft een cafeïneconcentratie van $1,50 \cdot 10^{-4}$ M. Hoeveel gram cafeïne (194,19 g/mol) zit er het kopje thee?

Omdat suiker ongezond is, besluit je de suiker te vervangen voor zoetjes. Zoetjes bevatten aspartaam ($C_{14}H_{18}N_2O_5$). Eén zoetje (0,88 gram) blijkt voldoende te zijn voor dezelfde zoetheid van de thee als twee schepjes suiker.

- Hoeveel mol aspartaam zit er maximaal in 1 zoetje?
- Neem aan dat een zoetje volledig uit aspartaam bestaat. Bereken aan de hand van je antwoord bij a en je antwoord bij c hoeveel mol suiker dan even zoet is als 1 mol aspartaam.
- Wat zou in dat geval de molariteit van aspartaam zijn in een kop thee met één zoetje?
- Aspartaam is ongeveer 300 – 500 keer zoeter zijn dan suiker. Denk je dat een zoetje volledig uit aspartaam bestaat?

7. Percentages, promillages etc.

Behalve het berekenen van concentraties in molariteit kunnen concentraties ook weergegeven worden in percentages, promillages, ppm, ppb etc. Al deze aanduidingen zijn gebaseerd op eenzelfde principe. Bij al deze aanduidingen bereken je de **fractie**: het **deel** waarin je geïnteresseerd bent gedeeld door het **totaal**. Dit is het deel van je oplossing die bestaat uit hetgeen waar je in geïnteresseerd bent. Deze fractie vermenigvuldig je met een **factor**. De algemene formule:

$$\text{Concentratie} = \frac{\text{deel}}{\text{geheel}} \times \text{factor}$$

fractie

De factor is bij	percentages	100 (100 %)
	promillages	1000 (1000‰, in het Engels ook wel ppt = parts per thousand)
	ppm	10 ⁶ (= een miljoen)
	ppb	10 ⁹ (= een miljard, in het Engels een 'billion')

Percentages

1% betekent één op de honderd. Bij percentages is de factor waarmee je de fractie vermenigvuldigt 100. Bij percentages worden een aantal verschillende aanduidingen gebruikt. De belangrijkste twee:

Massa/massapercentage	% (m/m)	= $\frac{\text{massa opgeloste stof (gram)}}{\text{totale massa (gram)}} \times 100\%$
	1% (m/m)	= 1 g/ 100 g
Massa/volumepercentage	% (m/v)	= $\frac{\text{massa opgeloste stof (gram)}}{\text{totaal volume (ml)}} \times 100\%$
	1% (m/v)	= 1 gram/100 ml
Volume/volumepercentage	% (v/v)	= $\frac{\text{volume opgeloste stof (ml)}}{\text{totaal volume (ml)}} \times 100\%$
	1% (v/v)	= 1 ml/100 ml

Welk percentage je gebruikt maakt soms behoorlijk wat uit, bijvoorbeeld wanneer het oplosmiddel geen water is, maar een vloeistof met een andere dichtheid. Let er op dat hier volumes in **milliliters** worden berekend en niet zoals in veel andere formules in **liters**!

Promillages

1‰ betekent één op duizend. In het Engels (ook in het boek) wordt het promillage ook wel ppt genoemd, dus 'parts per thousand'. Verder is het promillage gelijk aan het percentage, maar 1 promille is dus tien keer minder dan 1 procent.

Parts per million

Ppm betekent 'parts per million', oftewel één op een miljoen. Een miljoen is 10⁶ (een 1 met 6 nullen). Dit gebruik je dus voor verdunningen die heel erg verdund zijn. Een concentratie van één ppm betekent dat je **1 milligram** van een stof oplost in **1 kilo (=1 liter) water**. Dat is dus één op een miljoen. Nederland heeft momenteel 16,7 miljoen inwoners. Als je het hebt over 1 ppm van de Nederlandse bevolking, dan heb je het dus over 16,7 mensen. Dat zijn er dus heel erg weinig!

Parts per billion

Ppb betekent 'parts per billion'. Het **Engelse woord billion** is niet gelijk aan het Nederlandse woord biljoen, maar betekent een **miljard**. Een miljard is 10^9 (een 1 met 9 nullen). Eén ppm is al een heel erg kleine hoeveelheid, maar één ppb is daar nog weer een duizendste van. Je maakt een oplossing van 1 ppb als je **1 microgram** van een stof oplost in **1 liter water**.

Op dit moment bestaat de wereldbevolking uit ongeveer 7 miljard inwoners. 1 ppb zou dus betekenen 7 mensen op de hele wereldbevolking. Er lopen op onze aardbol dus meer dan één ppb aan loterijwinnaars rond, want er zijn meer dan 7 mensen die een loterij hebben gewonnen. Er zijn ook meer dan één ppb Nobelprijswinnaars. 1 ppb is dus heel erg weinig.

Voorbeeld

Tolueen (C_7H_8) is een giftige stof. In een watermonster uit een rivier wordt een tolueen concentratie van 6,0 ppb gemeten. Hoeveel gram tolueen zit er in 3,5 kg water?

1. Schrijf de gegevens op die je weet

De concentratie tolueen is 6,0 ppb, dus

$$c = 6,0 \text{ ppb}$$

De massa is 3,5 kg

$$V = 3,5 \text{ kg} = 3500 \text{ g}$$

2. Schrijf de formule op

$$\text{Ppb} = \frac{\text{massa tolueen (gram)}}{\text{massa totaal (gram)}} \times 10^9$$

3. Invullen:

$$6,0 \text{ ppb} = \frac{\text{massa stof}}{3500 \text{ gram}} \times 10^9$$

Beide zijden vermenigvuldigen met 3500:

$$21 \cdot 10^3 = \text{massa stof (gram)} \times 10^9$$

Beide zijden delen door 10^9 :

$$\text{Massa stof (gram)} = \frac{21 \cdot 10^3}{10^9} = 2,1 \cdot 10^{-5} \text{ gram} = 21 \text{ microgram tolueen}$$

Antwoord: er zit 21 microgram tolueen in 3,5 kg water.

Omrekenen tussen percentages en molariteit

Wanneer je een percentage, promillage, ppm of ppb weet om moet rekenen naar molariteit volg je de volgende stappen:

1. Schrijf de concentratie en het volume van de oplossing op. Wanneer er geen specifiek volume is gegeven, neem dan 1 liter als volume.
2. Bereken hoeveel **gram** van de stof er in deze oplossing zit. Reken microgrammen, milligrammen en kilogrammen om naar gram.
3. Reken om van **gram** naar **mol**.
4. Bereken de **molariteit**

Als je andersom om moet rekenen, dan volg je het stappenplan in de omgekeerde volgorde:

1. Schrijf de concentratie en het volume van de oplossing op. Wanneer er geen specifiek volume is gegeven, neem dan 1 liter als volume.
2. Bereken hoeveel **mol** van de stof er in de oplossing zit.

3. Reken om van **mol** naar **gram**.
4. Bepaal de massa of het volume van het **deel** en het **geheel**
5. Bereken met behulp van de **fractie** en de **factor** het juiste percentage, promillage, ppm of ppb uit.

Voorbeeld

Wat is de molariteit van een 10% (m/v) sucroseoplossing?

1. Een 10% oplossing bevat 10 gram sucrose per 100 ml. We nemen een volume van 1 liter om mee te rekenen, omdat we de hoeveelheid mol per **liter** willen berekenen.
2. In 1 liter van deze oplossing zit $10 \times 10 = 100$ gram sucrose (want $10 \times 100 \text{ ml} = 1 \text{ liter}$)
3. De molmassa van sucrose:

C	$12 \times 12,01 =$	144,12
H	$22 \times 1,008 =$	22,176
O	$11 \times 16,00 =$	176,00 +
		342,296 g/mol

$$m = 100 \text{ gram}$$

$$M = 342,296 \text{ gram/mol}$$

$$n = \frac{m}{M} = \frac{100}{342,296} = 0,292.... \text{ mol}$$

4. We hebben dus 0,292.... mol in 1 liter.
 $n = 0,292... \text{ mol}$
 $V = 1 \text{ liter}$

$$c = \frac{n}{V} = \frac{0,292...}{1} = 0,292.... = 0,29 \text{ M sucrose}$$

Antwoord: een 10% (m/v) sucroseoplossing heeft een concentratie van 0,29 M sucrose.

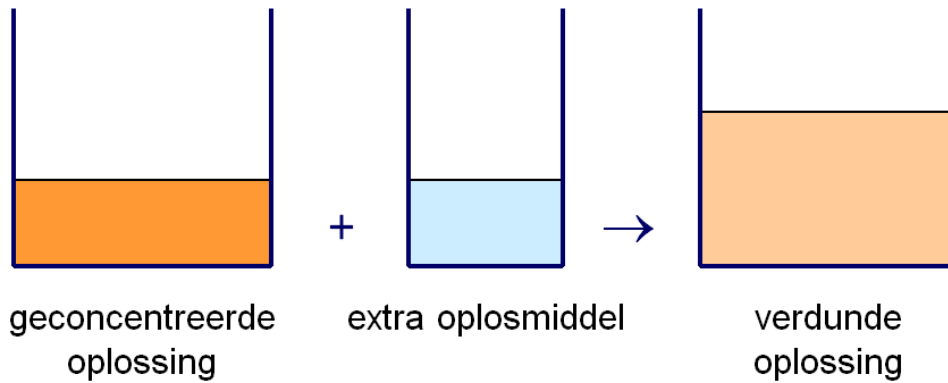
Oefeningen

1. Hoeveel gram chroom (Cr) zit er opgelost in 5 kilo zeewater met een concentratie van 0.4 ppb?
2. Wat is het massa/volume percentage van 1 M NaCl oplossing?
3. Het maximaal toegestaan promillage van alcohol ($\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$) in het bloed van beginnende automobilisten is 0,2‰. Hoeveel gram alcohol mag je in je bloed hebben? (ga uit van een volume van 5,2 liter bloed).
4. **De maximaal toegestane concentratie lood (Pb) in drinkwater is 7,24 nM (= nanomolair, 10^{-9} M).**
 - a. Wat is de maximaal toegestane concentratie lood in ppb?
 - b. Hoeveel moleculen lood zitten er bij deze concentratie in 1,0 liter water?
5. Fysiologisch zoutoplossing is een zoutoplossing die dezelfde osmotische druk heeft als lichaamsweefsel. Een fysiologisch zoutoplossing bestaat uit 0,9% NaCl (m/v).
 - a. Hoeveel zout moet je afwegen om 350 milliliter fysiologisch zoutoplossing te maken?
 - b. Wat is de molariteit van deze oplossing?

6. Mensen met coeliakie zijn zeer gevoelig voor gluten in hun voedsel. Daarom produceren voedselabrikanten glutenvrij voedsel. Hiervoor mag het voedsel maximaal 20 ppm gluten bevatten. Hoeveel gram gluten zit er maximaal in een pak schuldenvrije koekjes van 150 gram?
7. Picrinezuur $\text{C}_6\text{H}_2\text{OH}(\text{NO}_2)_3$ is een stofje dat schokgevoelig is. Om explosies tijdens het vervoer van picrinezuur te voorkomen, wordt picrinezuur daarom altijd als 50% (m/m) oplossing in water vervoerd en bewaard ((af en toe wordt er een school of laboratorium ontruimd omdat er een potje opgedroogde picrinezuuroplossing gevonden wordt). Hoeveel gram van een 50% (m/m) picrinezuuroplossing moet je afwegen om 1,00 mol van deze stof te verkrijgen?
8. Arsenicum (As) is een halfmetaal dat we in zeer kleine hoeveelheden nodig hebben in ons voedsel. Arsenicum is echter ook giftig. Acute vergiftiging leidt tot een vreselijke dood binnen enkele dagen, terwijl chronische vergiftiging met kleine hoeveelheden arsenicum ook leidt tot vele gezondheidsklachten.
- In sommige streken (bijvoorbeeld Bangladesh en India) zit veel arsenicum in de bodem, waardoor het drinkwater in deze regio's sterk vervuild is. De maximaal toegestane hoeveelheid arsenicum in drinkwater is 10 ppb.
- Hoeveel arsenicumatomen zitten er in 100 ml drinkwater met 10 ppb As?
 - Het water uit een drinkwaterbron blijkt een arsenicumconcentratie te hebben van $3,1 \cdot 10^{-7}$ molair. Voldoet deze bron aan de veiligheidseisen?
- Een eenmalige dosis van 40 mg arsenicum is voor volwassenen zeer gevaarlijk. Rond het jaar 1900 werden 6000 mensen in Manchester vergiftigd door bier dat verontreinigd was met arsenicum, er vielen 70 doden. Het verontreinigde bier bleek 15 ppm arsenicum te bevatten.
- Hoeveel pints (een pint = 0,562 l, neem aan dat bier een dichtheid van 1 g/ml heeft) leverden al die gevaarlijke dosis van 40 mg?

8. Verdunningen

Verdunnen is het toevoegen van oplosmiddel aan een oplossing. **Hierdoor verandert het volume, maar niet de hoeveelheid opgeloste stof in de oplossing.** Doordat het volume toeneemt, neemt de concentratie van de opgeloste stof af. De beginoplossing wordt soms ook wel een **stockoplossing** genoemd.



Figuur 5. Het principe van verdunnen. Aan een oplossing wordt extra oplosmiddel toegevoegd, waardoor het volume toeneemt en de concentratie van de opgeloste stof afneemt.

Zoals bij molariteit uitgelegd is de **concentratie** te berekenen:

$$\begin{aligned} \text{concentratie (M)} &= \frac{\text{hoeveelheid opgeloste stof (mol)}}{\text{volume oplossing (l)}} \\ c &= \frac{n}{V} \end{aligned}$$

Wanneer de hoeveelheid stof gelijk blijft, maar het volume toeneemt omdat je meer oplosmiddel (bijvoorbeeld water) toevoegt, wordt de concentratie lager.

Er zijn twee manieren om met deze veranderingen van volume en concentratie te rekenen.

Methode 1

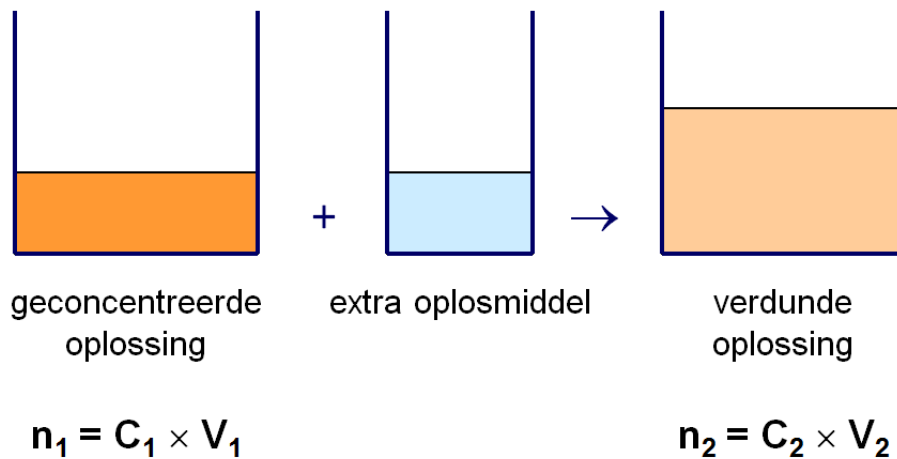
De hoeveelheid opgeloste stof blijft tijdens het verdunnen gelijk. Wanneer je de bovenstaande formule ombouwt door beide kanten van de vergelijking te vermenigvuldigen met het volume van de oplossing:

$$\begin{aligned} \text{hoeveelheid opgeloste stof} &= \text{concentratie} \times \text{volume} \\ n &= c \times V \end{aligned}$$

Zowel voor (1) als na de verdunning (2) **blijft de hoeveelheid opgeloste stof gelijk**, maar het volume en de concentratie veranderen wel. Je kunt dus schrijven:

$$c_1 \times V_1 = c_2 \times V_2$$

Oftewel, het product* van c_1 en V_1 is gelijk aan het product van c_2 en V_2 .



Figuur 6. Methode 1 om de concentratie te berekenen.

Voorbeeld

Je verdunt een stockoplossing van 50 mM tot een eindconcentratie van 100 μ M. Hoeveel water moet je hiervoor toevoegen aan 1 ml van de stockoplossing?

Oplossing 1 (de beginoplossing) is de stockoplossing. Deze heeft een concentratie van 50 mM en hiervan ga je 1 ml verdunnen. De eindoplossing heeft een concentratie van 100 μ M en een onbekend volume. Wat je dus weet:

$$C_1 = 50 \text{ mM} = 0,050 \text{ M}$$

$$C_2 = 100 \text{ } \mu\text{M} = 1 \cdot 10^{-4} \text{ M}$$

$$V_1 = 1 \text{ mL} = 1 \cdot 10^{-3} \text{ l}$$

De formule die je gaat gebruiken: $C_1 \times V_1 = C_2 \times V_2$

Deze formule kun je omschrijven: $V_2 = \frac{C_1 \times V_1}{C_2}$

Invullen:
$$V_2 = \frac{1 \cdot 10^{-3} \times 0,050}{1 \cdot 10^{-4}} = 0,50 \text{ l}$$

Dus 1 ml stockoplossing moet je verdunnen tot 500 ml om een concentratie van 100 μ M te verkrijgen (hiervoor moet je dus 499 ml water toevoegen aan 1 ml stockoplossing: totaal volume is 500 ml).

Methode 2

Een andere aanpak is om de **verdunningsfactor (f)** te berekenen. Dit getal zegt hoeveel keer de beginoplossing wordt verdund. Een verdunningsfactor van 1000 betekent dus dat je de oplossing 1000 keer verdunt en de concentratie dus 1000 keer lager wordt en het volume 1000 keer groter.

Het berekenen van de verdunningsfactor uit de begin- en eindconcentraties:

$$f = \frac{C_1}{C_2}$$

Het berekenen van de verdunningsfactor uit het begin- en eindvolume:

$$f = \frac{V_2}{V_1}$$

Met de gegevens uit de vraag kun je dus op één van bovenstaande manieren de verdunningsfactor berekenen. Vervolgens kun je de verdunningsfactor en de gegevens uit de vraag gebruiken om de andere formule in te vullen.

Als je de begin- en eindconcentraties weet, kun je met de eerste formule de verdunningsfactor berekenen. Vervolgens kun je de verdunningsfactor invullen in de tweede formule, samen met het begin- of eindvolume. Daaruit kun je het andere volume dan berekenen.

Andersom, als je de begin- en eindvolumes weet, kun je eerst de tweede formule de verdunningsfactor berekenen. Vervolgens kun je met die verdunningsfactor en de bekende begin- of eindconcentratie de onbekende concentratie berekenen.

Voorbeeld

Je verdunt een stockoplossing van 50 mM tot een eindconcentratie van 100 μ M. Hoeveel water moet je hiervoor toevoegen aan 1 ml van de stockoplossing?

Je weet:

$$C_1 = 50 \text{ mM} = 0,050 \text{ M}$$

$$C_2 = 100 \text{ } \mu\text{M} = 1 \cdot 10^{-4} \text{ M}$$

$$V_1 = 1 \text{ mL} = 1 \cdot 10^{-3} \text{ l}$$

Invullen: $f = \frac{C_1}{C_2} = \frac{0,050}{1 \cdot 10^{-4}} = 500$

Je verdunt dus 500 keer: je concentratie wordt 500 keer zo klein. Dat betekent dat het volume 500 keer zo groot wordt.

Invullen: $f = \frac{V_2}{V_1}$

Deze formule kun je omrekenen door beide kanten van de vergelijking te vermenigvuldigen met V_1 :

$$V_2 = f \times V_1 = 500 \times 1 \cdot 10^{-3} = 0,50 \text{ l} (= 500 \text{ ml})$$

Je komt dus met deze methode op exact hetzelfde antwoord als met methode 1. Het maakt niet uit welke van de twee methoden je gebruikt, zolang je maar laat zien hoe je aan je antwoord komt.

Oefeningen

1. IPTG ($C_9H_{18}O_5S$) is een stofje dat wordt gebruikt voor experimenten met bacteriën.
 - a. Je maakt 2,5 ml van een 1 M stockoplossing IPTG. Hoeveel IPTG moet je hiervoor afwegen?
 - b. Je wilt 10 ml groeimeidium maken met daarin een concentratie van 250 μM IPTG. Hoeveel van de stockoplossing moet je daarvoor toevoegen aan het groeimeidium?
2. Verschillende bacteriën hebben een verschillende gevoeligheid voor antibiotica. Je hebt een 1 mg/ml oplossing van het antibioticum erythromycine.
 - a. *Escherichia coli* is vrij ongevoelig voor erythromycine en gaat pas dood bij concentraties van 150 $\mu g/ml$. Hoeveel van de stockoplossing moet je gebruiken wanneer je 1 liter groeimeidium maakt met 150 $\mu g/ml$ erythromycine?
 - b. *Lactococcus lactis* is veel gevoeliger voor erythromycine en gaat al dood bij 5 $\mu g/ml$. Hoeveel van de stockoplossing heb je nodig om 300 ml groeimeidium te maken met 5 $\mu g/ml$ erythromycine?
 - c. *Bacillus subtilis* is nog gevoeliger en gaat al dood bij concentraties van 2 $\mu g/ml$ erythromycine. Hoeveel van de stockoplossing heb je nodig om 500 μl groeimeidium te maken met 2 $\mu g/ml$ erythromycine?
3. Je hebt een 5,0% (m/v) glucose oplossing ($C_6H_{12}O_6$).
 - a. Hoeveel van deze oplossing heb je nodig om 10 ml 100 mM glucoseoplossing te maken?
 - b. En hoeveel water voeg je daaraan toe?
4. Voor infuusvloeistoffen wordt vaak gebruik gemaakt van Ringer-oplossing. Deze bevat een aantal belangrijke stoffen in concentraties die in het lichaam voorkomen. De samenstelling:
natrium = 130 mmol/l
chloride = 109 mmol/l
lactaat = 28 mmol/l ($C_3H_5O_3^-$)
kalium = 4 mmol/l
calcium = 1,5 mmol/l
Voor het maken van Ringer-oplossing worden de stoffen NaCl, $NaC_3H_5O_3$, $CaCl_2$ en KCl gebruikt.
 - a) Hoeveel mmol van elk van de stoffen heb je nodig om de samenstelling van 1 liter Ringer-oplossing te verkrijgen?
 - b) Welk volume Ringer-oplossing kun je maken wanneer je 2,3 gram natriumlactaat tot je beschikking hebt en ruim voldoende van de andere stoffen?
5. Proteïnurie (het voorkomen van eiwitten in de urine) is een teken van nierschade. Voor het bepalen van de eiwitconcentratie in de urine van mogelijke nierpatiënten wordt een ijklijn gemaakt met het eiwit BSA. Om deze ijklijn te maken worden verschillende verdunningen van een stockoplossing BSA (een eiwit) gemaakt (zie volgende pagina).

De verdunningen worden gemaakt volgens onderstaand schema:

	Eindconcentratie ($\mu\text{g/ml}$)	Volume water	Toevoegen aan
A	1500	250 μl μl van stock
B	1000	625 μl	625 μl van stock
C	750	310 μl	310 μl van A
D	500	625 μl	625 μl van ...
E	250	625 μl	625 μl van ...
F	125	625 μl	625 μl van ...
G	25	800 μl	200 μl van ...
H	5	800 μl	200 μl van ...
I	1	800 μl	200 μl van ...
J	0	1000 μl	0

- Bereken uit de informatie in rij B van de tabel de concentratie van de stockoplossing BSA in $\mu\text{g/ml}$.
- Bereken hoeveel van deze stockoplossing je toe moet voegen aan 250 μl water (zie rij A) om een concentratie van 1500 $\mu\text{g/ml}$ te krijgen.

Bij de verdere verdunningen gebruik je de verdunningen die je al gemaakt hebt. Een voorbeeld hiervan zie je in rij C. Daar wordt verdunning A (1500 $\mu\text{g/ml}$) 2 keer verdund tot 750 $\mu\text{g/ml}$ door aan 310 μl van verdunning A 310 μL water toe te voegen.

- Vul bij rij D t/m I in welke verdunning je gebruikt om de eindconcentraties te bereiken.

6. In zeewater zit 0,024 ppm arsenicum. Echter, sommige zeedieren zoals garnalen stapelen arsenicum op in hun lichaam. De arsenicumconcentratie kan oplopen tot 175 ppm in sommige soorten garnalen.

- Hoeveel keer geconcentreerd is de concentratie arsenicum in deze garnalen vergeleken met het zeewater waarin zij leven?
- Hoeveel g zeewater bevat evenveel arsenicum als een garnaal van 5,0 mg volgens bovenstaande gegevens? Ga er vanuit dat de garnaal en het zeewater een gelijke dichtheid hebben.

7. Je hebt 2,76 gram natriumdiwaterstoffsfaat (NaH_2PO_4) afgewogen.

- In hoeveel water moet je deze stof opnemen om een stockoplossing met een concentratie van 200 mM te verkrijgen?
- Als je vanuit deze stockoplossing 4 ml 250 μM NaH_2PO_4 oplossing wilt maken, hoeveel water en hoeveel stockoplossing moet je dan samenvoegen?

8. Whisky (dichtheid: 0,93 g/ml) bevat 45 % (m/m) alcohol ($\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$).

- Bereken de concentratie van alcohol in whisky uitgedrukt in mol/L.
Een uur na het drinken van een flink glas whisky (100 mL) bevat het bloed 2,0 mg alcohol per mL. Het totale bloedvolume bedraagt 6,0 L.
- Bereken hoeveel procent van het in het glas whisky aanwezige alcohol nog *niet* in het bloed is opgenomen.

Week 2



9. Thermodynamica

Thermodynamica is de studie van energie, arbeid en warmte. De thermodynamica is van belang voor chemisch rekenen omdat met de thermodynamica kan worden bepaald

- of een reactie spontaan zal verlopen of niet
- of een reactie endotherm of exotherm is en **hoeveel** energie er in of uit gaat
- de snelheid waarmee een reactie verloopt.

Er zijn drie wetten van de thermodynamica:

1. energie kan niet worden gecreëerd of vernietigd worden, het kan wel omgezet worden in een andere soort energie
2. het universum neigt naar meer chaos en willekeur
3. de wanorde van een pure, perfecte kristal bij het absolute nulpunt (0 Kelvin) is nul.

De eerste twee van deze wetten worden nu behandeld.

Systeem en omgeving

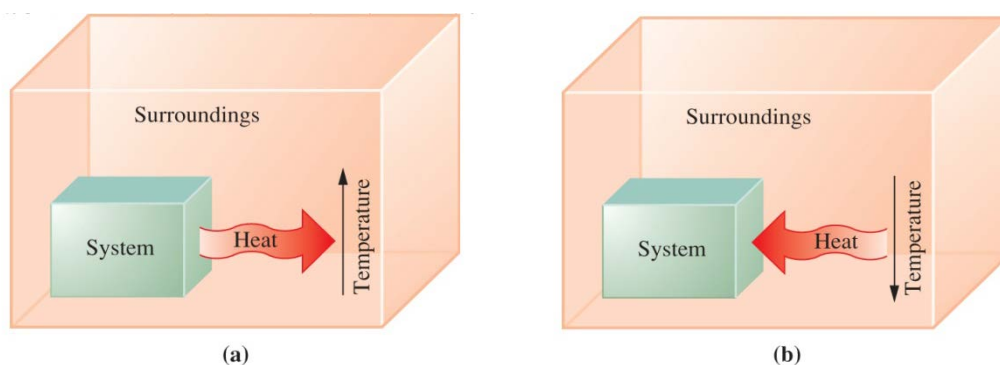
Energie kan niet verschijnen of verdwijnen, maar wel overgedragen worden. Hierbij zijn twee termen van belang:

- Het **systeem** is de plek waar de reactie plaats vindt, dus bijvoorbeeld een bekersglas met daarin de reactanten.
- De **omgeving** is de ruimte om het systeem heen.

In een systeem is een bepaalde hoeveelheid energie opgeslagen. Wanneer een reactie in het systeem energie oplevert (denk bijvoorbeeld aan verbranding van een stof), dan wordt die energie overgedragen van het systeem naar de omgeving (zie figuur 8a). De temperatuur van de omgeving stijgt dan.

Wanneer een reactie energie nodig heeft, dan kan er vanuit de omgeving energie naar de omgeving worden toegevoerd. De temperatuur van de omgeving daalt dan (zie figuur 8b).

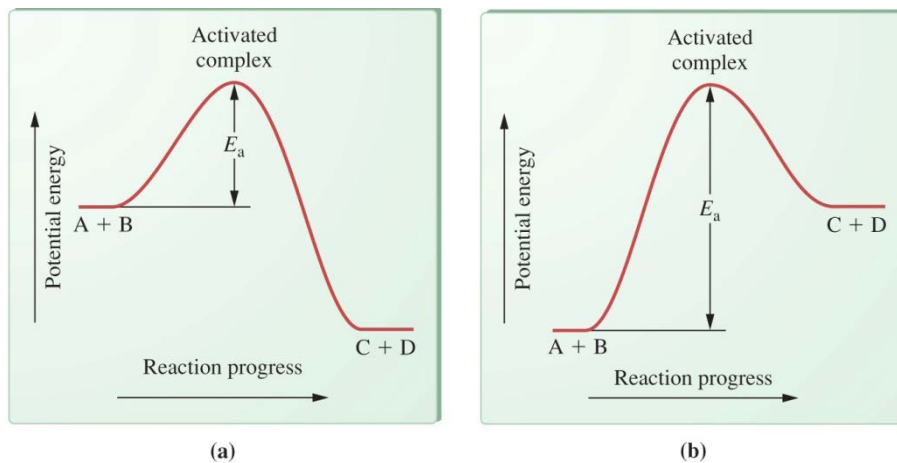
De energie in het systeem is vaak opgeslagen als **chemische energie**.



Figuur 7 (Figuur 7.1 uit Denniston). Overdracht van energie tussen systeem en omgeving.

Chemische reacties en energie

Voor een chemische reactie moeten verbindingen verbroken worden en nieuwe verbindingen gevormd worden. **Het verbreken van verbindingen kost altijd energie, het maken van nieuwe verbindingen levert altijd energie op.** In een reactie moet dus altijd eerst energie toegevoerd worden vanuit de omgeving naar het systeem om de oude verbindingen te verbreken (zie figuur 9). Daarna worden er nieuwe verbindingen gemaakt, waarbij energie vrij komt. De energie die nodig is om de oude verbindingen te verbreken heet de **activeringsenergie**. Deze energie moet dus altijd eerst toegevoerd worden voor de reactie plaats zal vinden.



Figuur 8 (Figuur 7.10 uit Denniston) verandering van energie in een exotherme reactie (a) of een endotherme reactie (b). In beide gevallen moet er eerst energie worden toegevoerd (activeringsenergie), waarna er vervolgens energie vrij komt.

10. Enthalpie

Enthalpie (symbool is H) is een maat voor de energie die in een molecuul is opgeslagen (ook wel potentiële energie). De eenheid van enthalpie is Joule (J) of calorie (cal).

Omdat de energie die vrijkomt of benodigd is voor een reactie doorgaans in warmte wordt overgedragen, wordt enthalpie vaak gemeten als de **warmteverandering** (ΔH) tijdens een reactie. ΔH geeft dus het **energieverschil** aan tussen de producten van een reactie en de reactanten. De bijbehorende formule:

$$\Delta H = H_{\text{producten}} - H_{\text{reactanten}}$$

Wanneer je kijkt naar figuur 9a, dan zie je dat het beginniveau (potentiële energie) van A en B hoger ligt dan het eindniveau (C en D). C en D zijn de producten in deze reactie, dus de enthalpie van de producten is kleiner dan de energie van de reactanten ($H_{\text{producten}} < H_{\text{reactanten}}$). ΔH is dus **negatief**, dat betekent dat er energie **uit het systeem** gaat. Dat betekent dus dat het systeem warmte af zal staan naar de omgeving. De reactie is dan **exotherm** – er gaat warmte (thermos) uit (exo) het systeem.

Bij figuur 9b is dit precies andersom. De potentiële energie van A en B is lager dan de energie van C en D. Dat betekent dus dat ΔH een positief getal is. Er wordt dus energie in het systeem toegevoerd. De reactie is dan **endotherm** – er gaat warmte (thermos) het systeem in (endo). Dat betekent dat de omgeving dus af zal koelen.

De meeste exotherme reacties **verlopen spontaan**, de meeste endotherme reacties **verlopen niet spontaan**. Er zijn echter uitzonderingen op deze regel, dit komt door de invloed van **entropie** op de reactie.

Oefeningen

1. Is het verbranden van glucose een exotherm of een endotherm proces? Leg uit waarom.
2. Bij het verbranden van methaan geldt de volgende reactievergelijking:
$$\text{CH}_4 (g) + 2 \text{O}_2 (g) \longrightarrow \text{CO}_2 (g) + 2 \text{H}_2 (g) + 211 \text{ kcal}$$

Leg uit of deze reactie exotherm of endotherm is.
3. **Je stopt een ijsklontje (systeem) in een glas water (omgeving). Is het smelten van ijs een exotherm of een endotherm proces? Leg uit waarom.**
4. Bij fotosynthese wordt CO_2 en H_2O omgezet in glucose onder invloed van licht. Zal de enthalpie van deze reactie positief of negatief zijn? Leg uit.
5. **Een reactie heeft een ΔH van -72 kcal, is deze reactie exotherm of endotherm? Leg uit.**
6. a) Wat is de eenheid van enthalpie?
b) Wat is het verschil tussen H en ΔH ?
c) Teken het energieverloop tijdens een endotherme reactie. Geef goed aan wat er op de x- en y-as staat.

11. Entropie

De tweede wet van de thermodynamica stelt dat het universum streeft naar wanorde. Entropie (S) is de mate van chaos van het systeem. Veel chaos betekent een hoge entropie en weinig chaos (dus veel orde) betekent een lage entropie. Er kan beredeneerd worden of de entropie toeneemt of afneemt. Hiervoor zijn er twee basisregels:

1. vaste stoffen zijn meer geordend dan vloeistoffen en vloeistoffen zijn meer geordend dan gas. Dus qua enthalpie geldt:

$$S_{\text{gas}} > S_{\text{vloeistof}} > S_{\text{vaste stof}}$$

Verder is een opgeloste stof meer chaotisch dan wanneer de stof bij elkaar op een hoopje ligt, dus het oplossen van een stof levert ook meer chaos (en dus meer entropie).

2. Meer moleculen is meer chaos.

Dus wanneer er bij een reactie meer moleculen ontstaan, dan neemt de entropie toe. En wanneer er faseveranderingen zijn van moleculen (van gas naar vloeistof e.d.), dan verandert de entropie ook.

Oefeningen

1. Water kan gehydrolyseerd worden:
$$2 \text{H}_2\text{O} (\text{l}) \longrightarrow 2 \text{H}_2 (\text{g}) + \text{O}_2 (\text{g})$$

Is de entropie van deze reactie positief of negatief? Waarom?
2. Welke stof heeft de hoogste entropie: water of waterdamp?
3. Wat is entropie? En wat is de eenheid van entropie?

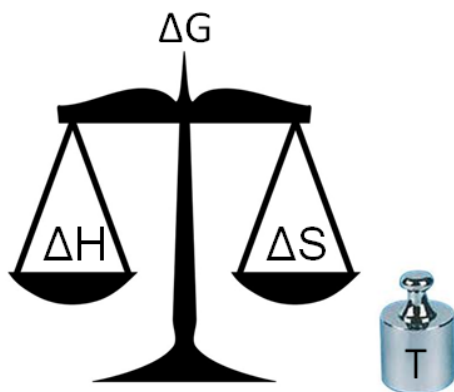
12. Gibbs vrije energie

Enthalpie en entropie bepalen samen of een reactie spontaan zal verlopen of niet. Moeten enthalpie en entropie tegen elkaar afgewogen moeten worden. Dit gebeurt door middel van het berekenen van de **vrije energie** (ΔG):

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

Hierbij geldt:

- ΔG = Gibbs vrije energie
- ΔH = enthalpie (kcal)
- T = temperatuur (K)
- ΔS = entropie



Figuur 9, de vrije energie (ΔG) weegt de enthalpie en de entropie tegen elkaar af. Dit evenwicht is te beïnvloeden door de temperatuur te veranderen. Een lage temperatuur zorgt ervoor dat de entropie minder belangrijk wordt, een hoge temperatuur zorgt ervoor dat de entropie juist zwaarder meeweegt.

Als ΔG negatief is verloopt de reactie **altijd** spontaan. Als ΔG positief is verloopt de reactie **nooit** spontaan.

De vrije energie is niet iets wat goed te meten valt, maar de formule kan wel helpen om in te schatten of een reactie spontaan zal verlopen of niet en of hier eventueel iets aan te doen is.

- Als een reactie **exotherm** (ΔH is negatief) is en de entropie neemt toe (ΔS is positief), zal de reactie **altijd spontaan verlopen**, want dan is ΔG altijd kleiner dan nul.
- Als een reactie **endotherm** (ΔH is positief) is en de entropie neemt af (ΔS is negatief), dan zal de reactie **nooit spontaan verlopen**, want dan is ΔG altijd groter dan nul)

Daarnaast zijn er dus twee 'grijze' gebieden:

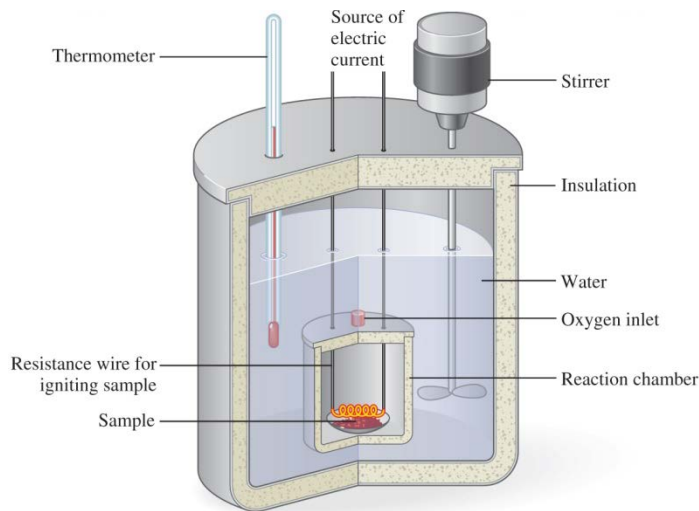
- Als een reactie **exotherm** is (ΔH is negatief), maar de entropie neemt af (ΔS is negatief). In principe verlopen bijna alle reacties die exotherm zijn spontaan, maar het universum streeft naar zoveel mogelijk chaos, terwijl hier de chaos afneemt. Dus de invloed van de entropie moet zo klein mogelijk zijn ten opzichte van de enthalpie om ΔG negatief te laten zijn. Dat kan **door de temperatuur zo laag mogelijk te houden**.
- Als een reactie **endotherm** is (ΔH is positief), maar de entropie neemt toe (ΔS is positief). In principe verlopen bijna alle reacties die endotherm zijn niet spontaan, maar het universum streeft naar zoveel mogelijk chaos en in deze reactie neemt de chaos wel toe. Nu zou een grotere rol van de entropie er dus voor kunnen zorgen dat de reactie tóch spontaan verloopt. Om de rol van de entropie groter te maken, moet de temperatuur **verhoogd worden**.

Oefeningen

1. Bij het oplossen van aluminium oxide (Al_2O_3) in water koelt de oplossing sterk af.
 - a) Wat zegt dat over de enthalpie van deze reactie?
 - b) Verwacht je dat het aluminium oxide spontaan op zal lossen op basis van deze observatie?
 - c) Hoe komt het dat het aluminium oxide toch spontaan oplost?
 - d) Wanneer het Al_2O_3 niet goed oplost, is het dan handig om de temperatuur te verhogen of te verlagen? Leg uit waarom.

13. De bomcalorimeter

De hoeveelheid energie die vrij komt bij een reactie kan gemeten worden door een bekende hoeveelheid van de stof te verbranden en exact te meten hoeveel energie hierbij vrij komt. Dit wordt gedaan in een bomcalorimeter.



Figuur 10, de bomcalorimeter (figuur 7.6 uit Denniston).

In de kleine kamer van de bomcalorimeter wordt een bekende hoeveelheid van de stof verbrand. De warmte die vrijkomt wordt overgedragen aan het omliggende water. De temperatuursverandering van het omliggende water wordt gemeten om te bepalen hoeveel energie er is overgedragen.

Hoe meer water er in de calorimeter zit, des te meer de vrijgekomen energie zal worden verdeeld over het water. Een grotere hoeveelheid water betekent dus ook dat eenzelfde hoeveelheid energie voor een kleinere temperatuursverandering zal zorgen. Als voor water een andere vloeistof wordt genomen die minder goed energie opneemt, dan zal de temperatuur ook minder snel stijgen bij eenzelfde hoeveelheid energie, dus ook de soortelijke warmte (hoe goed de vloeistof warmte opneemt) is van belang.

In de formule:

$$Q = m_s \times \Delta T_s \times SH_s$$

Q = de warmte die vrijkomt bij de reactie (dus de energie van de te testen stof) in cal

m_s = de massa **van de vloeistof om de binnenste kamer heen** (meestal water) in gram

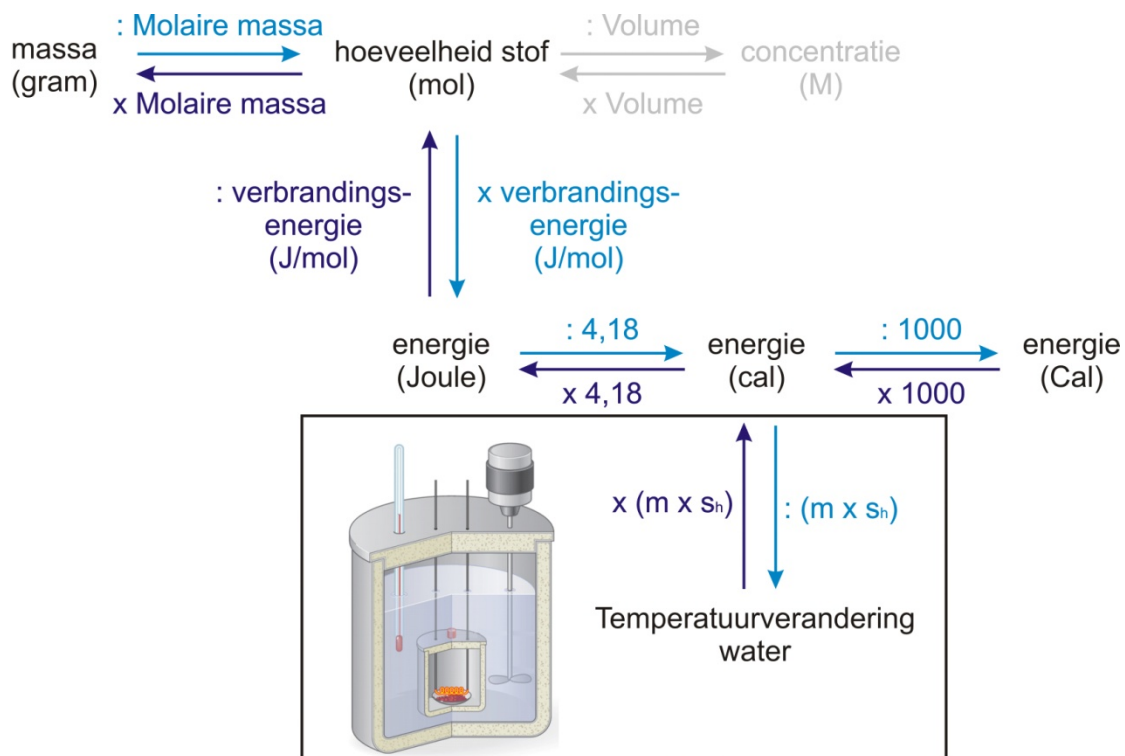
ΔT_s = de temperatuursverandering van de vloeistof

SH_s = de soortelijke warmte van de vloeistof (bij water is dit 1)

De Q die je hierbij berekent is de energie van de **totale** hoeveelheid van de stof die je in de bomcalorimeter hebt gestopt. Dus als er 5 gram stof is verbrand, dan is Q de warmte **per 5 gram stof**. Wanneer er 1 mol stof is verbrand, dan is Q de warmte **per mol stof**.

Let op dat de warmte berekend wordt in calorieën. Soms moet hieruit nog omgerekend worden naar bijvoorbeeld voedingscalorieën (1 Cal = 1000 cal) of naar Joule (1 cal = 4,18 Joule).

Het rekenschema dat eerder is gebruikt kan nu verder uitgebreid worden:



In dit schema zijn meerdere stappen te zien. Onderaan in het vierkante kader zie je de formule $Q = m_s \times \Delta T_s \times S_{H_s}$ om de hoeveelheid energie in te berekenen met behulp van de bomcalorimeter. **Let erop** dat de 'm' die hier staat weergegeven de massa van het **water** is en **niet** van de hoeveelheid stof! Met deze formule bereken je de hoeveelheid energie in cal.

Vanuit de hoeveelheid energie in cal kan er omgerekend naar voedingscalorieën (**Cal**) of naar Joule. In deze rij wordt er dus alleen maar omgerekend tussen verschillende eenheden. Je ziet dus drie keer energie staan, elke keer met een andere eenheid.

Bovenin het schema zie je de vertrouwde omrekenstap van gram naar mol. Vanuit het aantal mol kan via de verbrandingsenergie omgerekend worden naar de totale energie.

Voorbeeld

Je verbrandt 2,3 gram druivensuiker (glucose) in de bomcalorimeter gevuld met 0,5 liter water. De temperatuur van het water stijgt van 20,2 °C naar 37,0 °C. Wat is de verbrandingswaarde van de druivensuiker in kJ per mol? (1 cal = 4,18 Joule).

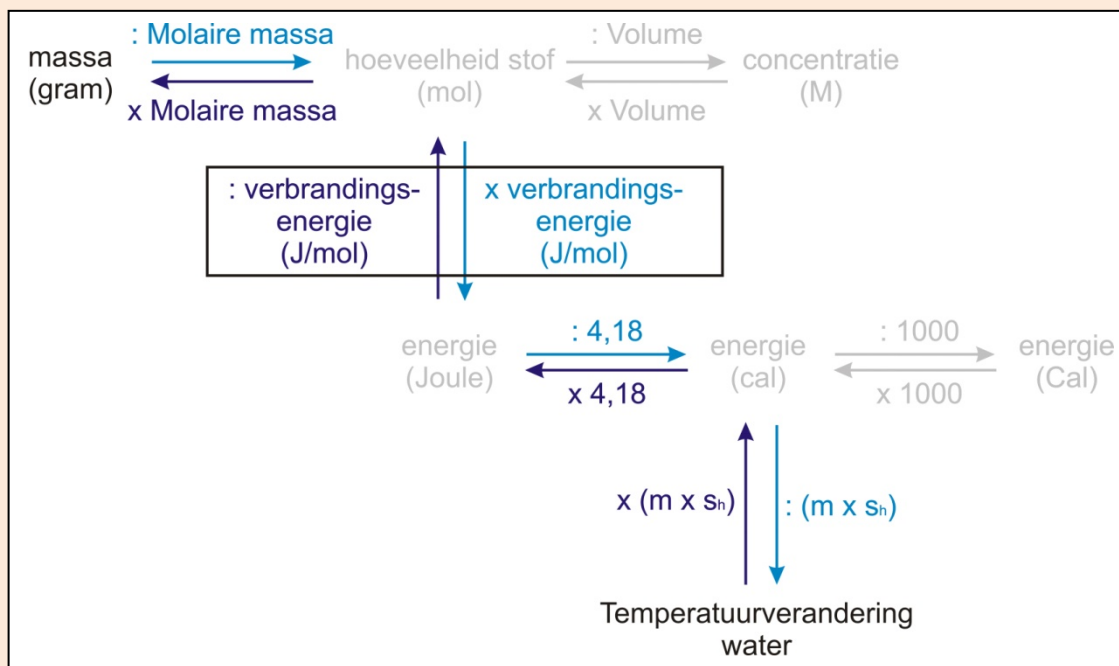
1. Eerst schrijven we de bekende gegevens op:

massa druivensuiker = 2,3 gram

volume water = 0,5 liter

$\Delta T = 37,0 - 20,2 = 16,8$ °C

Deze kunnen ook in kaart gebracht worden in het rekenschema:



De bekende waarden die je weet zijn de massa van de glucose en de temperatuursverandering (beide in zwarte letters aangegeven). Wat je moet berekenen is de verbrandingswaarde (aangegeven in het vierkant). Je ziet nu dus welke stappen er nodig zijn om naar je antwoord toe te rekenen.

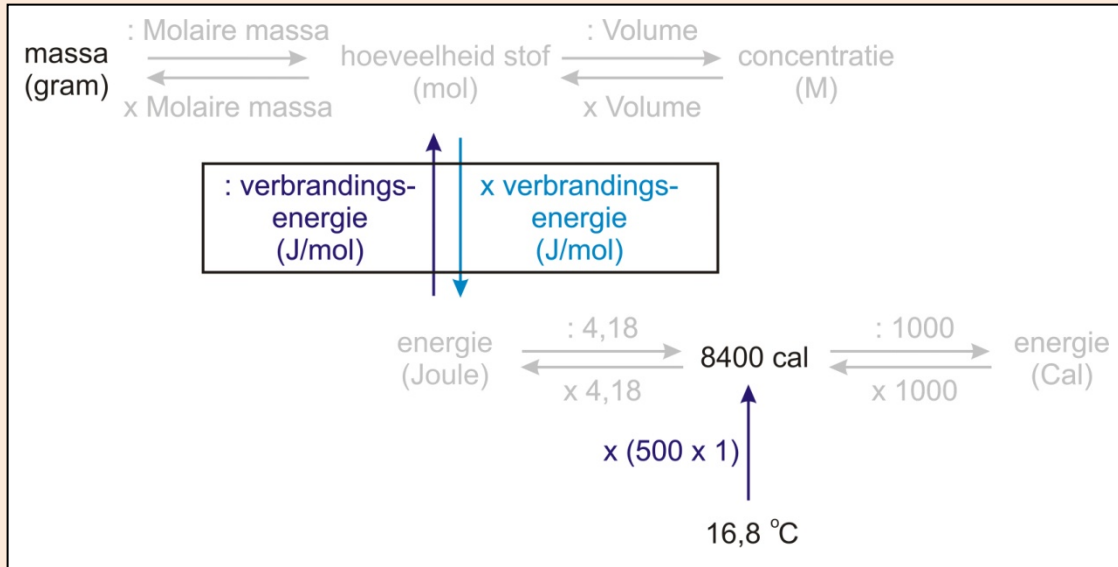
2. Om de verbrandingswaarde te berekenen wordt de formule gebruikt:

$$Q = m_s \times \Delta T_s \times S_{H_s}$$

We weten ΔT_s en de soortelijke warmte (die is 1 bij water). De massa van het water is af te leiden uit het volume van water: 0,5 liter = 500 gram (denk maar aan een pak melk van 1 liter dat 1 kg weegt).

3. Invullen: $Q = m_s \times \Delta T_s \times S_{H_s}$
 $Q = 500 \times 16,8 \times 1 = 8400$ cal

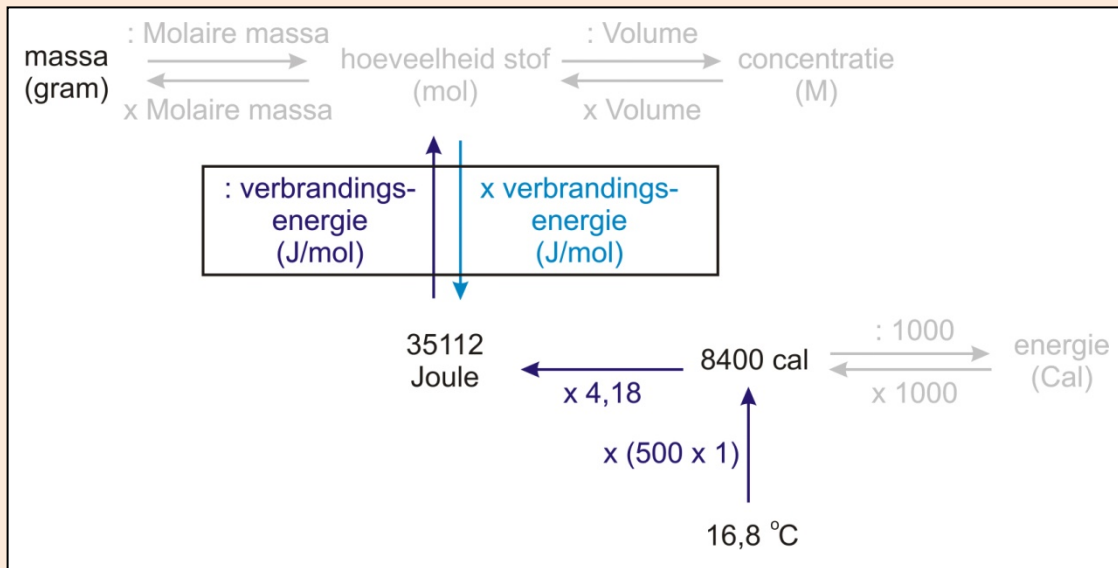
In het rekenschema:



Vanuit de temperatuursverandering van het water is nu dus de hoeveelheid energie in cal berekend.

4. Nu kan er omgerekend worden van cal naar Joule, door te vermenigvuldigen met 4,18 (want 1 cal = 4,18 Joule).

De hoeveelheid energie in Joule: $Q = 8400 \times 4,18 = 35112 \text{ Joule}$



5. Nu weten we de verbrandingswaarde van 2,3 gram druivensuiker. We moeten echter de verbrandingswaarde berekenen in kJoule per mol glucose. Hiervoor moet er eerst omgerekend worden van gram naar mol:

De molaire massa van glucose=

C	6 x 12,01	= 72,06
H	12 x 1,008	= 12,096
O	6 x 16,00	= 96,00 +
		180,156 g/mol

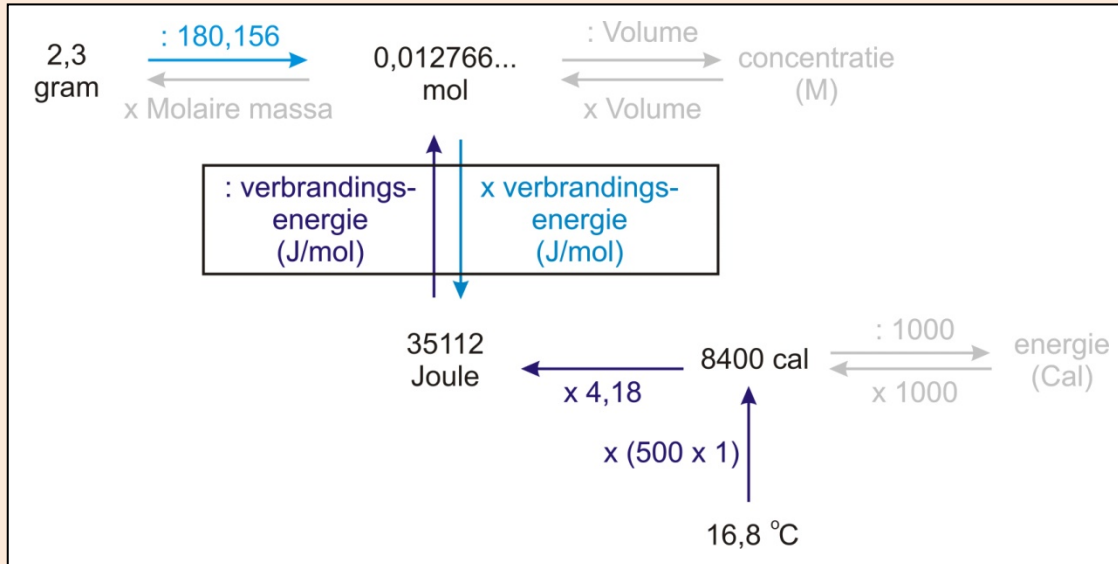
m = 2,3 gram

Invullen:

$$n = m / M = 2,3 / 180,156 = 0,012766..... \text{ mol}$$

Dus 0,012766... mol druivensuiker heeft een verbrandingswaarde van 35112 Joule

In het rekenschema zie je dat we nu vanaf de andere kant beginnen, namelijk bovenaan door om te rekenen van gram naar mol:



6. Nu moet de verbrandingsenergie nog berekend worden. Er geldt:

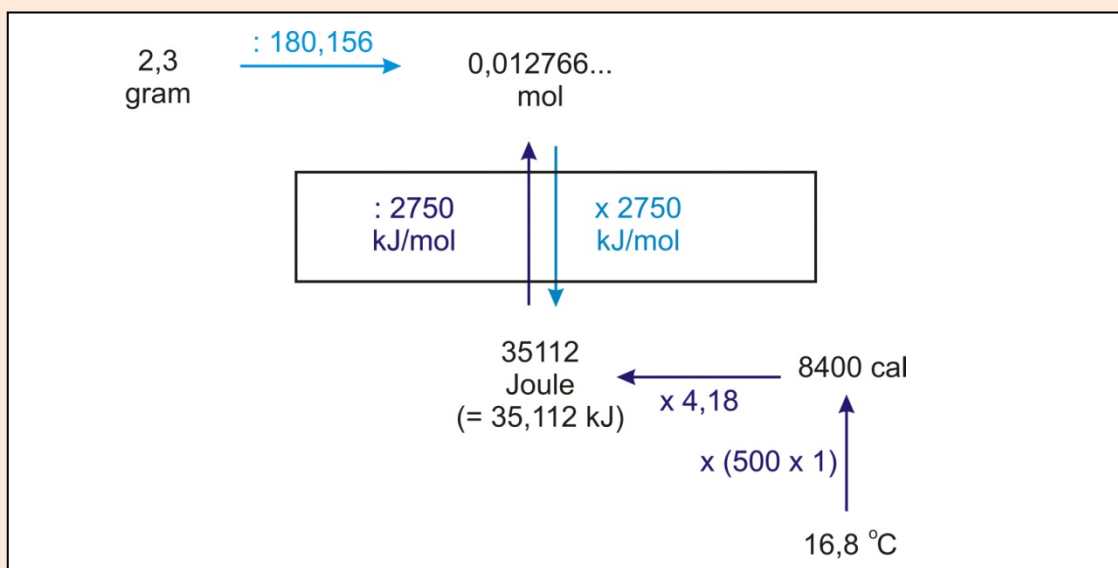
$$n \times \text{verbrandingsenergie per mol} = \text{totale energie}$$

Dus om de verbrandingsenergie per mol te berekenen:

$$\begin{aligned} \text{verbrandingsenergie per mol} &= \frac{\text{totale energie}}{n} \\ &= \frac{35112}{0,012766...} = 2750277 \text{ Joule/mol} \end{aligned}$$

Dit hele grote getal moet nog omgerekend worden van Joule naar kilojoule.

Antwoord: de verbrandingswaarde van glucose is 2750 kJ/mol



Wanneer je twijfelt over deze laatste stap, dan kun je dit eenvoudig controleren door de getallen in te vullen en te controleren:

$$0,012766 \dots \text{mol} \times 2750 \text{ kJ/mol} = 35,1 \text{ kJ}$$

Klopt!

Oefeningen

1. Je verbrandt 1,8 gram suiker (sucrose, $\text{C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_{11}$) in een bomcalorimeter gevuld met 750 ml water. De temperatuur van het water stijgt met $9,5^\circ\text{C}$.
 - a) Geef de reactievergelijking van deze reactie.
 - b) Wat is de verbrandingswaarde van sucrose in kJ/mol? (tip: volg het rekenvoorbeeld)
 - c) Kun je verklaren waarom er zo'n groot verschil zit tussen de verbrandingswaarde van glucose (2750 kJ/mol) en sucrose in kJ/mol?
2. Een Mars heeft een verbrandingswaarde van 72 Cal (let op de eenheid!). Wanneer je deze Mars in zijn geheel verbrandt in een bomcalorimeter gevuld met 1,0 liter water, hoeveel zal dan de temperatuur stijgen?
3. Een 0,0500 mol monster van voedsel wordt verbrand in een bomcalorimeter die $2,00 \cdot 10^2 \text{ g}$ water bevat.
 - a) Als het gewicht van het voedsel 114 gram per mol is, wat is dan de verbrandingswaarde (in voedingsCalorieën per gram) als de temperatuur van het water stijgt met $5,70^\circ\text{C}$? (Opgave 7.36 uit Denniston)
 - b) Wat is de voedingswaarde in kilojoule/mol?
4. Fotosynthese is het omzetten van CO_2 en H_2O in glucose, waarbij ook zuurstof ontstaat. Hierbij is licht nodig als energiebron.
 - a) Geef de reactievergelijking van de fotosynthese op basis van bovenstaande informatie.
 - b) Is deze reactie endotherm of exotherm?
 - c) Een plant produceert 2,16 gram glucose in een etmaal. Hoeveel gram water is hiervoor nodig geweest?

14. Reactiesnelheid

Voor de reactiekinetiek zie §7.3 Kinetics in Denniston (pag 229-236) en opgave 7.64

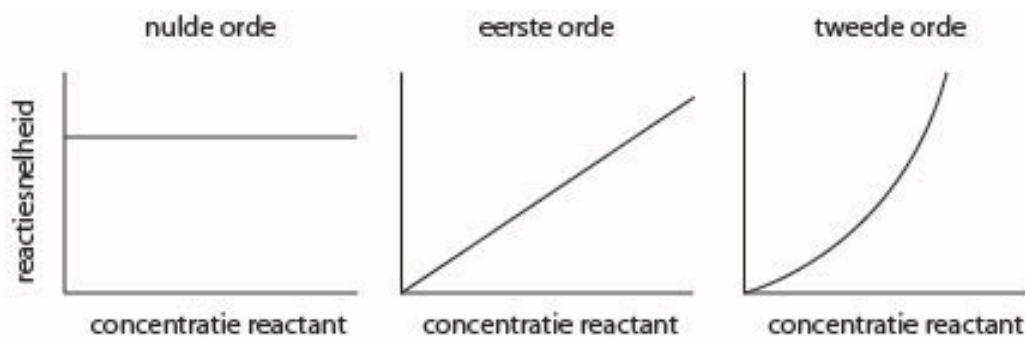
Om een reactie te laten verlopen, moeten de juiste moleculen zo met elkaar botsen, dat de atomen die met elkaar moeten reageren bij elkaar in de buurt komen. Bovendien moet er voldoende energie aanwezig zijn om de bestaande bindingen te verbreken. Hoe vaker deze situaties zich tegelijkertijd voordoen, hoe sneller de reactie zal verlopen.

De reactiesnelheid hangt dus af van de **activeringsenergie** en met de kans dat twee moleculen op de juiste plekken met elkaar **botsen**, waardoor zij met elkaar kunnen reageren.

- **Structuur van de reagerende moleculen:** sterke bindingen kosten veel energie om te verbreken. Dat betekent dat wanneer het reagerende molecuul sterke bindingen heeft, er veel activeringsenergie nodig is en de reactie wat langzamer verloopt. Ionische bindingen kunnen heel gemakkelijk verbroken worden (in oplossing zijn ze zelfs al verbroken). Covalente bindingen zijn doorgaans moeilijker te verbreken, dus hiervoor is meer energie en tijd nodig. Dus, hoe meer **activeringsenergie** er nodig is, des te langzamer de reactie verloopt.
- **Vorm van het molecuul:** wanneer de atomen die moeten reageren aan de buitenkant van het molecuul zit, is de kans groter dat reagerende moleculen op de juiste plek botsen met deze atomen. De reactie verloopt dan sneller dan wanneer de atomen die moeten reageren ergens verstopt diep in een molecuul zitten. De **kans** dat de betrokken atomen dan op de juiste plek met elkaar **botsen** is een stuk kleiner, dus verloopt de reactie langzamer.
- **Concentratie van de reactanten:** meer reactanten betekent een **grotere kans** dat de reactanten met elkaar **botsen**. De reactie verloopt dus sneller wanneer de concentratie van de reactanten hoger is. Wanneer je een reactiemengsel verdunt, heb je dus nog steeds evenveel moleculen, maar de reactie gaat toch langzamer verlopen.
- **Temperatuur van de reactanten:** hier spelen **twee** factoren een grote rol:
 1. hoe warmer de reactanten, des te sneller bewegen deze moleculen zich door de ruimte. Wanneer moleculen sneller bewegen, is **de kans op botsingen** groter.
 2. Sneller bewegen betekent ook dat er meer kinetische energie is, dus dat er sneller voldoende energie is om de **activeringsenergie** te leveren. Ook hierdoor verloopt de reactie dus sneller.
- **Fysische staat van de reactanten:** moleculen bewegen zich heel snel in een gas en botsen veel tegen elkaar aan. In een vaste stof botsen moleculen heel weinig met elkaar. De bewegingssnelheid van vloeistoffen zit hier tussenin. Reacties met gassen verlopen dus vaak sneller, omdat er een **grotere kans op botsingen** tussen de moleculen is. Reacties met vloeistoffen verlopen vaak langzamer dan reacties met gassen, maar sneller dan reacties met vaste stoffen om dezelfde redenen.
- **Aanwezigheid van een katalysator:** een katalysator is een stof die de **activeringsenergie** verlaagt. Dit kan bijvoorbeeld door te zorgen dat er minder energie nodig is om de bestaande verbindingen te verbreken, of door te zorgen dat moleculen bij elkaar gebracht worden met de reactieve groepen in de juiste positie.

Reactieorde

De reactieorde beschrijft hoe de concentratie van de reactanten de snelheid van de reactie beïnvloedt.



Figuur 11 verschillen tussen nulde orde, eerste orde en tweede orde reacties.

Bij een nulde orde reactie heeft de concentratie van de reactant geen enkele invloed op de snelheid waarmee de reactie verloopt.

Bij een eerste orde reactie is de concentratie reactant recht evenredig met de reactiesnelheid. Een 2 keer grotere concentratie van de reactant betekent een 2 keer hogere reactiesnelheid.

Bij een tweede orde reactie is het kwadraat van de concentratie reactant evenredig met de reactiesnelheid, dus een 2 keer grotere concentratie reactant betekent de reactie 4 keer sneller verloopt.

In een formule: $A + B \longrightarrow C$

$$\text{Snelheid} = k [A]^a * [B]^b$$

K is de reactieconstante bij een bepaalde temperatuur

[A] = de concentratie van stof A

[B] = de concentratie van stof B

a = de reactieorde van stof A

b = de reactieorde van stof B

De reactieorde van elke reactant kan worden bepaald door middel van een experiment. In dit experiment wordt de concentratie van de reactant gevarieerd en wordt gekeken hoe de reactiesnelheid verandert:

Stel, je bepaalt de reactiesnelheid bij een concentratie van stof A bij 1 M en bij 2 M. De concentratie van stof B is beide keren 1 M.

Als in beide gevallen de reactiesnelheid hetzelfde is, dan is a 0 (nulde orde reactie)

Als bij 2 M de snelheid twee keer zo groot wordt, dan is a 1 (eerste orde reactie)

Als bij 2 M de snelheid vier keer zo groot wordt, dan is a 2 (tweede orde reactie).

Vervolgens kan voor stof B ook de reactieorde bepaald worden, door de concentratie van stof B te verhogen (of te verlagen) en de concentratie van stof A constant te houden.

Oefeningen

1. Er zijn een aantal factoren die de reactiesnelheid beïnvloeden. Geef aan welke van de genoemde factoren bij onderstaande voorbeelden wordt gebruikt om de reactiesnelheid te bepalen, bijvoorbeeld om bederf tegen te gaan.
Voorbeeld: vacuüm verpakte koffie vacuüm verpakt
Antwoord: verminderen van de concentratie van één van de reactanten (zuurstof)
 - a) Potje spaghetti's: na openen koel bewaren
 - b) Aardappels onder water zetten
 - c) Waterstofperoxide concentraties verhogen om tanden te bleken
 - d) Krenten en rozijnen
 - e) Verpakken van pillen in waterdichte/luchtdichte verpakkingen
 - f) Schaatsen invetten om roesten te voorkomen
 - g) Invriezen van etenswaren
 - h) Verpakken van fruit 'onder beschermende atmosfeer' (bijvoorbeeld argon of stikstof)
2. De reactiekinetiek van het verbranden van alcohol (C_2H_5OH) wordt onderzocht.
 - a) Geef de reactievergelijking voor het verbranden van alcohol.
 - b) Stel de vergelijking op voor de reactiesnelheid van de verbranding van alcohol.
 - c) Wanneer de zuurstofconcentratie afneemt, vertraagt de verbranding. Kan de zuurstof een reactie orde 0 hebben?
 - d) Stel dat bij een halvering van de zuurstofconcentratie de reactie 4 keer langzamer verloopt, wat is dan de reactieorde van de zuurstof in deze reactie?
 - e) Een twee keer hogere concentratie alcohol blijkt te leiden tot een 2 keer hogere reactiesnelheid. Wat is de reactieorde van de alcohol in deze reactie?
 - f) Wat is de volledige vergelijking van de reactiesnelheid van deze reactie?
 - g) Het blijkt dat bij het afbreken van alcohol in het lichaam er sprake is van een nulde orde reactie. Leg uit of de alcohol sneller/even snel of langzamer afgebroken wordt wanneer je meer drinkt.

Voorbeeld tentamenvragen

Vraag 1

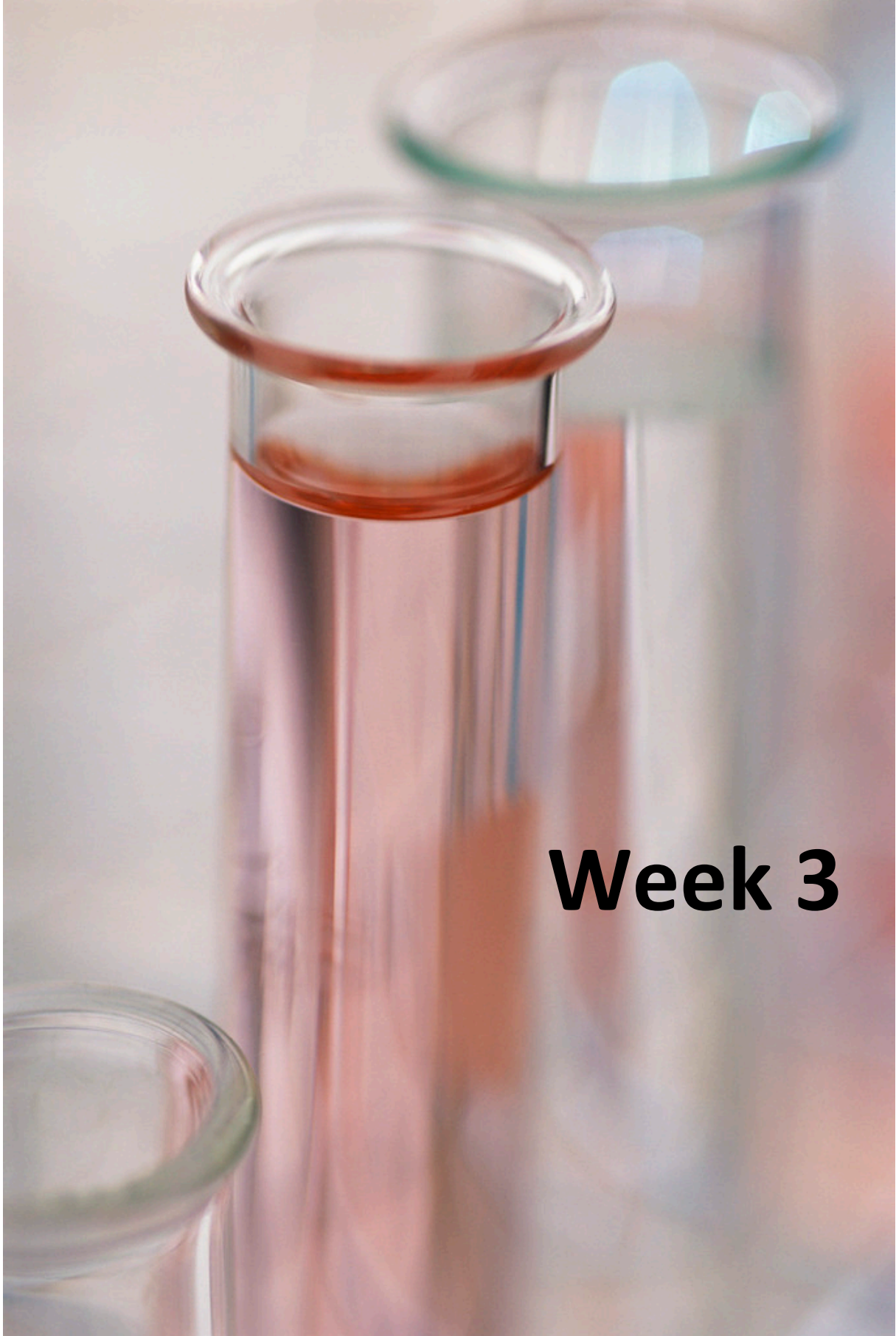
Van een voedingsstof wordt 0,05 mol verbrand in een bomcalorimeter die 0,2 liter water bevat. De molmassa van de voedingsstof bedraagt 114 g/mol.

- Bereken de voedingswaarde (in Cal/g) als de temperatuur van het water 6,52°C stijgt.
- Bereken de verbrandingsenthalpie (ΔH in kJ/mol) van de voedingsstof (1 cal = 4,18 J).

Vraag 2

Op het internet worden ATP-pillen te koop aangeboden. De aanbieder beweert dat de pillen je extra energie geven. Eén pil bevat 125 milligram ATP ($M_{\text{ATP}} = 507 \text{ g/mol}$). De hydrolyse van ATP tot ADP levert 30,5 kJ/mol op.

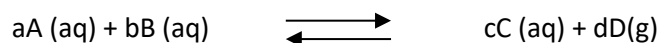
- Eén tablet druivensuiker bevat 3,36 gram glucose ($\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$). De verbrandingsenthalpie van glucose bedraagt $28,16 \times 10^5 \text{ J/mol}$. Bereken hoeveel ATP-pillen je moet slikken om even veel energie te krijgen als met 1 tablet druivensuiker.
- Bereken de voedingswaarde van de druivensuiker in kcal/g (1 cal = 4,18 J).
- Bereken hoeveel liter lucht (bevat 21% (v/v) O_2) bij 1 atm en 20 °C een persoon moet inademen om de glucose uit 1 tablet druivensuiker te verbranden tot CO_2 en H_2O . Het molaire volume bij STP bedraagt 22,4 dm³/mol.
- We verbranden 1 tablet druivensuiker in een bomcalorimeter die 0,2 liter water bevat. Met hoeveel °C stijgt de temperatuur van het water? De specifieke warmte van water is 1,0 cal/g.



Week 3

15. Evenwichtsreacties

Tot nu toe is gekeken naar reacties die één kant op gaan: reactanten worden omgezet in producten. In werkelijkheid zijn reacties vaak geen eenrichtingsverkeer, maar verlopen naar beide kanten. Als voorbeeld nemen we een reactie:



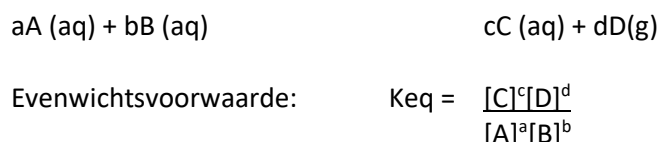
Hierbij zijn A en B de reactanten en C en D zijn de producten. De getallen a, b, c en d geven de molverhoudingen aan waarin de stoffen met elkaar reageren.

Op elk moment wordt een deel van A en B omgezet naar C en D. Tegelijkertijd wordt van C en D weer A en B gevormd. Omdat de reactie naar beide kanten op plaatsvindt, schrijven we evenwichtsreacties met een **dubbele pijl**.

Je kunt dit vergelijken met het verkeer tussen twee plaatsen. We nemen de grote stad Groningen en de kleinere plaats Bedum. Continu reizen er mensen van Groningen naar Bedum en andersom. Wanneer er evenveel mensen van Groningen naar Bedum reizen als andersom, dan is er sprake van een **evenwichtssituatie**. Het aantal mensen in Bedum en het aantal mensen in Groningen blijven gelijk, maar er reizen wel mensen heen en weer.

Bij **evenwichtsreacties** gebeurt exact hetzelfde. Er ontstaat evenveel A en B als dat er weer 'verdwijnt' (A en B verdwijnen niet, maar worden omgezet in C en D). Dus hoewel er continue een reactie plaats vindt, blijven netto alle hoeveelheden gelijk. Een bepaald deel van A en B wordt op elk moment omgezet in C en D en een bepaald deel van C en D wordt op elk moment omgezet in A en B.

Om aan te geven **hoe het evenwicht** ligt, wordt gebruik gemaakt van een **evenwichtsvoorwaarde**. Deze evenwichtsvoorwaarde stel je als volgt op:

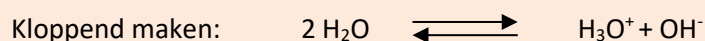
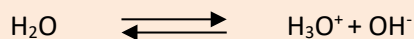


K_{eq} is de **evenwichtsconstante**. De evenwichtsconstante geeft aan hoeveel producten er zijn ten opzichte van hoeveel reactanten. De haakjes [] geven aan dat het hier gaat om de **concentraties** van elk van de stoffen in **mol/l**.

Voorbeeld

Stel de evenwichtsvoorwaarde op voor de vorming van OH⁻ en H₃O⁺ uit water.

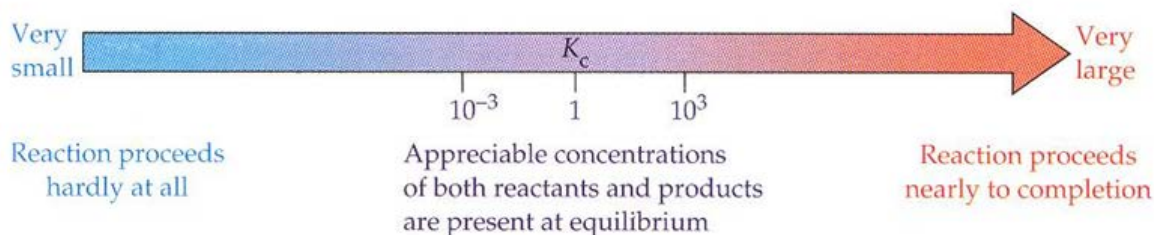
1. Schrijf altijd eerst de reactievergelijking op en maak deze kloppend:



2. Vul de waarden in voor de evenwichtsvoorwaarde:

$$K_{eq} = \frac{[H_3O^+][OH^-]}{[H_2O]^2}$$

Van veel reacties hebben wetenschappers bepaald hoe het evenwicht ligt bij een bepaalde temperatuur. Zij hebben gemeten hoeveel producten ten opzichte van reactanten er aanwezig zijn in een evenwichtssituatie en hebben daaruit de evenwichtsconstante berekend. **Deze evenwichtsconstante geeft aan hoe de verhouding is tussen de producten en de reactanten op het moment van een evenwicht.** Wat je niet weet is hoeveel stof er per tijdseenheid omgezet wordt in andere stoffen, maar je weet wel dat in een evenwichtssituatie de reactie evenveel de ene als de andere kant op plaats vindt, waardoor netto de hoeveelheden van de reactanten en producten gelijk blijven.



Figuur 12. Indicatie van de ligging van het evenwicht aan de hand van de evenwichtsconstante.

De evenwichtsconstante

Figuur 13 geeft een duidelijk beeld van de evenwichtsconstante en wat deze zegt over het evenwicht. Als de evenwichtsconstante tussen 10^{-3} en 10^3 in ligt, dan is er van zowel de reactanten als de producten een meetbare hoeveelheid aanwezig. Als de evenwichtsconstante kleiner is dan 10^{-3} , dan is er zeer weinig van de reactant aanwezig. Wanneer de evenwichtsconstante groter is dan 1000, dan is er juist heel veel product en heel weinig reactant aanwezig.

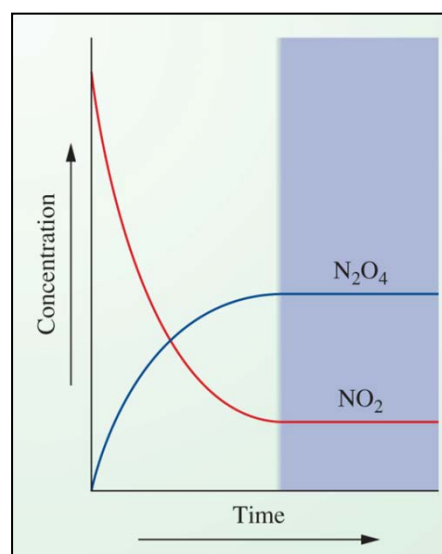
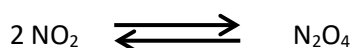
Het instellen van het evenwicht

Wanneer je de reactanten bij elkaar voegt, zal de reactie plaats gaan vinden om het product te vormen. Deze reactie gaat net zo lang door tot het evenwicht is ingesteld. Tegelijkertijd vindt de omgekeerde reactie ook plaats, maar de reactie van reactant naar product verloopt veel meer dan de omgekeerde plaats. We geven dit wel aan in een reactie met een dikkere pijl:



Zolang de ene pijl dikker is dan de andere (dus zolang de reactie meer de ene kant op plaats vindt dan de andere kant op) is er geen sprake van een evenwicht. Op deze momenten **geldt de evenwichtsvoorwaarde niet**, omdat er geen sprake is van een evenwicht. Pas op het moment dat het evenwicht is ingesteld, geldt de evenwichtsvoorwaarde weer.

Het instellen van een evenwicht wordt duidelijk geïllustreerd in figuur 14. Hier zie je hoe er zich een evenwicht instelt voor de reactie waarin stikstofdioxide (NO_2) wordt omgezet in distikstoftetraoxide (N_2O_4). In het begin is er alleen NO_2 aanwezig en geen N_2O_4 . na verloop van tijd ontstaat er een evenwicht, waarbij er van zowel NO_2 als N_2O_4 constant dezelfde hoeveelheid aanwezig is:



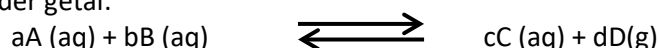
Figuur 13 (Figuur 7.14 uit Denniston), het instellen van een evenwicht.

Het reactiequotiënt

Als er alleen A en B aanwezig zijn, dan is het zeker dat de reactie naar rechts meer zal verlopen dan naar links, er is namelijk geen C en D aanwezig. Als er alleen C en D aanwezig zijn, dan zal de reactie naar links meer verlopen, omdat er geen A en B aanwezig zijn.

Maar hoe zit dat als er van A, B, C en D wel wat aanwezig is? Hoe weet of er sprake is van een evenwicht? En hoe weet je of de reactie naar links of naar rechts verloopt om het evenwicht in te stellen wanneer A, B, C en D wel aanwezig zijn, maar niet in de concentraties van het evenwicht?

Om dat te bepalen wordt het **reactiequotiënt (Q)** gebruikt. Het reactiequotiënt is exact dezelfde formule als de evenwichtsvoorwaarde, maar dan is de uitkomst niet de evenwichtsconstante, maar een ander getal:



$$\text{Reactiequotiënt: } Q = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$

Als	$Q = K_{eq}$	dan is er sprake van een evenwichtssituatie
	$Q > K_{eq}$	dan verschuift de reactie naar links
	$Q < K_{eq}$	dan verschuift de reactie naar rechts.

Dit is ook te beredeneren: als Q kleiner is dan K, dan zal Q dus groter worden om tot de evenwichtssituatie te komen. Daarvoor zal de teller dus groter moeten worden ($[C]^c [D]^d$) terwijl de noemer ($[A]^a [B]^b$) kleiner zal worden. Dat betekent dus dat er meer C en D zal moeten ontstaan, dus zal de reactie naar rechts moeten verschuiven.

Als Q groter is dan K, dan geldt dezelfde redenering ook (maar dan moet Q dus kleiner worden).

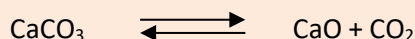
Voorbeeld

Geef de reactievergelijking en de evenwichtsvoorwaarde voor de vorming van calciumoxide (CaO) en CO₂ uit calciumcarbonaat.

De reactant is calciumcarbonaat (CaCO₃). De producten zijn calciumoxide (CaO) en CO₂:



Omdat het een evenwichtsreactie is, wordt de reactievergelijking geschreven met een dubbele pijl:



$$\text{De evenwichtsvoorwaarde: } K_{eq} = \frac{[CaO][CO_2]}{[CaCO_3]}$$

Voor deze evenwichtsreactie hebben wetenschappers de evenwichtsconstante bepaald bij 2 temperaturen: $1,9 \cdot 10^{-23}$ bij 298 K en 1,0 bij 1200 K. Wat zeggen deze waarden over de ligging van het evenwicht?

De eerste evenwichtsconstante ($1,9 \cdot 10^{-23}$) is een zeer klein getal. Dat betekent dus dat de uitkomst van de evenwichtsvoorwaarde zeer klein is:

$$K_{eq} = \frac{[CaO][CO_2]}{[CaCO_3]}$$

Dat betekent dat er dus heel veel calciumcarbonaat is en heel weinig CaO en CO₂ bij 298 K.

De tweede evenwichtsconstante is 1,0. Bij deze hele hoge temperatuur is de concentratie calciumcarbonaat dus even groot als het product van de concentraties CaO en CO₂. Bij deze temperatuur is er dus relatief veel minder CaCO₃ aanwezig en wordt er veel meer calciumoxide gevormd dan bij 298 Kelvin.

Oefeningen

1. Stikstofmonoxide (NO) is een stof die bloedvaten verwijdert. Het kan als geneesmiddel dienen en wordt ook door het lichaam zelf aangemaakt. NO kan gevormd worden uit een evenwichtsreactie waarbij distikstofoxide (N₂O) reageert met zuurstof.
 - a. Geef de reactievergelijking voor deze reactie en maak deze kloppend
 - b. Geef de evenwichtsvoorwaarde voor deze reactie
 - c. De evenwichtsconstante voor deze reactie is $1,7 \cdot 10^{-13}$. Wat zegt deze evenwichtsconstante over de ligging van het evenwicht?
2. Sommige bacteriën kunnen het broeikasgas methaan (CH₄) en water produceren uit waterstofgas (H₂) en koolstofdioxide (CO₂). Dit gebeurt onder anderen in de darmen van veel organismen, zoals koeien. Geef de reactievergelijking en de evenwichtsvoorwaarde voor deze reactie.
3. **In sommige bacteriën wordt glucose omgezet in acetaat (CH₃COO⁻) en H⁺. Geef de reactievergelijking en de evenwichtsvoorwaarde voor deze evenwichtsreactie.**

16. Rekenen met evenwichtsreacties

Rekenen aan **evenwichtsreacties** is wat complexer dan rekenen aan **volledig verlopende reacties**. Het algemene rekenschema om aan de hand van de evenwichtsvergelijking te rekenen is bij evenwichtsreacties:

A	+	2 B	\rightleftharpoons	3 C	+	D	
<input type="text"/>		<input type="text"/>		<input type="text"/>		<input type="text"/>	gram begin
<input type="text"/>		<input type="text"/>		<input type="text"/>		<input type="text"/>	mol begin
<input type="text"/>							mol verandering
<input type="text"/>		<input type="text"/>		<input type="text"/>		<input type="text"/>	mol eind
<input type="text"/>		<input type="text"/>		<input type="text"/>		<input type="text"/>	gram eind

Het grote verschil zit in de rij van de **verandering**. Bij **volledig verlopende reacties** kun je de molverhouding bij de verandering tussen de producten en de reactanten **direct naar elkaar doorrekenen**. Bij evenwichtsreacties werkt dit anders en moet je gebruik maken van de **evenwichtsvoorwaarde**. Niet alle beschikbare reactanten reageren namelijk in een evenwichtsreactie. Om te bepalen hoeveel er van de producten ontstaat en hoeveel er van de reactanten overblijft, bepalen we aan de hand van de evenwichtsvoorwaarde.

Stappenplan voor het rekenen aan evenwichtsreacties

1. Schrijf de reactievergelijking van de evenwichtsreactie op
2. Vul de gegevens in die bekend zijn
3. Reken indien nodig om van gram naar mol
4. Geef de verandering aan met x (we weten nog niet hoeveel er verandert, maar we kunnen met behulp van x al wel de onderlinge verhoudingen bepalen)
5. Bepaal de eindhoeveelheden met x (let op het verwaarlozen van x)
6. Vul de gegevens over de verandering in in de evenwichtsvoorwaarde en bereken x uit de evenwichtsvoorwaarde
7. Vul x in in het schema en reken de eindwaarden uit
8. Reken indien nodig om van mol naar gram
9. Controleer je antwoord door de gegevens in te vullen in de evenwichtsvoorwaarde en te controleren of de evenwichtsconstante die hieruit komt de juiste is

De stappen 1 t/m 3 zijn dus hetzelfde voor evenwichtsreacties en volledig verlopende reacties, maar daarna moet er met de **evenwichtsvoorwaarde** gerekend worden.

Voorbeeld

2,3 gram calciumcarbonaat (CaCO_3) wordt gebruikt voor de productie van calciumoxide (CaO) en CO_2 bij 298 K. Bepaal hoeveel gram calciumoxide er gevormd wordt. De evenwichtsconstante is $1,9 \cdot 10^{-23}$.

1. Schrijf de reactievergelijking op



2. Vul de gegevens in die bekend zijn

CaCO ₃	CaO	+	CO ₂	
2,3 gram	0 gram		0 gram	gram begin
	0		0	mol begin
				mol verandering
				mol eind
				gram eind

3. Omrekenen van gram naar mol

$$\begin{array}{rcl}
 M_{\text{CaCO}_3} & = & 40,08 \\
 & & 12,01 \\
 & & 3 \times 16,00 \\
 & = & 40,08 \\
 & = & 12,01 \\
 & = & 48,00 + \\
 & & 100,09 \text{ g/mol}
 \end{array}$$

$$n = m / M = 2,3 / 100,09 = 2,29 \dots \cdot 10^{-2} \text{ mol}$$

Invullen:

CaCO ₃	CaO	+	CO ₂	
2,3 gram	0 gram		0 gram	gram begin
2,29... 10 ⁻²	0		0	mol begin
				mol verandering
				mol eind
				gram eind

4. Verandering aangeven met x

Vanaf deze stap is er een verschil tussen evenwichtsreacties en volledig verlopende reacties. Bij volledig verlopende reacties kun je aan de hand van de limiterende stof bepalen exact hoeveel van elke reactant er zal reageren en hoeveel product er ontstaat. Bij evenwichtsreacties hangt het af van de evenwichtsconstante hoeveel product er zal ontstaan ten opzichte van de reactanten. Dat weten we niet op dit moment en daarom geven we de verandering eerst aan als 'x'.

We beginnen met de stof die in de kleinste molverhouding reageert. In dit geval is de molverhouding van alle stoffen 1:1:1, dus als er 'x' CaCO₃ reageert, dan zal er 'x' mol CaO ontstaan en ook 'x' mol CO₂.

Aan het begin van de reactie is er nog geen calciumoxide en geen CO₂ aanwezig, dus de reactie zal naar rechts verschuiven. Daarom vullen we voor calciumcarbonaat '-x' in en voor de producten '+x'.

Als er zowel reactanten als producten aanwezig zijn, kun je met behulp van het reactiequotiënt bepalen welke kant de reactie op zal gaan schuiven. Als de reactie naar links verschuift ($Q > K_{eq}$), dan moet je de + en de - precies andersom schrijven, dus '-x' bij de producten en '+x' bij de reactanten.

CaCO_3	\rightleftharpoons	CaO	+	CO_2	
2,3 gram		0 gram		0 gram	gram begin
$2,29 \dots 10^{-2}$		0		0	mol begin
- x		+ x		+ x	mol verandering
					mol eind
					gram eind

5. Bepalen van de eindhoeveelheden

Wanneer de reactie in evenwicht is, zullen de eindhoeveelheden zijn:

CaCO_3 :	$2,29 \dots 10^{-2} - x$
CaO :	$0 + x = x$
CO_2 :	$0 + x = x$

Wanneer de evenwichtsconstante meer dan een factor 100 kleiner is dan de beginconcentratie van de reactanten, dan mag x verwaarloosd worden ten opzichte van de hoeveelheid van het product: beginconcentratie reactant/ $K_{eq} > 100$.

In dit geval is de evenwichtsvoorwaarde $1,9 \cdot 10^{-23}$, terwijl de hoeveelheid calciumcarbonaat $2,29 \cdot 10^{-2}$ is. $2,29 \cdot 10^{-2} / 1,9 \cdot 10^{-23} = 1,205 \dots 10^{21}$, dat is veel groter dan 100, dus 'x' mag verwaarloosd worden:

CaCO_3 :	$2,29 \dots 10^{-2}$ -x
CaO :	$0 + x = x$
CO_2 :	$0 + x = x$

CaCO_3	\rightleftharpoons	CaO	+	CO_2	
2,3 gram		0 gram		0 gram	gram begin
$2,29 \dots 10^{-2}$		0		0	mol begin
- x		+ x		+ x	mol verandering
$2,29 \dots 10^{-2}$		+ x		+ x	mol eind
					gram eind

6. Invullen in de evenwichtsvoorwaarde en berekenen van x

De evenwichtsvoorwaarde voor deze reactie: $K_{eq} = \frac{[CaO][CO_2]}{[CaCO_3]}$

Invullen:

$$1,9 \cdot 10^{-23} = \frac{x^2}{2,29 \cdot 10^{-2}}$$

Beide zijden vermenigvuldigen met $2,29 \cdot 10^{-2}$:

$$4,366 \cdot 10^{-25} = x^2$$

Worteltrekken:

$$x = \sqrt{4,366 \cdot 10^{-25}} = 6,60 \cdot 10^{-13}$$

7. x invullen in het schema

We hebben berekend dat $x = 6,60 \cdot 10^{-13}$ mol is. Voor CaO en CO₂ is dat gelijk de hoeveelheid mol die als eindproduct ontstaat.

Voor CaCO₃ hadden we besloten x te verwaarlozen. We kunnen nu controleren of dat inderdaad correct was: $2,29 \cdot 10^{-2} - 6,60 \cdot 10^{-13} = 2,29 \cdot 10^{-2}$. 'x' mocht zeker verwaarloosd worden!

CaCO ₃	CaO	+	CO ₂	
2,3 gram	0 gram		0 gram	gram begin
$2,29 \cdot 10^{-2}$	0		0	mol begin
- x	+ x		+ x	mol verandering
$2,29 \cdot 10^{-2}$	$6,60 \cdot 10^{-13}$		$6,60 \cdot 10^{-13}$	mol eind
				gram eind

8. Berekenen van de eindhoeveelheden in gram

Voor CaO: $M_{CaO} = 40,08 + 16,00 = 56,08 \text{ g/mol}$
 $m = n \times M = 6,60 \cdot 10^{-13} \times 56,08 = 3,71 \cdot 10^{-11} \text{ gram CaO}$

Voor CO₂: $M_{CO_2} = 12,01 + (2 \times 16,00) = 44,01 \text{ g/mol}$
 $m = n \times M = 6,60 \cdot 10^{-13} \times 44,01 = 2,91 \cdot 10^{-11} \text{ gram CO}_2$

CaCO ₃	CaO	+	CO ₂	
2,3 gram	0 gram		0 gram	gram begin
$2,29 \cdot 10^{-2}$	0		0	mol begin
- x	+ x		+ x	mol verandering
$2,29 \cdot 10^{-2}$	$6,60 \cdot 10^{-13}$		$6,60 \cdot 10^{-13}$	mol eind
2,3 gram	$3,71 \cdot 10^{-11}$		$2,91 \cdot 10^{-11}$	gram eind

9. Controleer je antwoord

Om te controleren of er geen rekenfouten gemaakt zijn, kun je de berekende concentraties invullen en hieruit weer de evenwichtsconstante berekenen:

$$K_{eq} = \frac{(6,60 \cdot 10^{-13})^2}{2,29 \cdot 10^{-2}} = 1,9 \cdot 10^{-23}$$

Het antwoord klopt!!

Het antwoord op de vraag is dus dat er $3,71 \cdot 10^{-11}$ gram calciumcarbonaat gevormd wordt, dat is dus bijna niets. Dat was ook wat je verwachtte, omdat de evenwichtsconstante heel klein is.

Verschil tussen evenwichtsreacties en volledig verlopende reactie

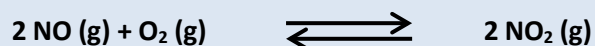
Het verschil tussen evenwichtsreacties en volledig verlopende reacties bij het berekenen van de hoeveelheden producten en reactanten bestaat dus hieruit dat bij **volledig verlopende reacties** je bepaalt welke stof in **ondermaat** aanwezig is en je aan de hand hiervan voor alle stoffen bepaalt hoeveel er zal reageren. Bij **evenwichtsreacties** bepaal je de beginhoeveelheden van alle stoffen gebruik je de **evenwichtsvoorwaarde** om de verandering te bepalen.

In het lichaam vinden heel veel evenwichtsreacties plaats. Echter, deze zijn vaak erg complex en geven zeer ingewikkelde evenwichtsvoorwaarden. Daarom worden hier meer simpele scheikundige voorbeelden gebruikt.

Oefeningen

- 5 gram calciumcarbonaat wordt gebruikt voor de productie van calciumoxide en CO_2 bij 298 K. Bepaal hoeveel gram calciumoxide er gevormd wordt. De evenwichtsconstante is $1,9 \cdot 10^{-23}$ (volg het rekenvoorbeeld).
- Stikstof en waterstof reageren tot ammonia (NH_3) in een evenwichtsreactie.
 - Geef de reactievergelijking en de evenwichtsvoorwaarde voor deze reactie. Voor deze reactie wordt 1,57 mol stikstof (N_2) gemengd met 1,92 mol H_2 en 8,13 mol NH_3 in een reactievat van 20 liter. De evenwichtsconstante is $1,7 \cdot 10^2$.
 - Is deze reactie in evenwicht? Zo niet, welke kant schuift het evenwicht op?
- Bij hoge temperaturen (500 K) kunnen uit waterstofgas (H_2) twee H-atomen ontstaan:
$$\text{H}_2 (\text{g}) \rightleftharpoons 2\text{H} (\text{g})$$
De evenwichtsconstante bij deze reactie is $1,2 \cdot 10^{-42}$.
 - Wat verwacht je aan de hand van de evenwichtsvoorwaarde over de verhouding tussen hoeveelheden H_2 en H bij 500 K?
 - Geef de evenwichtsvoorwaarde voor deze reactie.
- Waterstofsulfide (H_2S) heeft een heel sterke geur van rotte eieren. Waterstofsulfide komt voor in aardgas, maar wordt bijvoorbeeld ook door darmbacteriën geproduceerd. H_2S kan gevormd worden uit zwavel (S_2) en waterstof (H_2).
 - Geef de reactievergelijking en de evenwichtsvoorwaarde van deze reactie.
 - Wat is de evenwichtsconstante wanneer $[\text{H}_2] = 2,1 \cdot 10^{-1} \text{ M}$, $[\text{S}_2] = 1,1 \cdot 10^{-6} \text{ M}$ en $[\text{H}_2\text{S}] = 7,3 \cdot 10^{-1} \text{ M}$.

5. Stikstofmonoxide is een stof die in het lichaam wordt aangemaakt omdat het zorgt voor sterke verwijding van bloedvaten. Stikstofmonoxide wordt op kleine schaal ook als geneesmiddel gebruikt. Opslag in een omgeving waar ook zuurstof aanwezig is leidt echter tot de omzetting van stikstofmonoxide in stikstofdioxide:



De evenwichtsconstante voor deze reactie is $6,9 \cdot 10^5$ bij 500 K.

In een reactievat van 5 liter zit 0,060 mol NO, 1,0 mol O₂ en 0,80 mol NO₂. Is dit mengsel in evenwicht? Zo niet, welke kant zal de reactie op verlopen?

Bij de reacties van zwakke zuren en basen zal er nog veel gerekend worden met evenwichtsreacties. Daar zullen ook meer oefeningen volgen waarbij er gerekend wordt met evenwichtsreacties.

17. Het principe van LeChatelier en het verschuiven van evenwichten

Evenwichten reageren op veranderingen in de omgeving. Het toevoegen/verwijderen van reactanten en producten, het veranderen van de temperatuur of de druk hebben allemaal invloed op de ligging van het evenwicht.

Evenwichten gedragen zich volgens het principe van LeChatelier. Het principe van LeChatelier stelt:

Een evenwicht zal proberen zichzelf in stand te houden. Volgens LeChatelier's principe zal het evenwicht een verandering tegenwerken.

Een voorbeeld:



Verandering van concentraties

Als jij meer A toevoegt, dan zal de evenwichtsconstante kleiner worden. Om toch weer een evenwicht te krijgen, moet er dus meer C en D komen ten opzichte van A en B. Het systeem zal de verandering dus tegengaan door A samen met B om te zetten in C en D (evenwicht verschuift naar rechts).

Als jij A vermindert gebeurt het omgekeerde: dan zal het systeem dat tegengaan door C en D om te zetten in A en B (evenwicht verschuift naar links).

Veranderingen van druk

Als de druk wordt verhoogd, dan zal het systeem dat proberen te verlagen door gassen om te zetten in vloeistoffen of vaste stoffen (minder gas, dus de druk daalt). In het voorbeeld zal het evenwicht naar links verschuiven omdat D een gas is en A en B niet.

Als de druk wordt verlaagd, dan zal het systeem juist proberen de druk te verhogen, door meer gassen te produceren (evenwicht verschuift naar rechts).

Verandering van de temperatuur

Het omzetten van A en B in C en D is een exotherme reactie (er komt energie bij vrij). Het omzetten van C en D in A en B is dus een endotherme reactie (er is energie voor nodig).

Als jij de temperatuur verhoogt, dan zal het systeem proberen de temperatuur te verlagen. Het zal dus energie verbruiken door middel van de endotherme reactie. Het evenwicht schuift dan dus naar links.

Als jij de temperatuur verlaagt, dan zal het systeem proberen de temperatuur te verhogen. Daarvoor is energie nodig. Die energie komt uit de exotherme reactie, dus zal het evenwicht naar rechts verschuiven (dat levert immers energie op, zoals je ook in de reactievergelijking kunt zien).

Het toevoegen van een katalysator

Een katalysator verandert wel de reactiesnelheid, maar niet de ligging van het evenwicht. Een katalysator heeft dus geen invloed op de verhouding van producten en reactanten.

Oefeningen

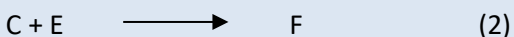
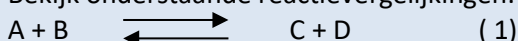


- Naar welke kant verschuift het evenwicht als je de concentratie van Q verhoogt?
- De vorming van Y is een exotherme reactie. Naar welke kant verschuift het evenwicht als je de temperatuur verhoogt?



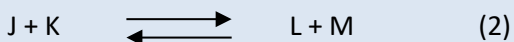
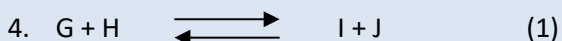
- Naar welke kant verschuift het evenwicht als je de concentratie van V verhoogt?
- Naar welke kant verschuift het evenwicht als je de druk verhoogt?
- Naar welke kant verschuift het evenwicht als je de temperatuur verlaagt?
- Wat gebeurt er met de ligging van het evenwicht als je een katalysator toevoegt?

3. Bekijk onderstaande reactievergelijkingen:



Reactie 1 is een evenwichtsreactie en reactie 2 is een aflopende reactie.

- Je hebt in een bekglas een oplossing met een evenwicht 1, er zitten dus alleen A, B, C en D in de oplossing. Wat gebeurt er met dit evenwicht 1 wanneer je E toevoegt?
- Wat gebeurt er met de concentratie van A wanneer je meer van F toevoegt?
- Stel dat reactie 2 ook een evenwichtsreactie is, wat gebeurt er dan met de concentratie van A wanneer je meer F toevoegt?



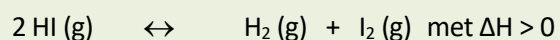
Je hebt een situatie met twee evenwichten, waarin stof J in beide evenwichtsreacties voorkomt.

- Wat gebeurt er met beide evenwichten als je meer H toevoegt?
- Wat gebeurt er met de evenwichten 1 en 2 als je meer J toevoegt?

Voorbeeld tentamenvraag

Vraag 1

We beschouwen nu de volgende evenwichtsreactie:



In een afgesloten reactievat (volume = 2 liter) wordt op tijdstip t_0 0,10 mol HI gebracht. Na instelling van het evenwicht op t_{ew} blijkt er 0,04 mol I_2 te zijn ontstaan.

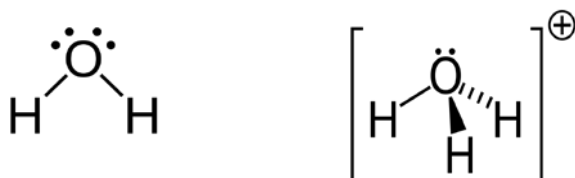
- a. Bereken de concentratie van HI in de evenwichtstoestand.
- b. Bereken de evenwichtsconstante K.
- c. Wat gebeurt er telkens met de ligging van het evenwicht wanneer we de volgende veranderingen zouden aanbrengen. Geef bij iedere situatie een korte toelichting:
 1. We onttrekken I_2 uit het vat.
 2. We verhogen de druk in het vat.
 3. We verlagen de temperatuur in het vat.
 4. We voegen een katalysator toe aan de reactie.
- d. Bij welke van de onder opgave 2c genoemde situaties verandert de waarde van de evenwichtsconstante? Beredeneer of de evenwichtsconstante K groter of kleiner wordt.

A close-up photograph of several petri dishes containing agar. The agar is in various colors: red, yellow, and green. The dishes are arranged in a cluster, with some in the foreground and others in the background, creating a sense of depth. The lighting is soft, highlighting the smooth texture of the agar.

Week 4

18. Zuren

Zuren zijn stoffen die in water **een proton (H^+) af kunnen staan (dissociatie)**. Hierbij wordt onderscheid gemaakt tussen **sterke zuren**, die in water **volledig** een H^+ afstaan en **zwakke zuren**, waarbij slechts een deel van de moleculen een H^+ afstaan. In het eerste geval is er sprake van een aflopende reactie, in het laatste geval is er sprake van een evenwichtsreactie. De protonen die worden afgestaan, worden opgenomen door water. Daardoor ontstaat het **hydronium ion**, oftewel H_3O^+ . In plaats van het hydronium ion wordt ook wel het water achterwege gelaten en alleen H^+ weergegeven.



Figuur 14. De Lewisstructuren van water (H_2O) en het hydronium ion (H_3O^+).

Reactievergelijkingen voor dissociatie van zuren.

Bij het opstellen van een **reactievergelijking** voor de dissociatie een zuur neem je de volgende stappen. In de uitleg staat A voor zuur ($A = \text{acid}$). HA is het zuur met het proton er nog aan en A^- is het molecuul nadat het proton is afgestaan.

Stappenplan

1. links van de pijl schrijf je de reactanten op. In dit geval dus het zuur (HA) en water.



2. rechts van de pijl schrijf je de producten op.

a. je weet dat het zuur een H^+ afstaat, dus is het product van het zuur dezelfde structuurformule, maar dan het een H minder:



b. omdat er alleen een proton wordt afgestaan, en geen elektron, heeft de H een lading van +1. Dat betekent dat er een elektron achterblijft bij het molecuul, dus verandert de lading van het zuur met -1. Als het molecuul al een lading had, trek je daar 1 vanaf:

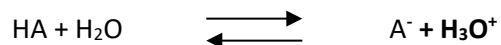


c. Het watermolecuul neemt de proton op die afgestaan wordt, dus ontstaat er als product H_3O^+ . Omdat de H^+ een positieve lading heeft, is H_3O^+ dus ook positief geladen!

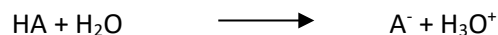


3. Nu moeten we nog bepalen of er een **enkele** of een **dubbele pijl** moet komen te staan. Als we te maken hebben met de dissociatie van **een zwak zuur**, dan moet er een dubbele pijl komen te staan. Dat betekent dus dat een deel van de zuur moleculen een H^+ afstaat, maar een deel ook niet. Van de zuurmoleculen die een H^+ afstaan, neemt een deel ook weer een H^+ op (de reactie verloopt dus ook een beetje de andere kant op). Omdat er continu moleculen zijn die een H^+ opnemen en moleculen zijn die een H^+ afstaan, ontstaat er een **evenwicht**.

Dus de reactievergelijking voor de dissociatie van een **zwak zuur** schrijven we als volgt:



Als we te maken hebben met een **sterk zuur**, dan zijn er verwaarloosbaar weinig moleculen die weer een H^+ opnemen. We schrijven de reactie dan maar met een **enkele pijl**. De reactievergelijking voor de dissociatie van een **sterk zuur** schrijven we als volgt:



Voorbeeld 1: een zwak zuur

Geef de reactievergelijking voor de dissociatie op van het zwakke zuur azijnzuur (CH_3COOH) in water:

1. de reactanten: $\text{CH}_3\text{COOH} + \text{H}_2\text{O}$
2. de producten CH_3COOH wordt CH_3COO^- (een H minder en de lading ook 1 minder)
 H_2O wordt H_3O^+ (een H meer en de lading ook 1 meer)
3. er staat dat azijnzuur een zwak zuur is, dus moet er een dubbele pijl komen te staan:



Voorbeeld 2: een sterk zuur

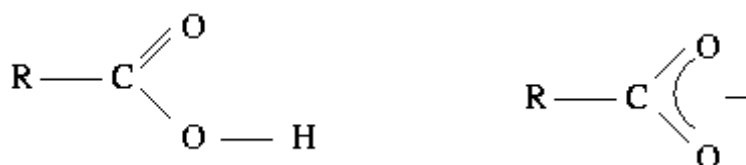
Zoutzuur is een veelgebruikt sterk zuur (HCl). Zoutzuur is een zout dat in water direct volledig uit elkaar valt in H^+ en Cl^- . Je lost dus eigenlijk gewoon H^+ op in water. Het H^+ zal gelijk met een watermolecuul binden tot H_3O^+ .

Dus de reactievergelijking van de dissociatie van zoutzuur in water:



Let er op dat deze reactie dus met **een enkele pijl** geschreven is.

Een veel voorkomende zure groep, die in veel verschillende moleculen voorkomt is COOH , oftewel carbonzuur (zie figuur 16). Deze carbonzurgroep zit bijvoorbeeld in moleculen zoals azijnzuur, melkzuur, mierenzuur, maar ook bijvoorbeeld vetzuren hebben een carbonzurgroep. De H aan de O kan worden afgestaan.



Figuur 15, structuur van een carbonzuur. R is een restgroep. Links zie je de ongedissocieerde carbonzuur (RCOOH) en rechts het carbonzuur na dissociatie (RCOO^-).

Oefeningen

- Leg uit wat een zuur is.
 - Wat is het verschil tussen een zwak zuur en een sterk zuur?
- Geef de reactievergelijking van de dissociatie van het zwakke zuur paracetamol ($\text{C}_8\text{H}_9\text{NO}_2$) in water.
- Geef de reactievergelijking van de dissociatie van het sterke zuur waterstofjodide (HI) in water.

19. Basen

Basen zijn stoffen die een **proton (H^+) op kunnen nemen**, bijvoorbeeld van water. Net als bij zuren, maken we onderscheid tussen **sterke basen**, waarvan alle moleculen in water direct een H^+ opnemen, en **zwakke basen**, waarvan slechts een deel van de moleculen een H^+ opnemen. Bij zwakke basen is er net als bij zwakke zuren sprake van een evenwichtsreactie. De bron van de protonen die opgenomen kunnen worden door de base kan water zijn of een zuur. Wanneer water de protonen levert zal er een **hydroxide** (OH^-) ion ontstaan (H_2O min een H^+). Wanneer het proton afkomstig is van een ander zuur, dan is er sprake van een **zuur-base reactie**. In de uitleg staat B voor base (B = base). B is de base en BH^+ is een base die een H^+ op heeft genomen.



Figuur 16. De Lewisstructuren van water (H_2O) en het hydroxide ion (OH^-).

Stappenplan: het opstellen van een reactievergelijking voor reactie van een base met water

Wanneer je de **reactievergelijking** op moet stellen van de **reactie van een base met water**, dan volg je dezelfde stappen als bij het opstellen van een reactievergelijking voor een zuur.

1. links van de pijl schrijf je de reactanten op, in dit geval de base (B) en water.



2. rechts van de pijl schrijf je de producten op.

a. je weet dat de base een H^+ opneemt, dus is het product de base met een extra H:



b. omdat er alleen een proton wordt opgenomen en geen elektron, heeft de H een lading van +1. Dat betekent dus dat de lading van de base positief wordt:

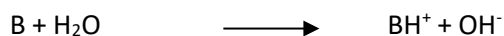


c. het watermolecuul staat een proton af, dus verliest 1 H en krijgt een negatieve lading, oftewel wordt OH^- :

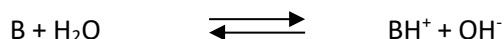


3. Net als bij zuren geldt dat er bij sterke basen een enkele pijl wordt gebruikt, omdat een verwaarloosbaar klein deel van de moleculen weer een proton zal afstaan. Bij zwakke basen is er sprake van een evenwichtssituatie, dus gebruik je een dubbele pijl.

Dus bij de reactievergelijking van een **sterke base** met water schrijven we:



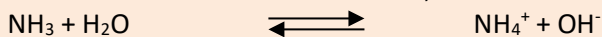
Wanneer we te maken hebben met een **zwakke base** met water schrijven we:



Voorbeeld 1: een zwakke base

Geef de reactievergelijking voor de reactie van de zwakke base ammonia (NH_3) met water:

1. de reactanten: $\text{NH}_3 + \text{H}_2\text{O}$
2. de producten NH_3 wordt NH_4^+ (een H meer en de lading ook 1 meer)
 H_2O wordt OH^- (een H minder en de lading ook 1 minder)
3. er staat dat ammonia een zwakke base is, dus moet er een dubbele pijl komen te staan, dus:



Voorbeeld 2: een sterke base

Geef de reactievergelijking van de dissociatie van de sterke base natronloog.

Natronloog is een sterke base (NaOH). Wanneer natronloog toegevoegd wordt aan water, valt het direct uiteen in Na^+ en OH^- . Je voegt dus eigenlijk gewoon 'pure' OH^- toe aan water, alleen is het als vaste stof een zout samen met natrium.

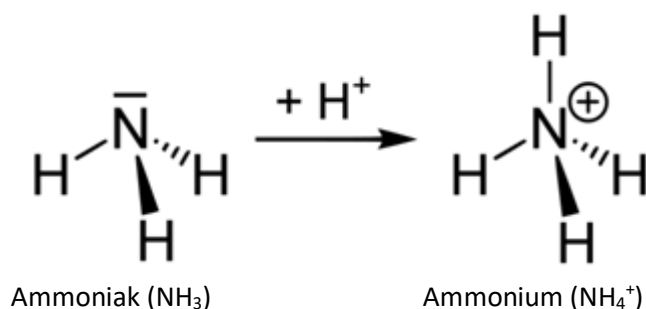
1. De reactant: NaOH
2. De producten Natronloog valt uiteen in Na^+ OH^- .

Bij sommige basen heb je dus geen water nodig om OH^- te krijgen, het OH^- komt van de base zelf. Het kan duidelijker zijn om aan te geven dat het hier gaat om het oplossen van natronloog door bij de ionen te zetten dat ze opgelost zijn, dus met (aq) erachter.

3. Natronloog is een sterke base, dus zal er een enkele pijl in de reactievergelijking komen te staan, dus:



Veel voorkomende basische stoffen in de natuur bevatten vaak een stikstofatoom. Een stikstofatoom heeft normaal gesproken drie bindingen, maar er kan ook een vierde binding ontstaan. Op deze wijze kan een stikstofatoom een binding aangaan met een proton (H^+). Dit gebeurt bijvoorbeeld bij de omzetting van ammoniak in ammonium (zie figuur 18). Een stikstofatoom met 4 bindingen is positief geladen.



Figuur 17, omzetting van ammoniak in ammonium, waarbij er een vierde binding aangegaan wordt door het stikstofatoom.

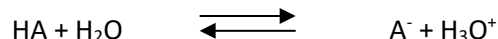
Oefeningen

- a. Wat is een base?**
 - b. Wat is het verschil tussen een sterke en een zwakke base?**
- Geef de reactievergelijking van de reactie van de zwakke base pyridine ($\text{C}_5\text{H}_5\text{N}$) met water.
- Zowel natronloog als kaliloog korrels kunnen worden gebruikt als gootsteenontstopper. Geef de reactievergelijking van de reactie van de sterke base kaliloog (KOH) met water.
- Geef de reactievergelijking voor de verbranding van sucrose ($\text{C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_{11}$).
- Geef de reactievergelijking van de dissociatie van het zwakke zuur aspirine ($\text{C}_9\text{H}_8\text{O}_4$) in water.
- Geef de reactievergelijking van de reactie van de zwakke base nicotine ($\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2$) met water.**

20. Zuurconstanten

Voor evenwichtsreacties geldt een evenwichtsvoorwaarde. De evenwichtsvoorwaarde geeft aan hoeveel producten er ten opzichte van de reactanten gevormd worden. Dit zegt dus iets over de **ligging** van het evenwicht.

Evenwichten zijn van groot belang voor de dissociatie van **zwakke** zuren, omdat dit evenwichtsreacties zijn:



Net als bij andere evenwichtsreacties kan er een evenwichtsvoorwaarde opgesteld worden. K is hierbij de **evenwichtsconstante**. De evenwichtsconstante is afhankelijk van de temperatuur, dus als de temperatuur verandert, verandert de evenwichtsconstante ook. Het toevoegen van meer zuur of base verandert de **evenwichtsconstante niet!**

Voor zwakke zuren kun je de algemene evenwichtsvoorwaarde opstellen:

$$\text{HA} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{A}^- + \text{H}_3\text{O}^+$$
$$K_a = \frac{[\text{A}^-] \times [\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{HA}] \times [\text{H}_2\text{O}]}$$

De evenwichtsconstante bij de dissociatie van een zuur noemen we de **zuurconstante K_a** . Omdat bij deze reacties het water het oplosmiddel is en in zeer hoge concentraties aanwezig is, nemen we water in deze evenwichtsvoorwaarden nooit mee. Dus:

$$K_a = \frac{[\text{A}^-] \times [\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{HA}] \times \{\text{H}_2\text{O}\}} = \frac{[\text{A}^-] \times [\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{HA}]}$$

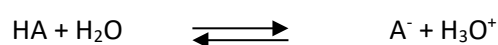
De **zuurconstante** geeft informatie over de sterkte van het zuur. Hoe sterker een zuur is, des te meer moleculen een proton af zullen staan, en dus des te meer product er zal zijn ten opzichte van de reactanten. Dat betekent dat **hoe sterker een zuur is, des te groter zal de K_a zijn**, omdat in de breuk de teller dan dus groter zal zijn ten opzichte van de noemer. Hoe zwakker een zuur, des te minder producten er gevormd zullen worden, en dus des te kleiner de K_a zal zijn.

Bij **sterke zuren** is er geen sprake van een evenwichtssituatie. De hoeveelheid reactant die in een oplossing van een sterk zuur aanwezig is, is verwaarloosbaar klein. De K_a die je zou berekenen, zou daardoor oneindig groot worden (de noemer van de breuk is immers verwaarloosbaar klein ten opzichte van de teller). Voor een sterk zuur wordt de K_a dan ook vaak aangegeven als $K_a \gg 1$ (oftewel K_a is vele malen groter dan 1) en deze is niet te exact te berekenen.

De zuurconstante is een **stofeigenschap** en zegt iets over het gedrag van een zuur (hoe 'graag' het zuur een proton afstaat). Elk zwak zuur heeft zijn eigen zuurconstante, die aangeeft hoe zwak het zwakke zuur is. Wanneer je **zuur** (HA) of **de geconjugeerde base** (A^-) toevoegt aan een evenwichtssituatie, zou de evenwichtsvoorwaarde niet meer kloppen. Volgens het principe van LeChatelier zal het evenwicht dan als reactie op zo'n verandering gaan verschuiven, totdat de evenwichtsvoorwaarde weer klopt.

Stappenplan

1. Om de evenwichtsvoorwaarde op te stellen moet je eerst de reactievergelijking opstellen:



2. De evenwichtsvoorwaarde bestaat uit evenwichtsconstante K. Omdat er hier sprake is van een dissociatie van een zuur is de constante de zuurconstante (K_a):

$$K_a =$$

3. Om de evenwichtsvoorwaarde op te stellen vermenigvuldig je de concentraties van de producten. Wanneer stoffen in een andere verhouding dan 1:1 met elkaar reageren worden deze verhoudingen als exponenten weergegeven zoals op de vorige pagina voorgedaan. Dit is de teller van de evenwichtsvoorwaarde. Dit is de teller van de breuk:

$$K_a = [A^-] * [H_3O^+]$$

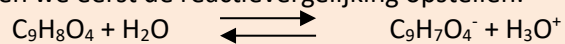
4. Vervolgens schrijf je het product van de concentraties van de reactanten in de noemer van de breuk. Denk ook hierbij om de molverhoudingen van de reactanten. Water nemen we bij zuren en basen niet mee in de reactievergelijking:

$$K_a = \frac{[A^-] * [H_3O^+]}{[HA]}$$

Voorbeeld

Stel de evenwichtsvoorwaarde op voor de dissociatie van het zwakke zuur aspirine ($C_9H_8O_4$)

Hiervoor moeten we eerst de reactievergelijking opstellen:



Vervolgens kunnen we de evenwichtsvoorwaarde opstellen:

$$K_a = \frac{[C_9H_7O_4^-][H_3O^+]}{[C_9H_8O_4]}$$

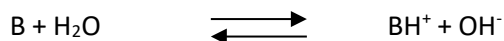
Oefeningen

1. Stel de evenwichtsvoorwaarde op voor de dissociatie van het zwakke zuur azijnzuur (CH_3COOH) in water.
2. Stel de evenwichtsvoorwaarde op voor de dissociatie van het zwakke zuur paracetamol ($\text{C}_8\text{H}_9\text{NO}_2$) in water.
3. a. Stel de evenwichtsvoorwaarde op voor de dissociatie van het sterke zuur zoutzuur (HCl) in water.
b. Wat voor waarde zal de zuurconstante hebben van HCl ?
4. **Paracetamol heeft een zuurconstante van $1,2 \times 10^{-10}$ en aspirine heeft een zuurconstante van $3,3 \times 10^{-4}$. Welke van deze twee is een sterker zuur?**

21. Baseconstanten

Voor zwakke basen is er net als bij zwakke zuren sprake van een evenwichtssituatie en kan er dus een evenwichtsvoorwaarde worden opgesteld. Hierbij wordt water wederom niet meegenomen in de evenwichtsvoorwaarde. De evenwichtsconstante van de reactie van een zwakke base met water wordt de **baseconstante (Kb)** genoemd.

De standaard evenwichtsvoorwaarde voor zwakke basen is als volgt:



De evenwichtsvoorwaarde:

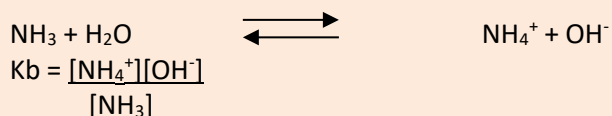
$$K_b = \frac{[BH^+][OH^-]}{[B]}$$

Net als bij zwakke zuren geldt voor zwakke basen: hoe hoger de Kb des te sterker de base. De Kb van sterke basen is net als de Ka van sterke zuren zeer groot en wordt doorgaans aangeduid als $K_b \gg 1$.

Voorbeeld

Stel de evenwichtsvoorwaarde op voor de reactie van de zwakke base ammonia met water.

Hiervoor moet eerst weer de reactievergelijking opgesteld worden:

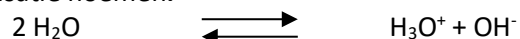


Oefeningen

1. Stel de evenwichtsvoorwaarde op van de reactie van de zwakke base pyridine (C_5H_5N) met water.
2. Stel de evenwichtsvoorwaarde op van de reactie van de zwakke base ethylamine (CH_3NH_2) met water.
3. a. Stel de evenwichtsvoorwaarde op van de reactie van de sterke base NaOH met water.
b. Wat voor waarde zal de baseconstante van NaOH zijn?
4. Pyridine heeft een K_b van $1,7 \cdot 10^{-9}$ en ethylamine heeft een K_b van $5,6 \cdot 10^{-4}$. Welke van de twee basen is sterker?

22. De waterconstante

Water is een bijzonder molecuul. Het is een amfiprotisch molecuul, wat betekent dat het zowel als zuur als base kan optreden. Bovendien kan het met zichzelf reageren tot H_3O^+ en OH^- in een reactie die we zelf-ionisatie noemen:



Deze reactie is een evenwichtsreactie, waarvoor je ook een evenwichtsvoorwaarde op kunt stellen. Net als bij de zuur en basereacties nemen we water niet mee in de evenwichtsvoorwaarde.

$$K_w = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+][\text{OH}^-]}{[\text{H}_2\text{O}]^2} = [\text{H}_3\text{O}^+][\text{OH}^-]$$

De constante van de zelf-ionisatie van water noemen we de **waterconstante (K_w)** en deze is **altijd** 10^{-14} . Dat betekent dat in elke oplossing in evenwicht, de concentratie H_3O^+ vermenigvuldigd met de concentratie OH^- 10^{-14} zal zijn:

$$10^{-14} = [\text{H}_3\text{O}^+][\text{OH}^-]$$

In water dat neutraal is, is evenveel zuur als base aanwezig. Aan de hand van de waterconstante kun je dan berekenen dat:

$$[\text{H}_3\text{O}^+] = [\text{OH}^-] = \sqrt{10^{-14}} = 10^{-7} \text{ M}$$

In een neutrale oplossing is de concentratie dus H_3O^+ gelijk aan de concentratie OH^- en die is dus 10^{-7} M. Dus in een **neutrale oplossing** is de concentratie H_3O^+ **altijd** 10^{-7} M en is de concentratie OH^- ook **altijd** 10^{-7} M.

Je kunt de concentratie OH^- dus altijd berekenen wanneer je de concentratie H_3O^+ weet, want

$$\begin{aligned} K_w &= [\text{H}_3\text{O}^+][\text{OH}^-] && \text{(delen door } [\text{H}_3\text{O}^+]) \\ \frac{K_w}{[\text{H}_3\text{O}^+]} &= [\text{OH}^-] \end{aligned}$$

En andersom kun je de concentratie H_3O^+ altijd berekenen wanneer je de concentratie OH^- weet, want

$$\begin{aligned} K_w &= [\text{H}_3\text{O}^+][\text{OH}^-] && \text{(delen door } [\text{OH}^-]) \\ \frac{K_w}{[\text{OH}^-]} &= [\text{H}_3\text{O}^+] \end{aligned}$$

Voorbeeld

Een oplossing heeft een concentratie H_3O^+ van $5 \cdot 10^{-3} \text{ M}$. Wat is de concentratie OH^- ?

$$[\text{OH}^-] = \frac{K_w}{[\text{H}_3\text{O}^+]} = \frac{10^{-14}}{5 \cdot 10^{-3}} = 2 \cdot 10^{-12} \text{ M}$$

Denk hierbij om de eenheid!

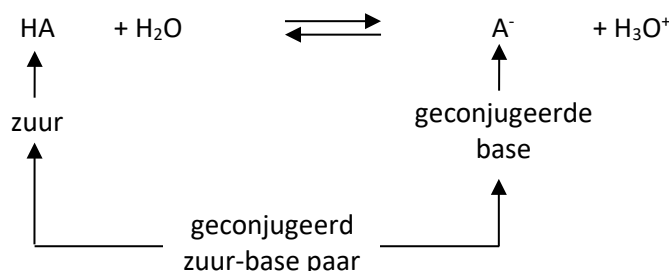
Oefening

1. Een oplossing heeft een concentratie H_3O^+ van $7,9 \cdot 10^{-5} \text{ M}$.
 - a. Wat is de concentratie OH^- in deze oplossing?
 - b. Is deze oplossing zuur of basisch? (zit er meer H_3O^+ of meer OH^- in deze oplossing)?
2. Een oplossing heeft een concentratie OH^- van $10^{-4,5} \text{ M}$.
 - a. wat is de concentratie H_3O^+ in deze oplossing?
 - b. Is deze oplossing zuur of basisch?
3. Een oplossing heeft een concentratie H_3O^+ van $3,7 \cdot 10^{-12} \text{ M}$.
 - a. wat is de concentratie OH^- in deze oplossing?
 - b. Is deze oplossing zuur of basisch?

23. Zuur-base paren

Zoals hierboven is beschreven, is een zuur een stof die een proton af kan staan en is een base een stof die een proton op kan nemen.

Nadat een zuur een proton heeft afgestaan, ontstaat de **geconjugeerde base** van dat zuur. Deze geconjugeerde base kan weer een proton opnemen, waardoor weer het zuur ontstaat. In een evenwichtsreactie gebeuren beide reacties (de dissociatie van het zwakke zuur en de opname van een proton door de geconjugeerde base). We noemen het zuur en zijn geconjugeerde base een **geconjugerd zuur-base paar**.



Wanneer je een geconjugeerde base (bijvoorbeeld als zout met natrium of kalium) oplost in water zal de geconjugeerde base zich ook als base gedragen.

Voorbeeld

Azijnzuur (CH_3COOH) is een zwak zuur:

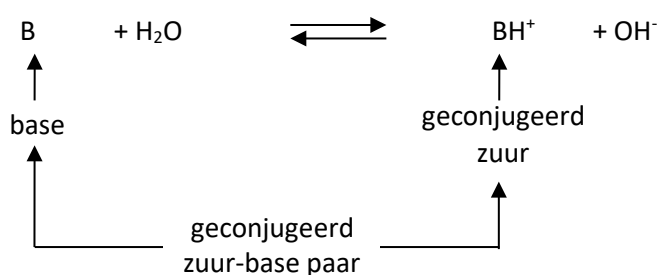


De geconjugeerde base van azijnzuur is acetaat (CH_3COO^-). Acetaat is verkrijgbaar als zout: natriumacetaat ($NaCH_3COO$). Wanneer je dit zout oplost in water, valt het direct uit elkaar in ionen: Na^+ en CH_3COO^- . Het CH_3COO^- kan vervolgens als base reageren met water:



Wanneer je azijnzuur (een zwak zuur) oplost in water, zal de oplossing **zuur** worden, omdat een deel van het azijnzuur dissocieert. Hierbij ontstaat H_3O^+ , waardoor de oplossing zuur wordt. Wanneer je natriumacetaat (een geconjugeerde base) oplost in water, zal de oplossing **basisch** worden, omdat het acetaat als base reageert en een proton op kan nemen van water. Hierdoor ontstaat OH^- .

Het omgekeerde geldt voor **zwakke basen**. Wanneer een zwakke base een proton opneemt, ontstaat het **geconjugeerde zuur** van deze base. Dit geconjugeerde zuur kan weer dissociëren in water, waarbij het proton weer vrij komt. Ook een zwakke base en zijn geconjugeerde zuur noemen we een **geconjugerd zuur-base paar**.



Voorbeeld

Ammonia (NH_3) is een zwakke base:



Ammoniak is het geconjugeerde zuur van ammonia. De reactievergelijking van de dissociatie van het geconjugeerde zuur ammoniak in water:



De sterkte van geconjugeerd zuur-base paren

Voor geconjugeerd zuur-baseparen geldt dat **hoe zwakker het zuur, des te sterker zijn geconjugeerde base** (zie figuur 19). Wanneer een zuur erg zwak is, betekent dat dat de binding met het proton vrij sterk is en dus niet snel verbroken zal worden. Er zal dus relatief veel niet-gedissocieerd zuur aanwezig zijn en relatief weinig van de geconjugeerde base. De zuurconstante is dan ook een klein getal.

Wanneer je de geconjugeerde base in oplost, zal deze relatief veel binden met protonen, en ontstaat dus veel van het geconjugeerde zuur. De baseconstante van deze reactie zal dan ook een groot getal zijn.

Sterke basen hebben een zeer zwak geconjugeerd zuur. De hoeveelheid geconjugeerd zuur die dissocieert is **verwaarloosbaar klein**. **Sterke zuren** hebben een zeer zwakke geconjugeerde base. De hoeveelheid van de geconjugeerde base die een proton opneemt, is **verwaarloosbaar klein**.

	ACID	BASE	
Strong	HCl	Cl^-	Negligible
	H_2SO_4	HSO_4^-	
	HNO_3	NO_3^-	
	H_3O^+	H_2O	
	HSO_4^-	SO_4^{2-}	
Weak	H_2SO_3	HSO_3^-	Weak
	H_3PO_4	H_2PO_4^-	
	HF	F^-	
	CH_3COOH	CH_3COO^-	
	H_2CO_3	HCO_3^-	
	H_2S	HS^-	
	HSO_3^-	SO_3^{2-}	
	H_2PO_4^-	HPO_4^{2-}	
	NH_4^+	NH_3	
	HCN	CN^-	
Negligible	HCO_3^-	CO_3^{2-}	Strong
	HPO_4^{2-}	PO_4^{3-}	
	H_2O	OH^-	
	HS^-	S^{2-}	
	OH^-	O^{2-}	

Figuur 18. Overzicht van zuren en hun geconjugeerde basen. Hierin is te zien dat hoe sterker het zuur, hoe zwakker de geconjugeerde base, en andersom.

Oefeningen

1. Nicotine ($C_{10}H_{14}N_2$) is een zwakke base. Het geconjugeerde zuur van nicotine is nicotinezuur.

- Geef de reactievergelijking van de reactie van nicotine met water
- Geef de reactievergelijking van de reactie van nicotinezuur met water.
- Wanneer je nicotine oplost in water, zal de oplossing dan zuur of basisch worden?

2. Aspirine ($C_9H_8O_4$) is een zwak zuur.

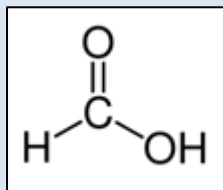
- Geef de reactievergelijking van aspirine met water.
- Wat is de structuurformule van het geconjugeerde zuur van aspirine?
- Geef de reactievergelijking van de geconjugeerde base van aspirine met water.
- Als je aspirine oplost in water, zal de oplossing dan zuur of basisch worden?

3. Salmiak (NH_4Cl) is een zout van ammoniak en chloride. Ammoniak is een zwak zuur.

- Geef de reactievergelijking van de reactie van salmiak met water.
- Is een oplossing met salmiak in water zuur of basisch?
Salmiak (een vaste stof) wordt gemaakt door het gas ammonia (NH_3) door de vloeistof zoutzuur (HCl) te leiden. Een fabriek wil een ton salmiak maken voor de productie van snoepgoed.
- Geef de reactievergelijking voor de vorming van salmiak (ga uit van een volledig verlopende reactie)
- Hoeveel mol zoutzuur en ammonia heb je nodig voor deze reactie?
- Hoeveel m^3 zoutzuur (zoutzuur heeft een dichtheid van 1,490 gram/l) heb je hiervoor nodig?
- Hoeveel liter ammonia heb je nodig, wanneer de reactie plaats vindt bij 15 °C? Ga er vanuit dat het volume van 1 mol gas bij STP (1,0 atm en 273 K) 22,4 liter is.

4a. Geef de reactievergelijking van de dissociatie van het zwakke zuur mierenzuur in water (zie structuurformule).

- Wat is de geconjugeerde base van mierenzuur?
- Geef de reactievergelijking voor de reactie van deze geconjugeerde base met water
- Geef de evenwichtsvoorwaarde voor de reactievergelijking van c. Is de evenwichtsconstante hier een zuur- of een baseconstante?



5a. Geef de reactievergelijking van de reactie van de zwakke base cafeïne ($C_8H_{10}N_4O_2$) met water

- Wat is het geconjugeerde zuur van cafeïne?
- Geef de reactievergelijking voor de reactie van dit geconjugeerde zuur met water.
- Geef de evenwichtsvoorwaarde voor de reactievergelijking van c. Is de evenwichtsconstante hier een zuur- of een baseconstante?

24. Het omrekenen van de K_a naar de K_b

Zoals eerder beschreven, zegt de K_a iets over de sterkte van een zuur (hoe sterker het zuur, des te hoger de K_a) en zegt de K_b iets over de sterkte van een base (hoe sterker een base, des te hoger de K_b).

Hierboven is al uitgelegd dat wanneer een zwak zuur een **vrij sterk zuur** is (maar nog wel een zwak zuur) dan is de geconjugeerde base een **erg zwakke base**. En als een zuur een erg **zwak zuur** is, dan is de geconjugeerde base een vrij **sterke base**. Dat betekent dus ook dat hoe kleiner de K_a van een zuur is, des te groter de K_b van de geconjugeerde base. En hoe kleiner de K_b van een base, des te groter de K_a van het geconjugeerde zuur. De K_a van een zuur en de K_b van de geconjugeerde base zijn dus **omgekeerd evenredig** met elkaar.

Wanneer je de K_a van het zuur vermenigvuldigt met de K_b van de geconjugeerde base, is het product **altijd de waterconstante (10^{-14})**:

$$K_a \times K_b = K_w$$

Wanneer je de K_a van een zuur weet, dan kun je dus de K_b van de geconjugeerde base uitrekenen:

$$\begin{aligned} K_a \times K_b &= K_w && \text{(delen door } K_b) \\ K_a &= \frac{K_w}{K_b} \end{aligned}$$

Wanneer de K_b van een base weet, dan kun je dus ook de K_a van het geconjugeerde zuur uitrekenen:

$$\begin{aligned} K_a \times K_b &= K_w && \text{(delen door } K_a) \\ K_b &= \frac{K_w}{K_a} \end{aligned}$$

Een voorbeeld

Aziijnzuur (CH_3COOH) is een zwak zuur met een K_a van $5,8 \cdot 10^{-5}$. Bereken de K_b van de geconjugeerde base van aziijnzuur (=acetaat).

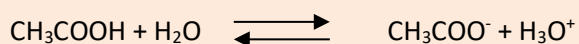
Acetaat is de geconjugeerde base van aziijnzuur. Dat betekent dat K_a van aziijnzuur vermenigvuldigd met de K_b van acetaat gelijk is aan 10^{-14} :

$$\begin{aligned} K_a \times K_b &= K_w && \text{(delen door } K_a) \\ K_b &= K_w / K_a \end{aligned}$$

Nu kunnen we de formule invullen: $K_b = 10^{-14} / 5,8 \cdot 10^{-5} = 1,724 \dots 10^{-10} = 1,7 \cdot 10^{-10}$

Wat betekent dit nu?

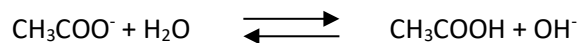
De reactievergelijking van de dissociatie van aziijnzuur in water:



De evenwichtsvoorwaarde die hierbij hoort:

$$K_a = \frac{[\text{CH}_3\text{COO}^-][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{CH}_3\text{COOH}]} = 5,8 \cdot 10^{-5}$$

Maar als je acetaat (een zwakke base) op zou lossen in water, dan gebeurt er het volgende:



De evenwichtsvoorwaarde die bij deze reactie hoort:

$$K_b = \frac{[\text{CH}_3\text{COOH}][\text{OH}^-]}{[\text{CH}_3\text{COO}^-]} = 1,7 \cdot 10^{-10}$$

Oefeningen

Melkzuur ($\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_3$) is een zwak zuur met een K_a van $1,4 \cdot 10^{-4}$.

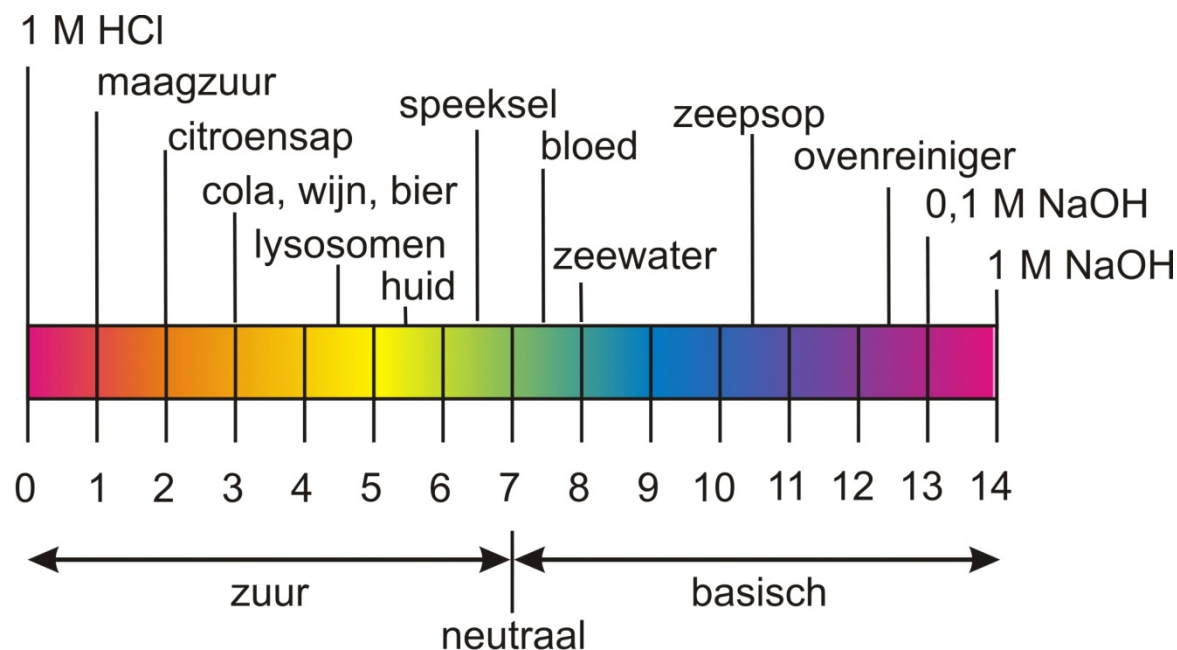
- 1
 - a. Geef de reactievergelijking van de dissociatie van melkzuur in water
 - b. Wat is de geconjugeerde base van melkzuur?
 - c. Wat is de K_b van deze geconjugeerde base?
 - d. Geef de reactievergelijking en de evenwichtsvoorwaarde die hoort bij deze K_b

Nicotine ($\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2$) is een zwakke base met een K_b van $1,05 \cdot 10^{-6}$.

- 2
 - a. Geef de reactievergelijking van de reactie van nicotine met water
 - b. Wat is het geconjugeerde zuur van nicotine?
 - c. Wat is de K_a van dit geconjugeerde zuur?
 - d. Geef de reactievergelijking en de evenwichtsvoorwaarde die hoort bij deze K_a

25. Rekenen met pH en pOH

De zuurgraad van een oplossing wordt bepaald door de concentratie H_3O^+ . Hoe meer H_3O^+ in een oplossing, des te zuurder de oplossing. Omgekeerd wordt de 'basischheid' van een oplossing bepaald door de concentratie OH^- ionen. Zoals in het hoofdstuk over de waterconstante besproken, is het product van de concentratie H_3O^+ en OH^- altijd 10^{-14} . Dat betekent dat als er meer H_3O^+ in een oplossing zit, er minder OH^- in de oplossing aanwezig zal zijn.



Figuur 19. pH schaal en indicaties van de zuurgraad van een aantal stoffen.

Bij het rekenen met zuren en basen wordt veel gebruik gemaakt van p-waarden. Een p-waarde is de – log waarde van iets. Als indicatie voor de zuurheid van een oplossing wordt de **pH** gebruikt. De pH is de – **log waarde** van de concentratie H_3O^+ . **Voor het berekenen van de pH neem je dus de – logwaarde van de $[\text{H}_3\text{O}^+]$ en niet van de K_a !!!**

De pH heeft een logaritmische schaal. Dat betekent dat elke pH-eenheid een factor 10 verschil inhoudt. Een verschil van 2 pH eenheden betekent een verschil van 100x in zuurgraad, 3 pH eenheden een verschil van 1000x. Een oplossing met een pH van 3 bevat 10x meer H_3O^+ dan een oplossing met een pH van 4. Dit is bijvoorbeeld te zien voor natronloog in dit figuur.

$$\text{pH} = -\log [\text{H}_3\text{O}^+]$$

De eenheid van $[\text{H}_3\text{O}^+]$ moet hiervoor wel altijd in molair (M) zijn. Is dit nog niet het geval, dan moet deze eerst omgerekend worden naar molair voordat je de pH kunt berekenen.

Omgekeerd kun je van de pH terugrekenen naar de concentratie H_3O^+ :

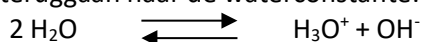
$$[\text{H}_3\text{O}^+] = 10^{-\text{pH}}$$

Hoe **hoger** de concentratie H_3O^+ , des te **lager** de pH. En des te hoger de concentratie OH^- , des te **lager** de concentratie H_3O^+ en dus des te **hoger** de pH.

Als indicatie voor de basischheid van een oplossing kan de **pOH** gebruikt worden. De pOH is de **– log waarde** van de **concentratie OH⁻**:

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

Als we teruggaan naar de waterconstante:



$$K_w = [\text{H}_3\text{O}^+][\text{OH}^-]$$

We kunnen deze formule in zijn geheel omzetten in **p-waarden**. Hiervoor zetten we alle waarden om in -log waarden. Wanneer je ‘gewone getallen’ normaal met elkaar vermenigvuldigt, tel je ze als log-waarden bij elkaar op. Wanneer we bovenstaande formule dus omzetten in log-waarden moeten we pH en pOH **bij elkaar optellen** en niet met elkaar vermenigvuldigen:

$$\text{p}K_w = \text{pH} + \text{pOH}$$

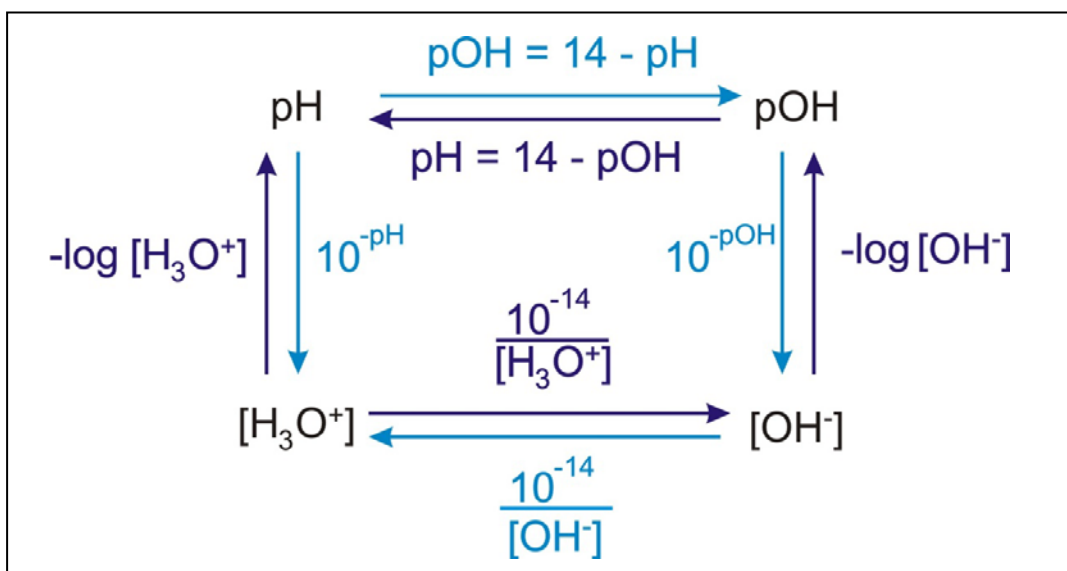
De $\text{p}K_w$ is de –log waarde van de waterconstante, dus:

$$-\log K_w = -\log 10^{-14} = 14$$

Oftewel: $14 = \text{pH} + \text{pOH}$

Dus de pH en de pOH van een oplossing zijn opgeteld **altijd 14**. Je kunt de één dus heel gemakkelijk omrekenen naar de ander:

$$\text{pH} = 14 - \text{pOH} \quad \text{en} \quad \text{pOH} = 14 - \text{pH}$$



Figuur 20. Een overzicht hoe je om kunt rekenen tussen de concentraties H_3O^+ en OH^- , de pH en de pOH.

pKa en pKb waarden

Ook van de zuurconstante en baseconstante worden soms p-waarden gebruikt (de pKa en de pKb). Verwar de pKa (-log Ka) niet met de pH (-log [H₃O⁺])! Bij de buffers zal duidelijk worden waarom de pKa en pKb soms handig zijn om te gebruiken.

Een voorbeeld

Een oplossing heeft een concentratie H₃O⁺ van 3,16 10⁻⁵ M. Bereken de concentratie OH⁻, de pH en de pOH.

Omrekenen van de [H₃O⁺] naar de [OH⁻] kan met behulp van de waterconstante:

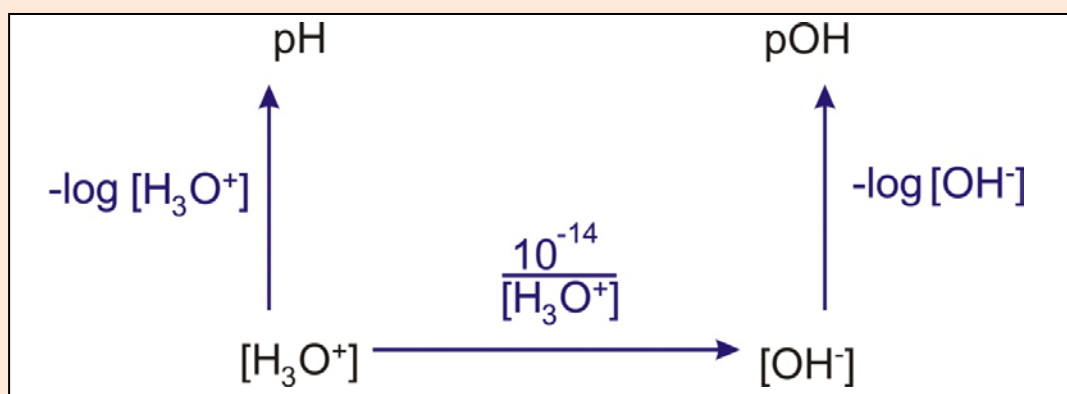
$$K_w = [\text{H}_3\text{O}^+][\text{OH}^-] \quad (\text{delen door } [\text{H}_3\text{O}^+])$$

$$[\text{OH}^-] = \frac{K_w}{[\text{H}_3\text{O}^+]}$$

Invullen: $[\text{OH}^-] = 10^{-14} / 3,16 \cdot 10^{-5} = 3,16 \cdot 10^{-10} \text{ M}$

Het berekenen van de pH: $\text{pH} = -\log [\text{H}_3\text{O}^+] = -\log 3,16 \cdot 10^{-5} = 4,5$

Het berekenen van de pOH: $\text{pH} = -\log [\text{OH}^-] = -\log 3,16 \cdot 10^{-10} = 9,5$



Je kunt ook een andere route nemen:

Berekenen van de pH:

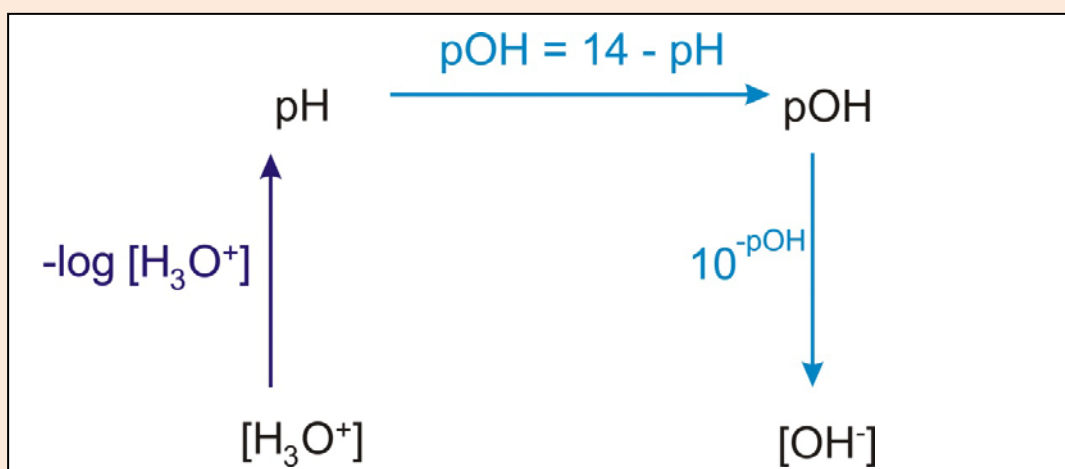
$$\text{pH} = -\log [\text{H}_3\text{O}^+]$$

Vervolgens de pOH berekenen uit de pH:

$$\text{pOH} = 14 - \text{pH} = 14 - 4,5 = 9,5$$

En vervolgens de [OH⁻] uitrekenen uit de pOH:

$$[\text{OH}^-] = 10 - \text{pOH} = 10^{-9,5} = 3,16 \cdot 10^{-10} \text{ M}$$



De pH-schaal wordt vaak weergegeven van 0 tot 14. Een pH lager dan 7 betekent dat de oplossing zuur is, een pH groter dan 8 betekent dat de oplossing basisch is. Wanneer de concentratie H_3O^+ heel hoog is, dan kan de pH ook negatief worden. En omgekeerd kan een oplossing ook een pH hebben die groter is dan 14. Deze oplossingen komen niet veel voor, maar het kan wel.

Voorbeeld

Wat is de pH van een oplossing met 4 M NaOH?

Natronloog is een sterke base, dus de concentratie OH^- is 4 M.

de concentratie H_3O^+ : $[\text{H}_3\text{O}^+] = 10^{-14} / [\text{OH}^-] = 10^{-14} / 4 = 2,5 \cdot 10^{-15}$

de pH: $\text{pH} = -\log [\text{H}_3\text{O}^+] = -\log 2,5 \cdot 10^{-15} = 14,6$

de pH van 4 M NaOH is dus groter dan 14.

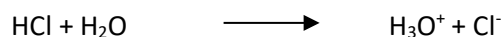
Oefeningen

- Bereken de pOH, $[\text{H}_3\text{O}^+]$ en $[\text{OH}^-]$ van een oplossing met een pH van 4,7.
 - Is deze oplossing zuur of basisch?
- Bereken de pH, pOH en $[\text{OH}^-]$ van een oplossing met een concentratie H_3O^+ van $3,8 \cdot 10^{-2}$ M.
 - Is deze oplossing zuur of basisch?
- Bereken de $[\text{H}_3\text{O}^+]$, $[\text{OH}^-]$ en pOH van een oplossing met een pH van 11,8.
 - Is deze oplossing zuur of basisch?
- Bereken de $[\text{H}_3\text{O}^+]$ van een oplossing met een pOH van 4,7.
 - Is deze oplossing zuur of basisch?
- Bereken de pOH van een oplossing met een concentratie H_3O^+ van $5,9 \cdot 10^{-3}$.
 - Is deze oplossing zuur of basisch?

26. Rekenen aan het oplossen van een sterk zuur of een sterke base in water

Wanneer je een sterk zuur oplost in water, dan dissocieert het zuur volledig. Als voorbeeld maken we een oplossing van 100 mM zoutzuur (HCl). De vraag is wat de pH van deze oplossing zal zijn.

De reactievergelijking van het oplossen van zoutzuur in water:



We hebben te maken met een **sterk zuur**, dus schrijven we de reactievergelijking met een **enkele pijl**. Al het zoutzuur dat je toevoegt zal dus omgezet worden in H_3O^+ en Cl^- . Voor de reactie plaats vindt, zal er 100 mM HCl zoutzuur aanwezig zijn en is de concentratie H_3O^+ 10^{-7} M (zie het hoofdstuk over de waterconstante, dit verwaarlozen we in deze situatie). Omdat al het HCl omgezet wordt in H_3O^+ in een verhouding van 1:1, zal er dus ook 100 mM H_3O^+ ontstaan:

	HCl	+ H ₂ O	→	H ₃ O ⁺	+ Cl ⁻
Voor	100 mM			~ 0 M	0 M
Na	0 M			100 mM	100 mM

In de situatie na afloop van de reactie verwaarlozen we de 10^{-7} M omdat deze verwaarloosbaar klein is bij de 100 mM die er ontstaat.

Om de pH uit te rekenen moet de $[\text{H}_3\text{O}^+]$ omgerekend worden van mM naar M:

$$[\text{H}_3\text{O}^+] \quad 100 \text{ mM} = 0,100 \text{ M} \quad (\text{delen door } 1000)$$

Nu we de concentratie H_3O^+ in **molair** weten, kunnen we de pH berekenen:

$$\text{pH} = -\log [\text{H}_3\text{O}^+] = -\log 0,100 = 1$$

Het oplossen van een **sterke base** gaat volgens hetzelfde principe als voor sterke zuren. Wanneer bijvoorbeeld 1 mol natronloog wordt opgelost in 1 liter water, dan zal de natronloog volledig dissociëren en ontstaat er dus 1 mol OH^- . De concentratie OH^- zal 1 molair zijn (je lost 1 mol op in 1 liter). Hieruit kan vervolgens de pOH, de $[\text{H}_3\text{O}^+]$ en de pH berekend worden volgens het schema uit de voorgaande paragraaf.

Oefeningen

- Geef de reactievergelijking voor de dissociatie van het sterke zuur zoutzuur (HCl) in water
 - Bereken de pH van een oplossing van 30 mM zoutzuur. Geef de situatie voor en na de reactie weer zoals in het voorbeeld.
- Geef de reactievergelijking van de dissociatie van de sterke base natronloog (NaOH) in water
 - Bereken de pOH van een oplossing van 4,0 M natronloog.
 - Bereken de pH van deze oplossing
 - Bereken de concentratie H_3O^+ in deze oplossing
- Je lost 5,0 gram van het sterke zuur waterstofjodide (HI) op in 500 ml water**

 - Bereken hoeveel mol waterstofjodide er zit in 5,0 gram van deze stof
 - Bereken de concentratie waterstofjodide wanneer je deze 5 gram oplost in 500 ml water
 - Geef de reactievergelijking van de dissociatie van waterstofjodide in water
 - Bereken de pH van deze oplossing

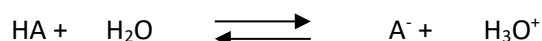
4. Je lost 25 gram gootsteenontstopper op in 750 mL water. De gootsteenontstopper die je gebruikt bestaat voor 95% uit natronloog (NaOH).
 - a. Bereken de concentratie NaOH van deze oplossing
 - b. Bereken de pH van deze oplossing
5. Je hebt een oplossing kaliloog (KOH) met een pH van 9,8
 - a. Bereken de concentratie OH^- van deze oplossing
 - b. Hoeveel gram kaliloog moet je afwegen om 2,5 liter van deze oplossing te maken?
6. Je hebt een oplossing zoutzuur met een pOH van 10,4. Hoeveel gram zoutzuur heb je nodig om 3,7 liter deze oplossing te maken?

27. Rekenen aan het oplossen van een zwak zuur of een zwakke base in water

Bij zwakke zuren en basen is er sprake van evenwichtsreacties. Hier kun je dus op dezelfde wijze mee rekenen als met andere evenwichtsreacties.

Wanneer je een zwak zuur in oplossing brengt zal het zuur voor een deel dissociëren, maar niet (zoals bij een sterk zuur) volledig. Waar je dus bij een sterk zuur kunt zeggen dat 1 mol zuur 1 mol H_3O^+ oplevert, kun je dat bij een zwak zuur niet zo stellen.

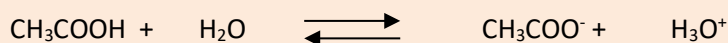
Wanneer een zwak zuur in water dissocieert ontstaat er een evenwicht, waarvoor een evenwichtsvoorwaarde geldt.



Voorbeeld

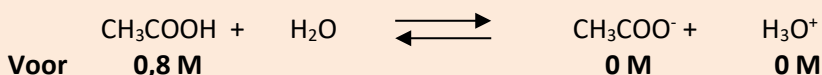
0,8 mol azijnzuur wordt opgelost in 1 liter water. Wat is de pH van deze oplossing? De K_a van azijnzuur is $1,8 \cdot 10^{-5}$.

1. Schrijf de reactievergelijking op.

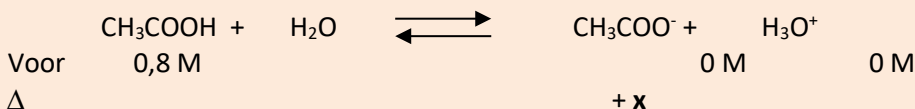


2. Bepaal de beginsituatie. Hoeveel heb je van elke stof? Je begint met 0,8 M azijnzuur (je lost immers 0,8 mol op in 1 liter). In de beginsituatie is er geen CH_3COO^- aanwezig, dus de concentratie daarvan is 0. In water is $1,0 \cdot 10^{-7}$ M water op. Dit verwaarlozen we.

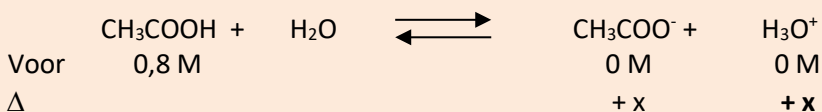
We maken een overzicht van de situatie:



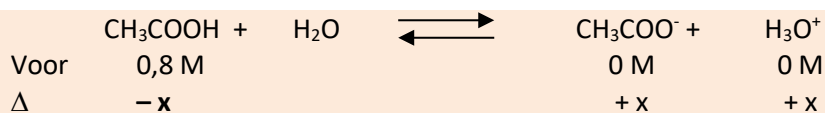
3. Vervolgens gaan we inventariseren wat er zal veranderen. Er is alleen CH_3COOH aanwezig en geen CH_3COO^- . Het evenwicht kan dus maar één kant opschuiven: naar rechts. Dat betekent dat er aan de rechterkant een aantal moleculen CH_3COO^- bij zal komen. We weten niet hoeveel moleculen, dus gaan we eerst uit van x aantal moleculen CH_3COO^- die zullen ontstaan.



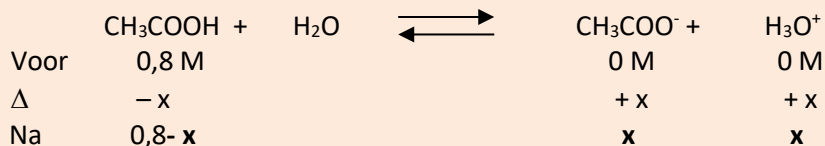
Voor elk molecuul azijnzuur dat dissocieert ontstaat 1 molecuul CH_3COO^- en 1 molecuul H_3O^+ . Dus wanneer er x moleculen acetaat (CH_3COO^-) ontstaat ook een x moleculen H_3O^+ . Wanneer we x weten, dan kunnen we dus de pH berekenen. Maar zover is het nog niet.



Wanneer er x moleculen CH_3COOH dissociëren, verdwijnen er x moleculen CH_3COOH . Dus de verandering van de hoeveelheid CH_3COOH is $-x$:



4. Nu kunnen we de 'eindconcentraties' ook berekenen:



5. Nu we deze concentraties weten, kunnen we deze invullen in de evenwichtsvoorwaarde. Hiervoor stellen we eerst de evenwichtsvoorwaarde op:

$$K_a = \frac{[\text{CH}_3\text{COOH}][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{CH}_3\text{COO}^-]}$$

We kunnen de concentraties zoals we die nu berekend hebben invullen:

$$K_a = \frac{x^2}{0,8-x}$$

6. Mogen we x verwaarlozen? We hebben een hoge concentratie azijnzuur (1 M). Een klein deel daarvan zal dissociëren (namelijk x). Als x heel klein is, mag je deze verwaarlozen ten opzichte van die 1 molair. Als stelregel hiervoor geldt dat als de beginconcentratie van het zuur meer dan 100x zo groot is als de K_a , je x mag verwaarlozen. Controleer wel achteraf of je x inderdaad mocht verwaarlozen!
7. We hebben nu een concentratie van 1 M en een K_a van $5,8 \cdot 10^{-5}$. Dat betekent dat we x mogen verwaarlozen. De evenwichtsvoorwaarde die je dan krijgt:

$$1,8 \cdot 10^{-5} = \frac{x^2}{0,8}$$

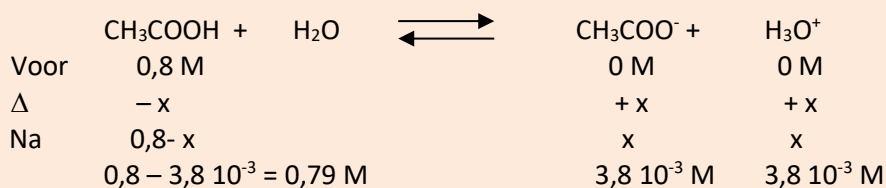
Deze vergelijking is op te lossen door beide kanten te vermenigvuldigen met 0,8

$$1,44 \cdot 10^{-5} = x^2$$

En vervolgens de wortel te trekken:

$$x = \sqrt{1,44 \cdot 10^{-5}} = 3,8 \cdot 10^{-3}$$

8. Nu we x weten, kunnen we x invullen in het schema dat we eerder opgesteld hebben:



9. Je ziet nu dat we een concentratie weten voor H_3O^+ , namelijk $3,8 \cdot 10^{-3} \text{ M}$.

10. De pH berekenen: $\text{pH} = -\log [\text{H}_3\text{O}^+] = -\log 3,8 \cdot 10^{-3} = 2,42$

11. De pH heeft geen eenheid. We losten een zuur op in water, dus verwachten we inderdaad een lage pH (lager dan 7). Azijnzuur is een zwak zuur. We maakten een oplossing van 0,8 molair, dus verwacht je minder dan 0,8 M H^+ (omdat niet alle zuur dissocieert). Dit klopt ook met de berekening.

Stappenplan

1. Stel de reactievergelijking op
2. Schrijf op welke concentraties je aan het begin hebt
3. Schrijf op (met behulp van x) wat er zal gaan veranderen
4. Schrijf de eindconcentraties op (met x)
5. Vul de eindconcentraties in in de evenwichtsvoorwaarde
6. Bereken x
7. Vul x in
8. Bereken de exacte concentratie H_3O^+ (bij zwakke basen bereken je eerst de concentratie OH^-)
9. Bereken de pH met behulp van de concentratie H_3O^+ of OH^- die je hebt berekend
10. Controleer of je antwoord logisch is en of de significantie en eenheden kloppen

Bij basen is het principe van de berekening exact hetzelfde, maar dan bereken je de concentratie OH^- die ontstaat. Daaruit kan de pH berekend worden zoals eerder beschreven.

Oefeningen

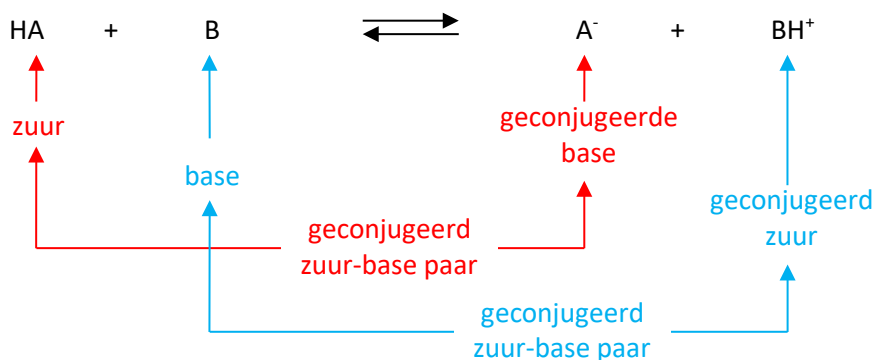
1. Je maakt een oplossing van 1,0 mol/liter azijnzuur (CH_3COOH). De K_a van azijnzuur is $5,8 \cdot 10^{-5}$. Wat is de pH van deze oplossing? Volg het stappenplan van het voorbeeld.
2. Je lost 1000 milligram aspirine ($\text{C}_9\text{H}_8\text{O}_4$) op in 100 milliliter water. Aspirine is een zwak zuur. De K_a van aspirine is $3,3 \cdot 10^{-4}$.
 - a. Bereken hoeveel mol aspirine je hebt
 - b. Bereken de beginconcentratie aspirine in M
 - c. Geef de reactievergelijking voor de dissociatie van het aspirine in water
 - d. Schrijf het schema met 'voor' ' Δ ' en 'na' en vul de bekende waarden in
 - e. Bepaal of je x mag verwaarlozen
 - f. Vul de concentraties in in de evenwichtsvoorwaarde

- g. Bereken x
- h. Bereken de concentratie H_3O^+ in de oplossing
- i. Bereken de pH van deze oplossing

3. Je lost 5,0 gram melkzuur ($\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_3$) op in 1,0 liter water. Melkzuur heeft een K_a van $1,38 \cdot 10^{-4}$.
 - a. Geef de reactievergelijking en de evenwichtsvoorwaarde voor deze reactie
 - b. Bereken de beginconcentratie paracetamol in M
 - c. Bepaal of je x mag verwaarlozen
 - d. Bereken de pH van deze oplossing (volg het stappenplan)
4. Je lost 2,0 milligram mierenzuur (HCOOH) op in 1000 microliter water. Mierenzuur heeft een $\text{p}K_a$ van 3,77.
 - a. Geef de reactievergelijking en de evenwichtsvoorwaarde voor deze reactie
 - b. Bereken de K_a van mierenzuur
 - c. Bereken de pH van deze oplossing
5. Propionzuur ($\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$) wordt in de voedselindustrie gebruikt om het bederven van voedsel tegen te gaan. Je lost 300 mg propionzuur op in 4,0 ml water. Propionzuur is een zwak zuur en heeft een $\text{p}K_a$ van 4,87.
 - a. Geef de reactievergelijking en de evenwichtsvoorwaarde voor deze reactie
 - b. Bereken de pH van deze oplossing
6. Je lost 4,0 gram van de zwakke base ammonia (NH_3) op in 500 ml water. De K_b van ammonia is $1,8 \cdot 10^{-5}$.
 - a. Geef de reactievergelijking (let op dat je nu te maken hebt met een base!!)
 - b. Geef de evenwichtsvoorwaarde voor deze reactie
 - c. Bereken de concentratie OH^- in de oplossing op exact dezelfde wijze als je voor de $[\text{H}_3\text{O}^+]$ hebt gedaan in eerdere opgaven.
 - d. Bereken de pOH van deze oplossing.
 - e. Bereken de pH van deze oplossing.
7. Je lost 50 microgram van de zwakke base aniline ($\text{C}_6\text{H}_5\text{NO}_2$) op in 10 ml water. De $\text{p}K_b$ van aniline is 9,42.
 - a. Geef de reactievergelijking van de reactie van aniline met water
 - b. Geef de evenwichtsvoorwaarde van deze reactie en bereken de pH van deze oplossing.
 - c. Verwacht je dit antwoord op basis van de K_b en de hoeveelheid stof die je hebt opgelost?
8. **Strychnine is een zeer giftige stof die wordt gebruikt als rattengif. De stof komt van nature voor in de pitten van de braaknoot (vrucht van een Aziatische plant). Strychnine ($\text{C}_{21}\text{H}_{22}\text{N}_2\text{O}_2$) is een zwakke base met een $\text{p}K_b$ van 8,26.**
 - a. Geef de reactievergelijking en de evenwichtsvoorwaarde voor de reactie van strychnine met water.
 - b. Bereken de pH van een oplossing van 1,00 gram strychnine in 100 ml water.
 - c. Voor de mens is een dosis 1,50 mg/kg lichaamsgewicht dodelijk. Hoeveel milliliter van deze oplossing is dodelijk voor een man die 82,0 kilo weegt?

28. Zuur-base reacties

Zuren en basen kunnen respectievelijk een proton afstaan of opnemen van/aan water. Daarnaast kunnen zuren en basen ook een proton **aan elkaar** overdragen. De standaardreactie van zo'n **zuur-base reactie**:



Er zijn bij deze reactie dus **twee** geconjugeerde zuur-base paren betrokken (rood en blauw in de figuur). Het proton wordt van het zuur over gedragen aan de base.

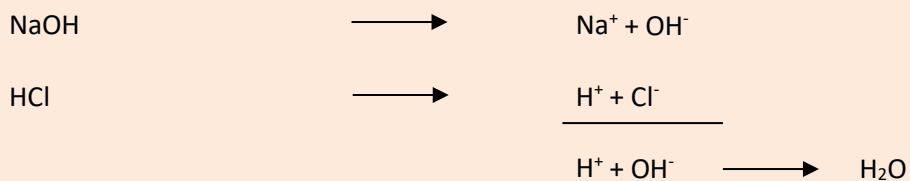
Neutralisatie

Door een zuur met een base te laten reageren kan een oplossing **geneutraliseerd** worden. Een neutralisatie is een zuur-base reactie waarbij water en een zout ontstaan.

Voorbeeld

Geef de reactievergelijking van de neutralisatiereactie van natronloog met zoutzuur.

Je zou drie reacties kunnen onderscheiden:



In één reactievergelijking:



In deze reactie worden OH^- en H_3O^+ dus omgezet in water, en daarmee geneutraliseerd.

Vuistregels bij zuur-base reacties

Bij zuur-base reacties gelden er een aantal vuistregels:

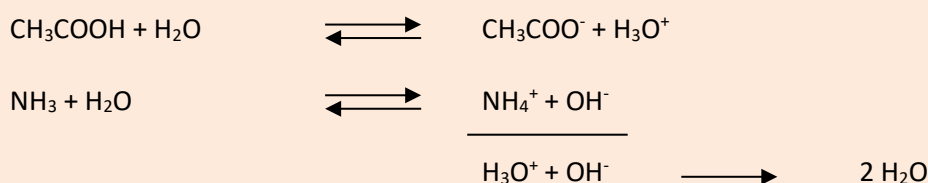
1. De reactie van een **sterk** zuur met een **sterke** base verloopt **volledig** (enkele pijl in de reactievergelijking)
2. De reactie van een **zwak** zuur met een **sterke** base verloopt **nagenoeg volledig** (enkele pijl in de reactievergelijking)
3. De reactie van een **sterk** zuur met een **zwakke** base verloopt **nagenoeg volledig** (enkele pijl in de reactievergelijking)
4. De reactie van een **zwak** zuur met een **zwakke** base is een **evenwichtsreactie** (dubbele pijl in de reactievergelijking)
5. De reactie van een **heel zwak zuur** met een **hele zwakke base** verloopt **niet** (geen reactievergelijking).

Voorbeeld

Geef de zuur-base reactie van azijnzuur met ammonia:

Azijnzuur is een zwak zuur en ammonia een zwakke base, dat betekent dat er een zuur-base reactie kan plaatsvinden, maar dat deze niet volledig zal verlopen.

Eerst kunnen de afzonderlijke reacties opgeschreven worden:



Dit is ook samen te vatten in één reactievergelijking:

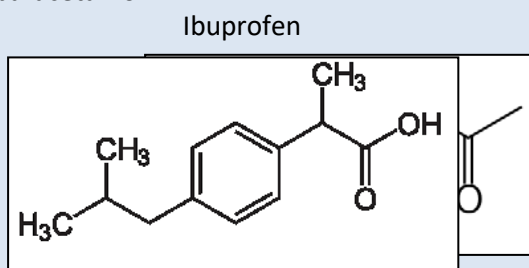


Het water staat nu aan beide kanten van de pijl en kan tegen elkaar weg worden gestreept:



Oefeningen

1. Geef de reactievergelijking van de reactie van kaliloog (KOH) met zoutzuur (HCl).
2. Geef de reactievergelijking van de reactie van kaliloog met het zwakke zuur aspirine ($\text{C}_9\text{H}_8\text{O}_4$).
3. Geef de reactievergelijking van het zwakke zuur ibuprofen (zie figuur) met de zwakke base paracetamol.



Voorbeeld tentamenvragen

Vraag 1

Calcium is een element dat in ruime mate in ons lichaam aanwezig is. Het is verantwoordelijk voor diverse lichaamsfuncties, bijvoorbeeld de groei van levende cellen. Het wordt verteerd als calcium-ionen in zowel de vrije toestand (Ca^{2+}) als in gebonden toestand. Calciumsupplementen bevatten de ionen vaak in de vorm van het in water onoplosbare calciumcarbonaat (CaCO_3). Ons maagzuur (H_3O^+) produceert dan de calcium-ionen.

(a) Geef de reactievergelijking van de optredende zuur-base reactie in de maag.

Twee studenten bestuderen deze reactie door CaCO_3 uit een voedingssupplement te laten reageren met H_3O^+ in een tweetal verschillende oplossingen: **1** zoutzuur (HCl) met $\text{pH} = 2,50$ en **2** azijnzuur (CH_3COOH) met $\text{pH} = 2,50$.

(b) Leg uit of in de azijnzuur oplossing **2** meer, evenveel of minder calciumcarbonaat oplost dan in de zoutzuur oplossing **1**.

Eén van de studenten wil aantonen dat door middel van verdunning van de zoutzuur oplossing **1** de pH verandert. Daartoe verdunt hij deze oplossing met een factor 10^6 .

(c) Bepaal de pH -waarde van de verdunde oplossing en verklaar je antwoord.

Vraag 2

Pantotheenzuur (vitamine B5, formule $\text{C}_9\text{H}_{17}\text{NO}_5$) speelt een cruciale rol in het metabolisme van koolhydraten en vetten. Het komt in bijna alle voedingsmiddelen voor en een tekort aan pantotheenzuur is uiterst zeldzaam. Toch wordt, veelal via het internet, vitamine B5 als voedingssupplement aangeboden. Pantotheenzuur is een eenwaardig zwak zuur ($K_a = 3,9 \cdot 10^{-5}$).



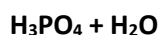
- De firma Proviform biedt tabletten met 500 mg pantotheenzuur aan. We lossen één tablet op in 150 ml water. Bereken de molariteit en de pH van deze oplossing. Gebruik de notatie HA voor pantotheenzuur. Controleer of de vereenvoudigde berekening kan worden uitgevoerd ($C_{\text{HA}}/K_a > 100$).
- Bah, wat zuur, roept Anouk. Zij herinnert zich de gootsteenontstopper van de docent. Zij lost een nieuwe tablet op in 150 ml, gaat naar het lab en pakt de NaOH oplossing (4 M). Hoeveel ml NaOH moet worden toegevoegd om het vitaminedrankje te neutraliseren?
- Het voedingscentrum hanteert voor vitamine B5 een aanbevolen dagelijkse hoeveelheid (ADH) van 6 mg. Hoeveel procent van de dagelijkse behoefte aan vitamine B5 wordt gedekt met één tablet van de firma Proviform?
- Multivitamine tabletten van Dr. Scheffler bevatten 267 mg pantotheenzuur per 100 g. Met één tablet wordt 200% van de ADH voor vitamine B5 gedekt. Hoeveel wegen deze multivitamine tabletten?



29. Meerwaardige zuren

Meerwaardige zuren zijn zuren die **meer dan 1 proton** af kunnen staan. Zij staan deze meerdere protonen **één voor één af**. Elke proton die afgestaan wordt is een afzonderlijke reactie, met zijn eigen reactievergelijking. Een voorbeeld van een meerwaardig zuur is fosforzuur (ook wel triwaterstoffsosfaat, H_3PO_4). Dit is een driewaardig zwak zuur. Wanneer je fosforzuur oplost in water, is de eerste reactie die er plaats vindt het afstaan van het eerste proton. De reactievergelijking van deze reactie stel je net zo op als hierboven beschreven voor 'gewone' zuren en basen.

1. Schrijf de reactanten links van de pijl op: dit zijn dus het H_3PO_4 en H_2O .



2. Schrijf de producten rechts van de pijl op.

- a. H_3PO_4 is een zuur en zal dus in de eerste reactie **1 proton** afstaan, dus zal 1 H verliezen en de lading zal met 1 afnemen. Het product is dus H_2PO_4^- (let op de lading!)



- b. Het proton wordt opgenomen door het water, dus er ontstaat een **hydronium ion** (H_3O^+)



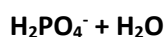
3. Omdat fosforzuur een zwak zuur is, schrijven we in de reactie een **dubbele pijl**. Er is dus sprake van een evenwichtssituatie.



Wat we nu hebben geschreven is de dissociatie van het **eerste proton** van het meerwaardig zuur. Wat er nu is ontstaan is diwaterstoffsosfaat (H_2PO_4^-). H_2PO_4^- is de geconjugeerde base van H_3PO_4 . Het kan een proton opnemen, waardoor weer triwaterstoffsosfaat ontstaat, maar het kan ook reageren als zuur. Om de reactievergelijking van de dissociatie van dit tweede zuur op te schrijven, volgen we dezelfde tactiek als voor triwaterstoffsosfaat, alleen gebruiken we als reactant niet H_3PO_4 , maar H_2PO_4^- .

Om de reactievergelijking van de dissociatie van H_2PO_4^- op te stellen, volgen we weer dezelfde strategie:

1. Schrijf de reactanten links van de pijl op. In dit geval zijn dit H_2PO_4^- en H_2O .



2. Schrijf de producten die ontstaan rechts van de pijl op.

- a. H_2PO_4^- zal in deze reactie het 2^{e} proton afstaan, dus er zal nog 1 H af gaan en de lading zal weer met 1 afnemen. Het product dat je nu krijgt is HPO_4^{2-} . (1 H minder en de lading ook 1 minder).



- b. Het proton dat wordt afgestaan wordt opgenomen door het water, dus er ontstaat een **hydronium ion** (H_3O^+)



3. Bij meerwaardige zuren is het tweede zuur altijd zwakker dan het eerste zuur, dus aangezien triwaterstoffsosfaat al een zwak zuur is, zal diwaterstoffsosfaat dat zeker ook zijn. Dus schrijven we wederom een **dubbele pijl** in de reactievergelijking.



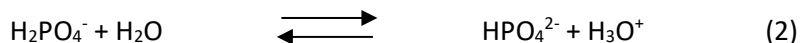
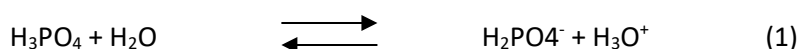
We hebben nu dus de reactievergelijkingen van het afstaan van het eerste proton en het tweede proton. Fosforzuur is een driewaardig zuur, dus ook de geconjugeerde base HPO_4^{2-} die is ontstaan bij de tweede reactie kan als zuur reageren. Om voor deze **derde reactie** de reactievergelijking op te stellen, volgen we wederom dezelfde strategie als bij de eerste twee stappen, maar beginnen we nu met HPO_4^{2-} als reactant.

De derde reactievergelijking ziet er dus als volgt uit:



Het product in deze derde reactie heeft dus wederom een H minder en een lading die 1 meer negatief is.

Wanneer we de drie reacties van het driewaardige zuur H_3PO_4 op stellen:



Hierbij zie je dus dat de geconjugeerde base die ontstaat bij de eerste reactie als zuur dient in de tweede reactie. En de geconjugeerde base van de tweede reactie dient weer als zuur in de derde reactie:



Evenwichtsvoorwaarden

Voor elke reactie is een afzonderlijke evenwichtsvoorwaarde op te stellen. Elke reactie heeft ook een eigen K_a waarde:

Evenwichtsvoorwaarde 1:
$$K_{a1} = \frac{[\text{H}_2\text{PO}_4^-][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{H}_3\text{PO}_4]}$$

Evenwichtsvoorwaarde 2:
$$K_{a2} = \frac{[\text{HPO}_4^{2-}][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{H}_2\text{PO}_4^-]}$$

Evenwichtsvoorwaarde 3:
$$K_{a3} = \frac{[\text{PO}_4^{3-}][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{HPO}_4^{2-}]}$$

De K_{a1} geeft aan **hoe zuur** H_3PO_4 is, de K_{a2} geeft aan **hoe zuur** H_2PO_4^- is en de K_{a3} geeft aan **hoe zuur** PO_4^{3-} is. Het tweewaardige zuur (H_2PO_4^-) is altijd en zwakker zuur dan het driewaardige zuur (H_3PO_4). Het enkelwaardige zuur (HPO_4^{2-}) is altijd een zwakker zuur dan het tweewaardige zuur (H_2PO_4^-). De sterkte van de zuren loopt dus af: $K_{a1} > K_{a2} > K_{a3}$.

De 3 geconjugeerd zuur-base paren die er zijn in dit voorbeeld zijn:

1. H_3PO_4 (zuur) en H_2PO_4^- (geconjugeerde base)
2. H_2PO_4^- (zuur) en HPO_4^{2-} (geconjugeerde base)
3. HPO_4^{2-} (zuur) en PO_4^{3-} (geconjugeerde base).

Meerwaardige basen

PO_4^{3-} is een driewaardige zwakke base. Op dezelfde wijze als de zuren kun je voor meerwaardige basen voor elk proton dat wordt opgenomen (in dit geval dus 3) een reactievergelijking opstellen:



Voor elk van deze reactievergelijkingen kun je weer een evenwichtsvoorwaarde opstellen:

$$\text{Evenwichtsvoorwaarde 1:} \quad K_{b1} = \frac{[\text{HPO}_4^{2-}][\text{OH}^-]}{[\text{PO}_4^{3-}]}$$

$$\text{Evenwichtsvoorwaarde 2:} \quad K_{b2} = \frac{[\text{H}_2\text{PO}_4^-][\text{OH}^-]}{[\text{HPO}_4^{2-}]}$$

$$\text{Evenwichtsvoorwaarde 3:} \quad K_{b3} = \frac{[\text{H}_3\text{PO}_4][\text{OH}^-]}{[\text{H}_2\text{PO}_4^-]}$$

Ook voor basen geldt dat de driewaardige base (PO_4^{3-}) een sterkere base is dan de tweewaardige base (HPO_4^{2-}) en dat de eenwaardige base (H_2PO_4^-) de zwakste base is. Dus er geldt: $K_{b1} > K_{b2} > K_{b3}$. Dus de driewaardige base is de sterkste base en het geconjugeerde zuur (HPO_4^{2-}) is het zwakste zuur in de serie. Dit klopt met het feit dat hoe sterker een base is, hoe zwakker het geconjugeerde zuur.

Wanneer je kijkt naar het voorbeeld van het meerwaardige zuur en de meerwaardige base, dan zie je dat in beide gevallen dezelfde chemicaliën voorkomen. De base (HPO_4^{2-}) is de tweede base (reactievergelijking 2 bij de basen), maar is ook het derde zuur (reactievergelijking 3 bij de zuren). Bij de stof HPO_4^{2-} hoort dus de K_{b2} wanneer de stof als base reageert, maar bij HPO_4^{2-} hoort ook K_{a3} , wanneer de stof als zuur reageert. In het volgende hoofdstuk zullen we hier verder op in gaan.

TABLE C.1 Acid-Dissociation Constants at 25°C

Acid	Formula	K_{a1}	K_{a2}	K_{a3}
Acetic	$\text{CH}_3\text{CO}_2\text{H}$	1.8×10^{-5}		
Acetylsalicylic	$\text{C}_9\text{H}_8\text{O}_4$	3.0×10^{-4}		
Arsenic	H_3AsO_4	5.6×10^{-3}	1.7×10^{-7}	4.0×10^{-12}
Arsenious	H_3AsO_3	6×10^{-10}		
Ascorbic	$\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_6$	8.0×10^{-5}		
Benzoic	$\text{C}_6\text{H}_5\text{CO}_2\text{H}$	6.5×10^{-5}		
Boric	H_3BO_3	5.8×10^{-10}		
Carbonic	H_2CO_3	4.3×10^{-7}	5.6×10^{-11}	
Chloroacetic	$\text{CH}_2\text{ClCO}_2\text{H}$	1.4×10^{-3}		
Citric	$\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7$	7.1×10^{-4}	1.7×10^{-5}	4.1×10^{-7}
Formic	HCO_2H	1.8×10^{-4}		
Hydrazoic	HN_3	1.9×10^{-5}		
Hydrocyanic	HCN	4.9×10^{-10}		
Hydrofluoric	HF	3.5×10^{-4}		
Hydrogen peroxide	H_2O_2	2.4×10^{-12}		
Hydrosulfuric	H_2S	1.0×10^{-7}	$\approx 10^{-19}$	
Hypobromous	HOBr	2.0×10^{-9}		
Hypochlorous	HOCl	3.5×10^{-8}		
Hypoiodous	HOI	2.3×10^{-11}		
Iodic	HIO_3	1.7×10^{-1}		
Lactic	$\text{HC}_3\text{H}_5\text{O}_3$	1.4×10^{-4}		
Nitrous	HNO_2	4.5×10^{-4}		
Oxalic	$\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4$	5.9×10^{-2}	6.4×10^{-5}	
Phenol	$\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}$	1.3×10^{-10}		
Phosphoric	H_3PO_4	7.5×10^{-3}	6.2×10^{-8}	4.8×10^{-13}
Phosphorous	H_3PO_3	1.0×10^{-2}	2.6×10^{-7}	
Saccharin	$\text{C}_7\text{H}_5\text{NO}_3\text{S}$	2.1×10^{-12}		
Selenic	H_2SeO_4	Very large	1.2×10^{-2}	
Selenious	H_2SeO_3	3.5×10^{-2}	5×10^{-8}	
Sulfuric	H_2SO_4	Very large	1.2×10^{-2}	
Sulfurous	H_2SO_3	1.5×10^{-2}	6.3×10^{-8}	
Tartaric	$\text{C}_4\text{H}_6\text{O}_6$	1.0×10^{-3}	4.6×10^{-5}	
Water	H_2O	1.8×10^{-16}		

Tabel 1. Overzicht van de zuurconstanten van enkelwaardige en meerwaardige zuren.

In tabel 1 is een overzicht weergegeven van de zuurconstanten van veel verschillende zuren. Voor de meerwaardige zuren zie je meerdere K_a waarden staan. Deze komen qua nummering overeen met wat er in dit hoofdstuk is uitgelegd (dus voor de K_a altijd het sterkste zuur eerst). Je kunt in deze tabel dus bij fosforzuur (H_3PO_4) inderdaad zien dat fosforzuur 3 K_a waarden heeft. De K_a die hoort bij het derde zuur (HPO_4^{2-}) kun je aflezen in deze tabel: $4,8 \cdot 10^{-13}$.

Oefeningen

1. Citroenzuur ($\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7$) is een driewaardig zwak zuur.
 - a. Geef de drie reactievergelijkingen voor de dissociatie van citroenzuur in water
 - b. Geef de evenwichtsvoorwaarden die horen bij deze reacties
 - c. Welke geconjugeerd zuur-base paren zijn er?
 - d. Geef de reactievergelijkingen van de reacties van de drie geconjugeerde basen met water.
 - e. Geef de evenwichtsvoorwaarden die horen bij de reacties geschreven bij d.

We gaan in het volgende hoofdstuk rekenen met de getallen in tabel 1. Eerst gaan we oefenen met het kiezen van de juiste K_a en K_b .

 - f. Welke K_a en K_b horen er bij $\text{C}_6\text{H}_6\text{O}_7^{2-}$. Kies uit K_{a1} , K_{a2} , K_{a3} , K_{b1} , K_{b2} en K_{b3} .
2. Zwavelzuur (H_2SO_4) is een tweewaardig zuur.
 - a. Geef de reactievergelijkingen van de dissociatie van zwavelzuur in water
 - b. Geef de evenwichtsvoorwaarden bij deze reacties
 - c. Welke geconjugeerd zuur-base paren zijn er?
 - d. Geef de reactievergelijkingen van de reacties van de twee geconjugeerde basen met water.
 - e. Geef de evenwichtsvoorwaarden die horen bij de reacties geschreven bij d.
 - f. Welke K_a en welke K_b horen er bij HSO_4^- ? Kies uit K_{a1} , K_{a2} , K_{b1} en K_{b2} .
 - g. In tabel 1 zie je bij H_2SO_4 bij de K_{a1} staan dat deze 'very large' is, wat betekent dat?
3. Dinatriumcarbonaat (Na_2CO_3) is het zout van een tweewaardige base.
 - a. Geef de reactievergelijkingen van de reactie van carbonaat met water
 - b. Geef de evenwichtsvoorwaarden bij deze reacties
 - c. Welke geconjugeerd zuur-base paren zijn er?
 - d. Geef de reactievergelijkingen van de reacties van de twee geconjugeerde zuren met water.
 - e. Geef de evenwichtsvoorwaarden die horen bij de reacties geschreven bij d.
 - f. Welke K_a en welke K_b horen er bij HCO_3^- ? Kies uit K_{a1} , K_{a2} , K_{b1} en K_{b2}
4. Oxaalzuur is een stof die voorkomt in sommige nierstenen. $\text{C}_2\text{O}_4^{2-}$ is de tweewaardige geconjugeerde base van oxaalzuur.
 - a. Geef de reactievergelijkingen van de reactie van $\text{C}_2\text{O}_4^{2-}$ met water
 - b. Geef de evenwichtsvoorwaarden bij deze reacties
 - c. Welke geconjugeerd zuur-baseparen zijn er?
 - d. Geef de reactievergelijkingen van de reacties van de twee geconjugeerde zuren met water.
 - e. Geef de evenwichtsvoorwaarden die horen bij de reacties geschreven bij d.
 - f. Welke K_a en welke K_b horen er bij C_2O_4^- ? Kies uit K_{a1} , K_{a2} , K_{b1} en K_{b2}

30. Amfolieten

Bij elk van de reacties ontstaat een geconjugeerde base. Bij meerwaardige zuren is deze geconjugeerde base soms zelf ook een zuur. Als we kijken naar H_2PO_4^- , dan is dat de geconjugeerde base van H_3PO_4 , maar is tegelijkertijd zelf ook een zuur. Moleculen die zowel zuur als base zijn, noemen we amfoliet.

H_2PO_4^- kan reageren als zuur:



Maar H_2PO_4^- kan ook reageren als base:



Deze reactie (4) is exact het omgekeerde van reactie 1. De evenwichtsvoorwaarde voor deze reactie is:

$$K_b = \frac{[\text{H}_3\text{PO}_4][\text{OH}^-]}{[\text{H}_2\text{PO}_4^-]}$$

De K_b van H_2PO_4^- die bij deze reactie hoort kun je omrekenen uit de K_a1 zoals eerder beschreven. Om de K_b van H_2PO_4^- te berekenen reken je dus met de K_a1 . De K_a van H_2PO_4^- is de K_a2 . Ga goed na of je begrijpt hoe dit werkt!

Een voorbeeld

HPO_4^{2-} is een amfolyt. Geef de pK_a en de K_b van HPO_4^{2-} .

1. Om de pK_a van HPO_4^{2-} te geven, moeten we HPO_4^{2-} als zuur beschouwen:



Zoals we eerder hebben gezien, is dit de derde reactie van het driewaardige zuur H_3PO_4 :



We moeten dus de K_{a3} van H_3PO_4 (zie tabel 1 in het vorige stukje) hebben: $4,2 \cdot 10^{-13}$. Om de pK_a te berekenen:

$$pK_a = -\log K_a = -\log 4,2 \cdot 10^{-13} = 12,4$$

2. Om de K_b te bepalen moeten we HPO_4^{2-} beschouwen als base:



Het geconjugeerde zuur van HPO_4^{2-} is dus H_2PO_4^- . De K_a van H_2PO_4^- kunnen we opzoeken in de tabel, dit is namelijk de K_{a2} van H_3PO_4 (zie reactievergelijking 2). De K_{a2} is $6,3 \cdot 10^{-8}$. Om hieruit de K_b te berekenen:

$$K_b = 10^{-14} / K_a = 10^{-14} / 6,3 \cdot 10^{-8} = 1,59 \cdot 10^{-7}$$

Bij deze tweede stap is het dus erg belangrijk om goed te kijken wat het geconjugeerde zuur is van de base, zodat je de juiste K_a kiest om de K_b mee te berekenen!

Als je een amfoliet oplost in water, zal de pH dan stijgen of dalen? Voor het beantwoorden van deze vraag moet je weten hoe sterk de amfoliet basisch is en hoe sterk het amfoliet zuur is. Als de amfoliet een sterker zuur dan base is, dan zal de pH dalen. Als de amfoliet een sterkere base dan zuur is, dan zal de pH dalen.

Om dit te kunnen bepalen dien je de K_a en de K_b van de amfoliet met elkaar te vergelijken. Voor het voorbeeld HPO_4^{2-} , is de K_a $4,2 \cdot 10^{-13}$ en is de K_b $1,6 \cdot 10^{-3}$. De K_b is veel groter dan de K_a , wat betekent dat HPO_4^{2-} zich zal gedragen als **base**. De pH zal dus stijgen wanneer je HPO_4^{2-} oplost in water.

Oefeningen

1. HCO_3^- is een amfoliet.
 - a. Geef de reactievergelijking van de reactie van HCO_3^- als zuur
 - b. Geef de reactievergelijking van de reactie van HCO_3^- als base
 - c. Geef de evenwichtsvoorwaarden van de reacties beschreven bij a en b
 - d. Wat is de K_a van HCO_3^- ? (zie tabel 1)
 - e. Wat is de K_b van HCO_3^- ?
 - f. Zal HCO_3^- zich gedragen als zuur of als base?
2. H_2PO_4^- is een amfoliet.
 - a. Geef de reactievergelijkingen van H_2PO_4^- als zuur en als base
 - b. Geef de bijbehorende evenwichtsvoorwaarden
 - c. Wat zijn de K_a en de K_b van H_2PO_4^- ?
 - d. Zal H_2PO_4^- zich gedragen als zuur of als base?
3. $\text{C}_6\text{H}_7\text{O}_7^-$ is een amfoliet. Zal $\text{C}_6\text{H}_7\text{O}_7^-$ zich gedragen als zuur of als base?

Week 6



31. De Henderson Hasselbalch-vergelijking

De Henderson Hasselbalch-vergelijking is een gemakkelijke formule om **de verhouding** tussen een zuur en een base bij een bepaalde pH te berekenen zonder dat je de exacte concentraties hoeft te weten. De Henderson Hasselbalch vergelijking is afgeleid van de evenwichtsvoorwaarde:

$$\begin{array}{lcl} \text{HA} + \text{H}_2\text{O} & \rightleftharpoons & \text{A}^- + \text{H}_3\text{O}^+ \\[10pt] \text{Ka} & = \frac{[\text{A}^-][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{HA}]} & \text{Breuk opsplitsen} \\[10pt] \text{Ka} & = [\text{H}_3\text{O}^+] \frac{[\text{A}^-]}{[\text{HA}]} & \text{Omzetten in p-waarden} \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ \text{pKa} & = \text{pH} - \log \frac{[\text{A}^-]}{[\text{HA}]} & \text{Beide kanten} + \log \frac{[\text{A}^-]}{[\text{HA}]} \\[10pt] \text{pH} & = \text{pKa} + \log \frac{[\text{A}^-]}{[\text{HA}]} & \end{array}$$

Wanneer je de pH en de pKa weet, kun je de verhouding tussen A⁻ en HA dus heel eenvoudig bepalen door deze formule te gebruiken. Om dit duidelijk te maken staat hieronder een voorbeeld:

Voorbeeld

In de maag is de pH 2,0. Zal azijnzuur voornamelijk als CH₃COO⁻ of als CH₃COOH aanwezig zijn? (De Ka van azijnzuur is 1,8 · 10⁻⁵)



A⁻ is in dit geval CH₃COO⁻

HA is in dit geval CH₃COOH

1. Bereken de pKa van azijnzuur:

$$\text{pKa} = -\log \text{Ka} = -\log 1,8 \cdot 10^{-5} = 4,74$$

2. Vul de Henderson Hasselbalch vergelijking in:

$$\text{pH} = 2,0 \text{ (is gegeven)}$$

$$\text{pKa} = 4,74$$

$$\text{pH} = \text{pKa} + \log \frac{[\text{A}^-]}{[\text{HA}]}$$

$$2,0 = 4,74 + \log \frac{[\text{CH}_3\text{COO}^-]}{[\text{CH}_3\text{COOH}]}$$

3. De vergelijking kan als volgt opgelost worden:

$$2,0 = 4,74 + \log \frac{[\text{CH}_3\text{COO}^-]}{[\text{CH}_3\text{COOH}]} \quad (\text{beide kanten } -4,74)$$

$$-2,74 = \log \frac{[\text{CH}_3\text{COO}^-]}{[\text{CH}_3\text{COOH}]} \quad (\log \text{ wegwerken})$$

$$10^{-2,74} = \frac{[\text{CH}_3\text{COO}^-]}{[\text{CH}_3\text{COOH}]}$$

$$0,0018 = \frac{[\text{CH}_3\text{COO}^-]}{[\text{CH}_3\text{COOH}]}$$

Met de Henderson Hasselbalch vergelijking kun je heel duidelijk zien wat de impact van pH-verandering is op de verhouding van een zwak zuur en zijn geconjugeerde base in een oplossing.

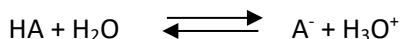
Om de verhouding tussen het zuur en de geconjugeerde base te berekenen hoef je dus niet de concentratie van het azijnzuur te weten.

Wanneer de pH gelijk is aan de pKa, dan is de verhouding tussen $[\text{A}^-]$ en $[\text{HA}]$ 1 (controleer dit door dit na te rekenen). Dat betekent dus dat wanneer de pH gelijk is aan de pKa van een zwak zuur, de helft van het zuur als zuur aanwezig is en de helft als geconjugeerde base.

Wanneer de pH 1 pH-eenheid verschilt met de pKa, dan is er al een verschil van 1:10 tussen het zuur en de geconjugeerde base of andersom. Wanneer de pH 1 pH-eenheid lager is dan de pKa dan zal er 10 keer meer zuur zijn dan geconjugeerde base. En wanneer de pH 1 pH-eenheid hoger is dan de pKa, dan zal er 10 keer meer van de geconjugeerde base zijn dan van het zuur.

Wanneer de pH 2 pH-eenheden verschilt met de pKa, dan is die verhouding al 1:100. Wanneer de pH 3 pH-eenheden verschilt met de pKa dan is er een verschil van 1:1000, etcetera.

Reactievergelijking:



Verschil pH-pKa

verhouding

Verhouding in procenten

pH = pKa

$$\frac{[\text{A}^-]}{[\text{HA}]} = 1$$

50% A^- & 50 % HA



pH = pKa + 1

$$\frac{[\text{A}^-]}{[\text{HA}]} = 10$$

90,9 % A^- & 9 % HA



pH = pKa + 2

$$\frac{[\text{A}^-]}{[\text{HA}]} = 100$$

99% A^- & 0,99 % HA



pH = pKa -1

$$\frac{[\text{A}^-]}{[\text{HA}]} = 9$$

9 % A^- & 91 % HA



pH = pKa + -2

$$\frac{[\text{A}^-]}{[\text{HA}]} = 0,01$$

0,99 % A^- & 99 % HA



In bovenstaande overzicht zie je de invloed van het verschil tussen de pH en de pKa van een zuur en de verhouding tussen de hoeveelheid niet-gedissocieerd zuur (HA) en de geconjugeerde base (A^-) in een oplossing. In de getekende balkjes zie je die verhouding ook weergeven. Hierbij is het blauw het deel dat als geconjugeerde base aanwezig is en het roze het deel dat als niet-gedissocieerd zuur aanwezig is in de oplossing. Hiermee krijg je in het volgende stuk over de buffers meer te maken.

Het berekenen van een percentage uit de verhouding

Om uit de verhouding tussen het zuur en de base het percentage zuur en geconjugeerde base te berekenen (zoals bijvoorbeeld in het overzicht op de vorige pagina), ga je als volgt te werk.

Voorbeeld

Bereken het percentage ongedissocieerd azijnzuur in de maag bij pH = 2,0.

We hebben hierboven de ratio al berekend.

$$0,0018 = \frac{[\text{CH}_3\text{COO}^-]}{[\text{CH}_3\text{COOH}]}$$

Dit kun je ook schrijven als:

$$\frac{0,0018}{1} = \frac{[\text{CH}_3\text{COO}^-]}{[\text{CH}_3\text{COOH}]} \quad \text{Vermenigvuldigen met } \text{CH}_3\text{COOH}$$

$$0,0018 [\text{CH}_3\text{COOH}] = 1 [\text{CH}_3\text{COO}^-]$$

De hoeveelheid CH_3COOH en de hoeveelheid CH_3COO^- zal samen 100% zijn, dus:

$$[\text{CH}_3\text{COOH}] + [\text{CH}_3\text{COO}^-] = 100\%$$

Je weet de absolute getallen voor de beide concentraties niet, maar je weet wel dat

$$0,0018 [\text{CH}_3\text{COOH}] = 1 [\text{CH}_3\text{COO}^-]$$

Dit kunnen we invullen:

$$[\text{CH}_3\text{COOH}] + [\text{CH}_3\text{COO}^-] = 100\%$$

$$\text{Invullen: } 1[\text{CH}_3\text{COOH}] + 0,0018 [\text{CH}_3\text{COOH}] = 100\%$$

Wat hier eigenlijk staat is:

$$x + 0,0018 x = 100\%$$

we kunnen nu de x-waarden bij elkaar optellen:

$$1,0018 x = 100\%$$

$$\text{In dit geval: } 1[\text{CH}_3\text{COOH}] + 0,0018 [\text{CH}_3\text{COOH}] = 100\%$$

$$1,0018 [\text{CH}_3\text{COOH}] = 100\%$$

We kunnen nu berekenen hoeveel procent van de oplossing uit CH_3COOH bestaat door te delen door 1,0018:

$$[\text{CH}_3\text{COOH}] = \frac{100\%}{1,0018} = 99,82\% \dots$$

We kunnen nu het percentage CH_3COO^- eenvoudig berekenen:

$$100\% - 99,82\% \dots = 0,1796\% \dots$$

Van het azijnzuur in de maag zal 99,8 % dus als CH_3COOH aanwezig zijn en 0,2 % als CH_3COO^- . Je kunt voor de zekerheid nog controleren of het ratio nog klopt:

$$[\text{CH}_3\text{COO}^-]/[\text{CH}_3\text{COOH}] = 0,1796 / 99,82\% \dots = 0,0018 \quad \text{KLOPT!!!}$$

Stappenplan

1. Schrijf de reactievergelijking op van de dissociatie van het zuur tot de geconjugeerde base
2. Vul de bekende gegevens in in de Henderson-Hasselbalch vergelijking
3. Bereken de ratio tussen het zuur en de geconjugeerde base
4. Bereken indien nodig vanuit de ratio de percentages ongedissocieerd zuur en geconjugeerde base
5. Controleer of je antwoord klopt en logisch is en of de significantie klopt.

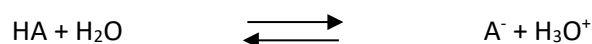
Oefeningen:

1. a. Bereken de verhouding van CH_3COOH en CH_3COO^- zoals die in de darmen (bij $\text{pH} = 8,0$) zal zijn.
b. Bereken het percentage CH_3COO^- in de darmen.
2. Azijnzuur heeft een pK_a van 4,7. In welke verhouding moet je azijnzuur en acetaat mengen om een pH te krijgen van:
a. 4,7
b. 3,7
c. 7,4
d. 1,3
e. Zijn deze verhoudingen de verhoudingen zoals je ze moet samenvoegen in gram of in mol? Hoe houdt je daar rekening mee wanneer je de beide stoffen afweegt?
3. Je lost 2,0 gram Na_2HPO_4 en 3,0 gram KH_2PO_4 op in 500 milliliter water
a. Wat is de molariteit van HPO_4^{2-} en H_2PO_4^- in deze oplossing?
b. Welke van deze stoffen is het zuur en welke is de geconjugeerde base?
c. Geef de reactievergelijking en de evenwichtsvoorwaarde voor de dissociatie van het zuur
d. Zoek de K_a op van het juiste zuur in tabel 1. Bereken de pK_a .
e. Bereken de pH van deze oplossing (gebruik de Henderson-Hasselbalch vergelijking)
4. Valproïnezuur ($\text{C}_8\text{H}_{16}\text{O}_2$) is een geneesmiddel dat onder andere wordt gebruikt om epileptische aanvallen te voorkomen. Valproïnezuur is een eenwaardig zuur ($K_a = 1,58 \cdot 10^{-5}$). Een epilepsiepatiënt lost één tablet van 500 mg op in een glas met 100 ml water.
a. Geef de reactievergelijking en de evenwichtsvoorwaarde voor de dissociatie van het valproïnezuur.
b. Bereken de molariteit en de pH van de oplossing
c. Na de inname van het valproïnezuur belandt het valproïnezuur via de maag in de dunne darm. Alleen het niet-gedissocieerde (ongeladen) valproïnezuur kan daar het epitheel passeren. In de dunne darm is de pH 8,0. Bereken het percentage niet-gedissocieerde valproïnezuur in de darm. Tip: gebruik de Henderson-Hasselbalch vergelijking.

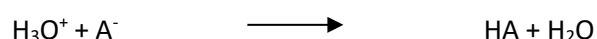
32. Buffers

Buffers zijn oplossingen waarin de pH vrijwel stabiel blijft wanneer je een kleine hoeveelheid sterk zuur of sterk base toevoegt. Dit is bijvoorbeeld in het lichaam erg nuttig om te zorgen dat de pH niet sterk varieert. Veel enzymen zijn erg gevoelig voor pH-veranderingen en werken niet goed als de pH iets afwijkt.

Een buffer bevat hiervoor een zwak zuur en zijn geconjugeerde base:

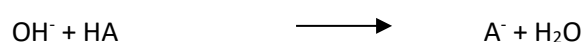


Wanneer je een sterk zuur toevoegt aan deze buffer, dan zal deze reageren met de geconjugeerde base in de oplossing:

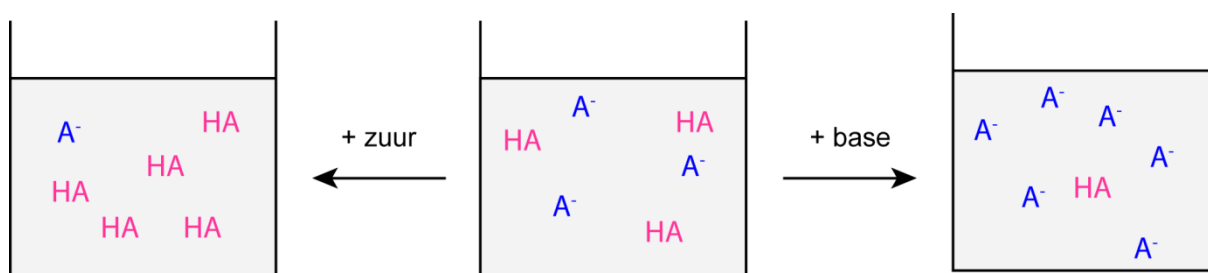


Deze reactie schrijven we met een enkele pijl, omdat er een **sterk zuur** met een zwakke base reageert. Het sterke zuur wordt door de zwakke base geneutraliseerd: zolang er A^- in de oplossing aanwezig is, zal het toegevoegde sterke zuur direct reageren met de zwakke base tot water en het geconjugeerde zuur. Wanneer alle A^- op is wordt het zuur niet meer geneutraliseerd. Hierdoor daalt de pH ineens sterk zodra de geconjugeerde base op is (dit heet een pH sprong).

Wanneer je een sterke base toevoegt aan deze buffer, dan zal deze reageren met het zwakke zuur in de oplossing:



Ook deze reactie schrijven we met een enkele pijl, omdat er een **sterke base** met een zwak zuur reageert. De sterke base wordt door het zwakke zuur geneutraliseerd: zolang er HA in de oplossing aanwezig is, zal de toegevoegde base direct reageren met het zwakke zuur tot water en de geconjugeerde base. Wanneer alle HA op is, wordt het zuur niet meer geneutraliseerd. Hierdoor stijgt de pH ineens sterk (ook een pH sprong).



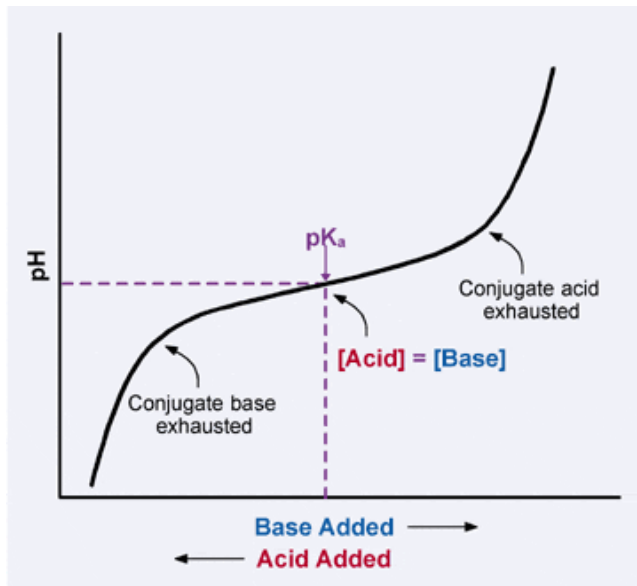
Figuur 21. De buffer (midden) waaraan zuur (links) of base (rechts) toevoegt.

Een buffer werkt dus goed zolang er voldoende van het zwakke zuur en de geconjugeerde base in de oplossing aanwezig is. De concentratie van het zwakke zuur + de geconjugeerde base noemen we de **buffersterkte**. De verhouding van het zuur en de base varieert afhankelijk van de pH (Henderson Hasselbalch vergelijking). Hoe groter de buffersterkte, des te meer zuur en base is er aanwezig in de oplossing, en dus des te beter de buffer kan bufferen.

Een buffer werkt het beste wanneer er evenveel van het zwakke zuur als van de zwakke base aanwezig is. Zoals we in het hoofdstuk over de Henderson Hasselbalch vergelijking hebben gezien, is dat het geval wanneer de pH overeenkomt met de pKa. Bij het maken van een buffer is het dus

belangrijk om een zuur-base paar te kiezen met een pK_a die in de buurt ligt van de gewenste pH. Een buffer met $pH = 7$ maak je dus het liefst niet met bijvoorbeeld acetaat of azijnzuur, omdat de pK_a van azijnzuur 4,8 is.

Wanneer er van het zwakke zuur veel meer aanwezig is dan van de geconjugeerde base (het linker bekeerglas), dan kan deze buffer wel veel base neutraliseren, maar weinig zuur. Wanneer er van het zwakke zuur veel minder aanwezig is dan van de geconjugeerde base (het rechter bekeerglas), dan kan de base veel zuur neutraliseren, maar weinig base.



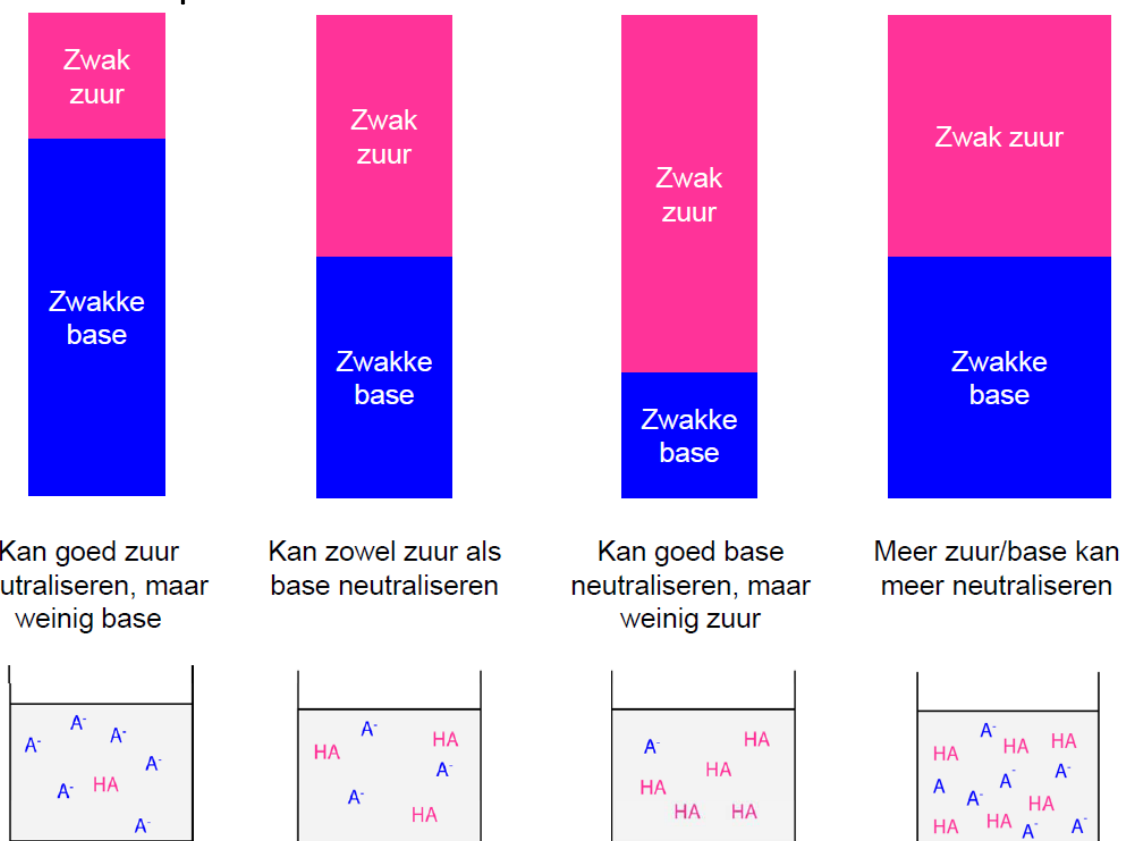
Figuur 22. Grafiek waarin de pH van een buffer oplossing wordt weergegeven (y-as) terwijl er base of zuur toegevoegd wordt (x-as)

In figuur 23 kun je zien wat er gebeurt met de pH van een buffer wanneer je zuur of base toevoegt. Het beginpunt is wanneer de pH gelijk is aan de pK_a (aangegeven met de paarse stippellijntjes). Op dat moment is er evenveel zuur als base aanwezig in de oplossing. Wanneer je nu wat zuur toevoegt, daalt de pH van de oplossing een klein beetje, maar niet sterk. Voeg je meer zuur toe, dan zal de oplossing wel gaan dalen. Er zit een soort knik in deze lijn. Op die knik is alle geconjugeerde base in de buffer op (conjugate base exhausted). Wanneer je nog meer zuur toevoegt zal de pH wel sterk gaan dalen, omdat het zuur niet langer geneutraliseerd wordt door de buffer.

Wanneer je base toevoegt gebeurt er hetzelfde. Eerst verandert de pH van de buffer amper, maar op een gegeven moment is alle zuur in de oplossing op (conjugate acid exhausted). Wanneer je nog meer base toevoegt aan de oplossing, wordt deze niet langer meer geneutraliseerd door de buffer en stijgt de pH dus sterk.

Met de **buffercapaciteit** geven we aan hoeveel zuur en hoeveel base (in mol) er toegevoegd moet worden aan een buffer om een pH verandering van 1 punt te krijgen. Bij een buffer met evenveel zwak zuur als geconjugeerde base zal de buffercapaciteit voor zuur en base gelijk zijn. Maar bij buffers waarin veel van het zwak zuur en weinig geconjugeerde base aanwezig is, zal de buffercapaciteit voor base erg goed zijn, maar voor zuur juist erg slecht.

Buffers en buffercapaciteit



Figuur 24. Overzicht van zuren en basen in buffers.

In figuur 24 staat een overzicht van situaties waarin een buffer zich kan bevinden. In de tweede situatie is er evenveel zuur als base aanwezig in de oplossing (zie het balkje en het onderstaande beker glas). **Deze buffer kan evenveel zuur als base neutraliseren.** Deze situatie geldt **wanneer de pH gelijk is aan de pKa van het zuur**, zoals je in het hoofdstuk over de Henderson-Hasselbalch vergelijking geleerd hebt.

Wanneer je de pH van deze buffer verandert, dan verandert de verhouding tussen de hoeveelheid van het zwakke zuur en de geconjugeerde base. In het meest linkse plaatje is de pH hoger dan de pKa. Hierdoor is er meer van de geconjugeerde base aanwezig in de oplossing en minder van het zuur (zie het beker glas). Wanneer je nu een zuur aan deze buffer toevoegt, dan zij er zeer veel moleculen A⁻ die het zuur kunnen neutraliseren. Wanneer je echter een base toevoegt aan deze oplossing, dan zijn er maar zeer weinig moleculen HA aanwezig die de base kunnen neutraliseren. Dat betekent dus dat deze buffer **goed tegen zuren kan bufferen**, maar **niet goed tegen basen buffert**. Dit geldt dus **wanneer de pH groter is dan de pKa van het geconjugeerde zuur-basepaar in de buffer**.

In het derde figuur zie je het omgekeerde: in deze oplossing is veel zuur aanwezig en weinig van de geconjugeerde base. Dat betekent dat wanneer je zuur aan deze buffer toevoegt, er maar zeer weinig moleculen A⁻ aanwezig zijn om het zuur te neutraliseren. Wanneer je echter base aan deze

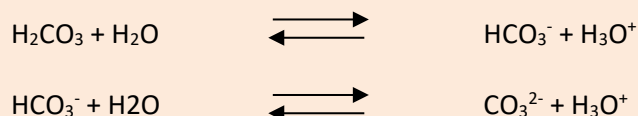
oplossing toevoegt, zijn er veel moleculen HA aanwezig die de base kunnen neutraliseren. Dat betekent dus dat deze buffer **goed tegen zuren kan bufferen**, maar **niet goed tegen basen buffert**. **Dit geldt dus wanneer de pH kleiner is dan de pKa van het geconjugeerde zuur-basepaar in de buffer.**

In het meest rechtse plaatje in **Figuur 2** zie je wat er gebeurt wanneer er meer van het zwakke zuur en de zwakke base aanwezig zijn in de oplossing. In de afbeelding is de pH gelijk aan de pKa en is er dus evenveel van het zuur als de base aanwezig. Dat betekent dus dat deze buffer zowel zuren als basen goed kan bufferen. In deze buffer zit echter twee keer zoveel zuur en base, wat betekent dat deze oplossing ook twee keer zoveel zuur en base kan neutraliseren dan de tweede oplossing. Er zijn namelijk meer moleculen aanwezig in de oplossing om toegevoegd sterk zuur en base te neutraliseren. Dat betekent dat de **buffercapaciteit** van deze oplossing dus groter is dan van de drie andere oplossingen. Dit zal dus de beste buffer zijn.

Meerwaardige zuren kunnen ook fungeren als buffers. In zo'n oplossing zijn er meerdere geconjugeerde zuur-baseparen mogelijk. Het zuur-base paar waarvan de pKa van het zuur het dichtst ligt bij de pH, zal bij deze pH de belangrijkste rol spelen in het bufferen.

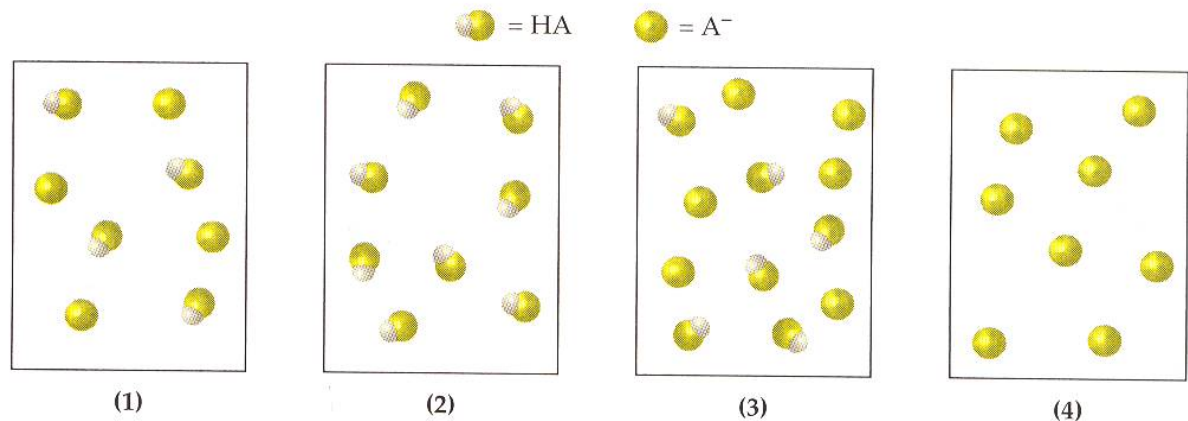
Voorbeeld

In bloed is een koolzuurbuffer aanwezig. In bloed is CO_2 aanwezig. CO_2 reageert met water tot H_2CO_3 , dit is een evenwichtsvergelijking. H_2CO_3 is een tweewaardig zuur. Geef de reactievergelijkingen van de dissociatie van dit zuur in water en geef aan welk geconjugeerd zuur-base paar er verantwoordelijk is voor het bufferen van het bloed.



De K_{a1} van H_2CO_3 $4,5 \cdot 10^{-7}$ en de K_{a2} van H_2CO_3 (dus de K_a van HCO_3^-) is $4,7 \cdot 10^{-11}$. De pKa's die hierbij horen zijn respectievelijk 6,35 en 10,33. Bij de pH van bloed (pH = 7,4) zal dus het eerste zuur-base paar de belangrijkste rol spelen bij het bufferen van het bloed (de pKa van het eerste zuur-base paar ligt het dichtst bij de pH). Het verschil is alsnog best groot (bijna 1 punt), wat betekent dat er dus ongeveer 10 keer meer HCO_3^- aanwezig zijn dan H_2CO_3 .

Oefeningen



1. a. Welke van de vier oplossingen in bovenstaande afbeelding zijn buffers?
b. Welke van deze oplossingen is de beste buffer? Leg uit waarom.
2. Je wilt een buffer maken met een pH van 5,0. Welke zuur-base paren zouden hiervoor geschikt zijn? (Kijk in de lijst met zuurconstanten die op blackboard staat)
3. Een andere buffer in het bloed is de fosfaatbuffer. Deze is gebaseerd op het driewaardige zuur H_3PO_4 ($K_{a1} = 7,3 \cdot 10^{-3}$, $K_{a2} = 6,2 \cdot 10^{-8}$, $K_{a3} = 4,8 \cdot 10^{-13}$).
 - a. Geef de drie reactievergelijkingen op van de dissociatie van H_3PO_4 .
 - b. Geef de $\text{p}K_a$ en $\text{p}K_b$ waarde van H_2PO_4^- .
 - c. H_2PO_4^- is een amfoliet. Als je H_2PO_4^- oplost in water, zal het zich dan als base of als zuur gedragen?
 - d. Bloed heeft een pH van 7,4. Welk geconjugeerd zuur-base paar is verantwoordelijk voor het bufferen van bloed?
 - e. Bereken de verhouding waarin dit zuur en de geconjugeerde base aanwezig zijn in bloed bij pH = 7,4.
 - f. Bij welke pH's zal deze fosfaatbuffer ook goed kunnen bufferen? Leg uit waarom.
4. **Je wilt een carbonaat-buffer maken met pH = 10,40. Bereken in welke molverhouding je de stoffen NaHCO_3 en Na_2CO_3 moet oplossen om een bufferoplossing te krijgen met pH = 10,40. Gegeven: $K_a(\text{H}_2\text{CO}_3) = 4,4 \cdot 10^{-7}$ en $K_a(\text{HCO}_3^-) = 5,6 \cdot 10^{-11}$.**
5. De pH van ons bloed mag niet buiten de grenzen 7,33 en 7,42 komen. Voortdurend wordt echter het *zuurvormende* oxide CO_2 (dat bij verbrandingsprocessen in ons lichaam ontstaat) aan het bloed afgegeven.
 - a. Hoe verklaar je het feit dat de pH van het bloed hierdoor toch niet daalt?
 - b. Als men aan water met pH 7,35 een zuur toevoegt, daalt de pH wèl. Bereken met hoeveel eenheden de pH daalt als men 0,10 liter 0,10 molair zoutzuur toevoegt aan 6,0 liter water met pH = 7,35.

6. Citroenen bevatten het driewaardige zuur citroenzuur ($\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7$). De pH van citroensap is 2,8. De K_a waarden van citroenzuur zijn $7,1 \cdot 10^{-4}$; $1,7 \cdot 10^{-5}$; $4,1 \cdot 10^{-7}$.
- Welk zuur-base paar is verantwoordelijk voor de buffering van citroensap?
 - Bereken het percentage ongedissocieerd citroenzuur ($\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7$) in citroensap.
 - Geef de pK_a en de K_b van $\text{C}_6\text{H}_6\text{O}_7^{2-}$
 - $\text{C}_6\text{H}_6\text{O}_7^{2-}$ is een amfoliet. Zal de pH > 7, <7 of gelijk aan 7 zijn wanneer je $\text{C}_6\text{H}_6\text{O}_7^{2-}$ oplost in water?
 - Met citroenzuur wordt een buffer gemaakt met pH = 7,4. Welk zuur-base paar is verantwoordelijk voor de bufferwerking van deze oplossing?
 - Zal de buffer bij vraag e meer geschikt zijn voor het bufferen van zuren of basen?
 - Je hebt een oplossing van 1 deciliter 1,0 M citroenzuur bij pH = 2,8. Hieraan voeg je 15 ml 10 M NaOH toe. Wat zal de pH van de oplossing worden?

Voorbeeld tentamenopgaven

Vraag 1

De meeste hortensias bevatten het pigment delphinide-glucoside. Dit pigment heeft een rose kleur, maar wordt blauw door binding van metalen (ijzer of aluminium). Om mooie blauwe bloemen te krijgen stopte mijn oma roestige spijkers bij de wortels van de plant, maar we kunnen natuurlijk ook direct een oplossing van ijzerfosfaat aan de plant toedienen.



- Bereken hoeveel gram ijzerfosfaat, $\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2$, je moet afwegen om 200 ml ijzerfosfaat-oplossing te maken die 150 mmol Fe^{2+} -ionen per liter bevat.
- De oplossing moet voor gebruik nog met een factor 2,5 verdund worden. Hoeveel water moet je dan toevoegen aan de 200 ml en wat is de molaire eindconcentratie $\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2$?

Voor blauwe hortensias is tuinaarde met een zuurgraad rond pH 5 gewenst. We besluiten daarom de plant nog met een acetaatbuffer te begieten.

- Leg uit waarom we hier liever een acetaatbuffer (K_a azijnzuur = $1,8 \cdot 10^{-5}$) kiezen dan een fosfaatbuffer ($K_a \text{H}_2\text{PO}_4^- = 6,2 \cdot 10^{-8}$).
- We maken 2 liter acetaatbuffer met pH 5,0 en een sterkte van 0,1 M (dus $[\text{CH}_3\text{COOH}] + [\text{CH}_3\text{COO}^-] = 0,1 \text{ M}$) door de juiste hoeveelheid vast natriumacetaat (CH_3COONa) en het juiste volume azijnzuur op te nemen in 2 liter water. Hoeveel gram natriumacetaat weeg je af en hoeveel ml azijnzuur (werkoplossing in de zuurkast is 4 M) heb je nodig?
- De werkoplossing van 4 M azijnzuur is helaas verbruikt. We halen nu de voorraadoplossing uit het magazijn. Het etiket vermeldt: acetic acid 99.8% (m/m), dichtheid $1050 \text{ g} \cdot \text{dm}^{-3}$, MW 60.05. Wat is de molaire concentratie van dit azijnzuur en hoeveel hebben we nodig om 2,5 liter van de werkoplossing (4 M) te maken?
- We mengen de ijzerfosfaatoplossing en de acetaatbuffer in de verhouding 20:75 (v/v). Bereken hoeveel je van de oplossingen nodig hebt om een gieter met 0,5 liter te vullen.

Vraag 2

Het buffersysteem $\text{H}_2\text{PO}_4^-/\text{HPO}_4^{2-}$ treffen we zowel in het bloed als in de urine aan. De belangrijkste taak van deze buffer is het reguleren van de pH van diverse vochtstromen in de nieren.

- Bereken de molverhouding waarin H_2PO_4^- en HPO_4^{2-} in bloed aanwezig zijn als gegeven is dat onder de heersende omstandigheden K_a van $\text{H}_2\text{PO}_4^- = 1,00 \cdot 10^{-7}$.
Neem voor bloed de pH waarde 7,30.
 - Een marathonloper produceert overmatig veel acetylazijnzuur, dat niet snel genoeg in het lichaam wordt omgezet in CO_2 en H_2O . Het zuur wordt daarom afgescheiden via de nieren. De hierdoor optredende zuurbelasting heeft tot gevolg dat 20% van het aanwezige HPO_4^{2-} wordt omgezet.
- Bereken de optredende pH-verandering.

Antwoorden

1. De gaswetten

1. 60 liter zuurstof
2a) $\text{C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_{11} + 12 \text{O}_2 \longrightarrow 12 \text{CO}_2 + 11 \text{H}_2\text{O}$
b) 12 mol zuurstof
c) 288 liter zuurstof
3. 4 liter CO_2

6. Molariteit

1. 19,4 mM ibuprofen
2. 0,20 M H_3PO_4
3. 1,5 gram NaCl
4. 534 milliliter water
5a. 6,8 M NaCl
5b. $7,21 \cdot 10^{23}$ natriumatomen
6a. $3,02 \cdot 10^{-2}$ M calcium
6b. 2,89 glazen melk
c. 2,6 liter melk per week
7a. 26 mg Li^+
7b. $8,12 \cdot 10^{-3}$ mol Li^+
7c. $5,41 \cdot 10^{-2}$ M Li^+
7d. 90 milliliter
8a. 37,5 mg natrium
8b. 3,8 gram zout
8c. 25,0 mmol natrium per dag
8d. 1,46 gram zout per dag
8e. 6,52% van de aanbevolen dagelijkse hoeveelheid
9a. 0,23 M sucrose
9b. 4,37 mg cafeïne
9c. $3,0 \cdot 10^{-3}$ mol aspartaam
9d. 12 mol suiker
9e. $2,0 \cdot 10^{-2}$ mol aspartaam
9f. Aangezien de berekening bij 9d aangeeft dat de molverhouding ongeveer 1:12 zou zijn als het zoetje volledig uit aspartaam bestaat, is het zeer onwaarschijnlijk dat het zoetje volledig uit aspartaam bestaat. Het maakt wel wat uit of je in gram of mol rekent, want de molmassa's van sucrose en aspartaam verschillen ongeveer 15% van elkaar. Maar ook als je uit gaat van grammen in plaats van mollen is het nog zeer onwaarschijnlijk dat een zoetje volledig uit aspartaam bestaat.

7. Percentages, promillages, etc.

1. 2 μg chroom
2. 5,8% (m/v) NaCl
3. 1,04 g alcohol
4a. 1,5 ppb lood
4b. $4,4 \cdot 10^{15}$ moleculen Pb
5a. 3,15 gram NaCl
5b. 0,15 M NaCl
6. 3 mg gluten
7. 458 gram van de 50% oplossing
8a. $8,0 \cdot 10^{15}$ As atomen

8b. $3,1 \cdot 10^{-7}$ M is 23,2 ppb. De veiligheidsnorm is 10 ppb, dus dit water bevat 2,3 keer te veel ppb.
 Andersom: de veiligheidsnorm is 10 ppb, dat is gelijk aan $1,33 \cdot 10^{-7}$ M.
 8c. 4,7 pints

8. Verdunningen

- 1a. 0,60 g IPTG
- b. 2,5 μ l stockoplossing IPTG
- 2a. 150 ml stockoplossing
- 2b. 1,5 ml stockoplossing
- 2c. 1 μ l stockoplossing
- 3a. 3,6 ml glucoseoplossing (concentratie stock = 0,2775 M)
- 3b. 6,4 ml water
- 4a. 28 mmol natriumlactaat, 1,5 mmol CaCl_2 , 4 mmol KCl, 102 mmol NaCl
- 4b. 0,73 l Ringeroplossing
- 5a. 2000 μ g/ml BSA
- 5b. 750 μ l van de stockoplossing

$$\begin{aligned} C_1 &= 2000 \mu\text{g/ml} \\ C_2 &= 1500 \mu\text{g/ml} \\ V_1 &= \text{onbekend (noemen we x)} \\ V_2 &= V_1 + 250 \mu\text{l (dus } V_2 = x + 250) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} C_1 \cdot V_1 &= C_2 \cdot V_2 \\ 2000 \cdot x &= 1500 \cdot (x + 250) \\ \text{beide kanten } /1500: & 1,333... x = x + 250 \\ \text{beide kanten } - 1x: & 0,3333... x = 250 \\ \text{beide kanten } /0,3333 & x = 750 \end{aligned}$$

5c.

	Eindconcentratie (μ g/ml)	Volume water	Toevoegen aan
A	1500	250 μ l	750 μ l van stock
B	1000	625 μ l	625 μ l van stock
C	750	310 μ l	310 μ l van A
D	500	625 μ l	625 μ l van B
E	250	625 μ l	625 μ l van D
F	125	625 μ l	625 μ l van E
G	25	800 μ l	200 μ l van F
H	5	800 μ l	200 μ l van G
I	1	800 μ l	200 μ l van H
J	0	1000 μ l	0

- 6a. 7292 keer
- 6b. 36 gram zeewater
- 7a. 115 ml water
- 7b. 5 μ l van de 200 mM oplossing + 3,995 ml water
- 8a. 9,1 M alcohol in whisky

8b. percentage niet opgenomen = 71%

10. Enthalpie

1. Exotherm, want bij de verbranding van glucose komt energie vrij.
2. Exotherm, want naast de producten ontstaat er energie.
3. Endotherm, want er wordt warmte uit de omgeving (het water) onttrokken. Dit is ook logisch, want je verbreekt de waterstofbruggen die zorgen voor de verbindingen tussen de watermoleculen in ijs.
4. De reactie is endotherm, want licht is de energiebron. Bij een endotherme reactie is ΔH positief (er gaat energie het systeem in).
5. Exotherm, want er wordt energie afgestaan vanuit het systeem aan de omgeving.
- 6a. Joule of calorie
- b. H is het potentiële energieniveau van een molecuul. ΔH is de energie**verandering** tijdens een reactie. Dit is dus het verschil in potentiële energie van de producten tov de reactanten.
- c. Zie figuur 9b. Op de x-as staat de reactievoortgang en op de y-as de potentiële energie, oftewel de enthalpie.

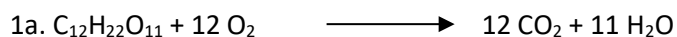
11. Entropie

1. De entropie wordt groter, want de hoeveelheid moleculen neemt toe. Bovendien wordt een vloeistof omgezet in gassen en gassen hebben ook een grotere entropie dan vloeistoffen.
2. Waterdamp, want een gas heeft een hogere entropie dan een vloeistof.
3. Entropie is chaos/wanorde.

12. Gibbs vrije energie

- 1a. De reactie is endotherm, dus ΔH is positief. De enthalpie van de producten is dus hoger dan de enthalpie van de reactanten.
- b. De meeste endotherme reacties verlopen niet spontaan, maar er zijn uitzonderingen.
- c. Dat kan alleen als de entropie voldoende toeneemt.
- d. De toename van entropie is de reden dat deze reactie spontaan verloopt. Door de temperatuur te verhogen wordt $T\Delta S$ groter de kans dat $T\Delta S$ dan groter wordt dan ΔH , en ΔG dus negatief wordt is dan groter (de rol van ΔS wordt groter naarmate de temperatuur hoger wordt). Dus de temperatuur verhogen zal mogelijk wel leiden tot het oplossen van Al_2O_3 .

13. De bomcalorimeter



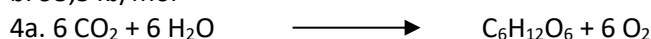
b. 5664 kJ/mol

c. Een sucrose molecuul heeft ongeveer dezelfde type bindingen, maar dan wel ongeveer twee keer zoveel bindingen. Het is dus zeker te verwachten dat sucrose **per mol** veel meer energie bevat. Wanneer je de verbrandingswaarde van glucose en sucrose **per gram** uitrekent, komen de waarden veel meer met elkaar overeen.

2. 72 °C.

3a. 0,200 Cal/g

b. 95,3 kJ/mol



b. endotherm

c. 1,3 gram water

14. Reactiesnelheid

- 1a. verlagen temperatuur om reactiesnelheid te verlagen
- b. Verminderen van de O_2 concentratie om oxidatie door zuurstof uit de lucht te voorkomen
- c. Verhogen van concentraties om het bleekproces te versnellen.

- d. Verminderen van de hoeveelheid water om groei van bacteriën en schimmels te voorkomen.
- e. Verminderen van de concentratie zuurstof/water om ontleding/oxidatie te voorkomen.
- f. Verlagen van de zuurstofconcentratie
- g. Verlagen van de temperatuur om reactiesnelheid te verlagen
- h. Verlagen van de zuurstofconcentratie
- 2a. $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} + 3 \text{O}_2 \longrightarrow 2 \text{CO}_2 + 3 \text{H}_2\text{O}$
- b. reactiesnelheid = $k \cdot [\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}]^a \cdot [\text{O}_2]^b$
- c. Nee, want bij een nulde reactieorde heeft de concentratie van de stof geen invloed op de reactiesnelheid.
- d. 2
- e. 1
- f. reactiesnelheid = $k \cdot [\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}]^1 \cdot [\text{O}_2]^2 = k \cdot [\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}] \cdot [\text{O}_2]^2$
- g. even snel, want bij een nulde reactieorde heeft de concentratie van de stof geen invloed op de reactiesnelheid.

Voorbeeld tentamenvragen

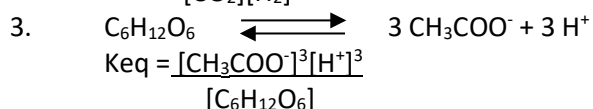
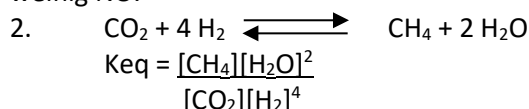
- 1a. 0,229 Cal/g
- b. - 109 kJ/mol
- 2a. 0,200 Cal/g
- b. 0,836 kJ/g
- 3a. 9684 pillen ATP
- b. 3,74 kcal/g
- c. 12,8 L lucht
- d. 62,8 °C

15. Evenwichtsreacties



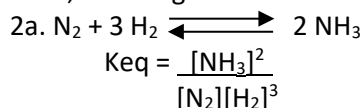
1b.
$$\text{Keq} = \frac{[\text{NO}]^4}{[\text{N}_2\text{O}]^2[\text{O}_2]}$$

1c. Keq is erg klein, dus er zal relatief veel N_2O en O_2 aanwezig zijn in de evenwichtssituatie en erg weinig NO.



16. Rekenen aan evenwichtsreacties

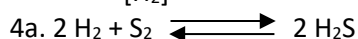
1a. $5,64 \cdot 10^{-11}$ gram calciumoxide



2b. $Q = 2379$ (denk om het omrekenen naar concentraties). $Q > K$, dus de reactie zal naar links verschuiven.

3a. De evenwichtsconstante is heel klein, dus je verwacht dat er in de evenwichtssituatie erg weinig van het product (H) en erg veel van de reactant (H_2) zal zijn.

3b.
$$\text{Keq} = \frac{[\text{H}]^2}{[\text{H}_2]}$$



$$K_{eq} = \frac{[H_2S]^2}{[H_2]^2 [S_2]}$$

4b. $K_{eq} = 1,1 \cdot 10^7$

5. $Q = 889 < 6,9 \cdot 10^5$

De reactie naar rechts tijdelijk sneller verloopt dan de reactie naar links, dus het evenwicht zal naar rechts verschuiven.

17. Het principe van LeChatelier

1a. rechts

1b. links

2a. links

2b. links

2c. rechts

2d. niets

3a. evenwicht 1 verschuift naar rechts

3b. concentratie van A verandert niet (blijft gelijk)

3c. Dan zou de concentratie van A toenemen.

4a. Beide evenwichten verschuiven naar rechts.

4b. Evenwicht 1 verschuift naar links en evenwicht 2 verschuift naar rechts

Voorbeeld tentamenvraag

a. 0,01 mol/l

b. $K = 4$

c.

1. rechts

2. geen effect

3. links

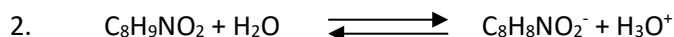
4. ew verschuift niet

d. Situatie 3: K is lager

18. Zuren

1a. Een zuur is een stof die een H^+ kan afstaan (dissociatie van H^+)

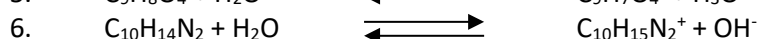
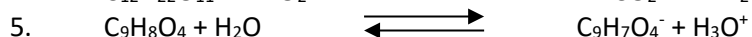
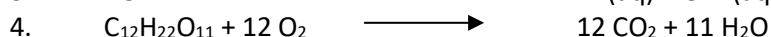
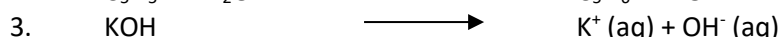
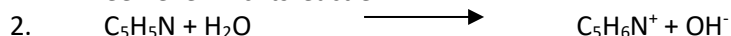
b. Een sterk zuur dissocieert volledig (aflopende reactie), bij een zwak zuur is de dissociatie een evenwichtsreactie.



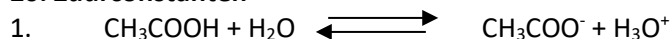
19. Basen

1a. Een base is een stof die een H^+ kan opnemen

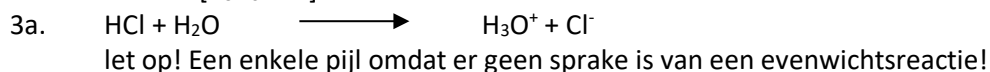
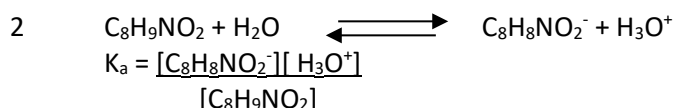
b. Een sterke base dissocieert volledig (aflopende reactie), bij een zwakke base is de dissociatie een evenwichtsreactie.



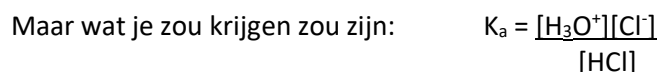
20. Zuurconstanten



$$K_a = \frac{[CH_3COO^-][H_3O^+]}{[CH_3COOH]}$$

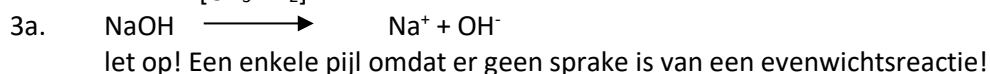
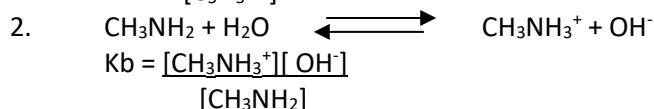
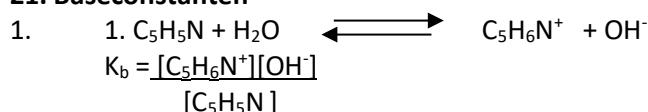


Je kunt dus ook geen goede evenwichtsvoorwaarde opstellen, omdat er geen sprake is van een evenwicht.

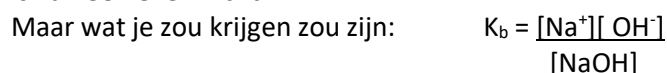


- b. $K_a \gg 1$ (oftewel K_a is heel erg groot)
 4. aspirine (heeft een grotere K_a)

21. Baseconstanten



Je kunt dus eigenlijk ook geen goede evenwichtsvoorwaarde opstellen, omdat er geen sprake is van een evenwicht.

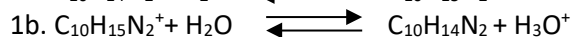
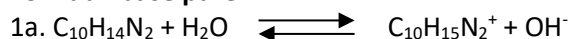


- b. $K_b \gg 1$ (oftewel K_b is heel erg groot)
 4. ethylamine

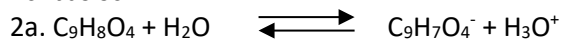
22. De waterconstante

- 1a. $1,3 \cdot 10^{-10} \text{ M OH}^-$
 1b. zuur
 2a. $3,2 \cdot 10^{-10} \text{ M H}_3\text{O}^+$
 2b. basisch
 3a. $2,7 \cdot 10^{-3} \text{ M OH}^-$
 3b. basisch

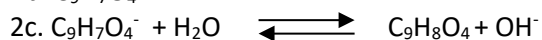
23. Zuur-base paren



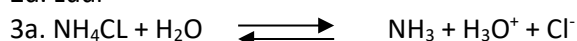
1c. basisch



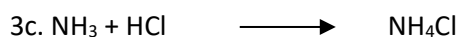
2b. $\text{C}_9\text{H}_7\text{O}_4^-$



2d. zuur



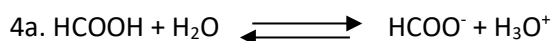
3b. zuur



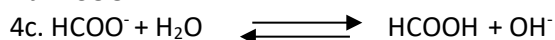
3d. $1,9 \cdot 10^4 \text{ mol ammonia}$ en $1,9 \cdot 10^4 \text{ mol zoutzuur}$.

3e. $457 \text{ m}^3 \text{ zoutzuur}$

3f. $442 \text{ m}^3 \text{ ammonia}$

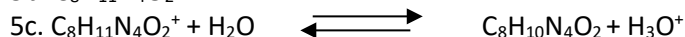
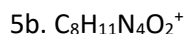
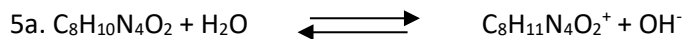


$$K_a = \frac{[\text{HCOO}^-][\text{OH}^-]}{[\text{HCOOH}]}$$



4d. $K_b = \frac{[\text{HCOOH}][\text{OH}^-]}{[\text{HCOO}^-]}$

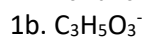
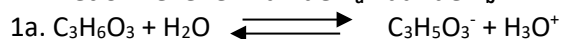
baseconstante.



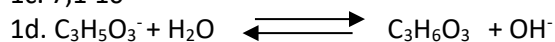
5d. $K_a = \frac{[\text{C}_8\text{H}_{10}\text{N}_4\text{O}_2][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{C}_8\text{H}_{11}\text{N}_4\text{O}_2^+]}$

Zuurconstante, want de reactie betreft de dissociatie van een zuur.

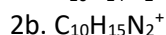
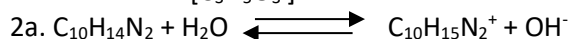
24. Het omrekenen van de K_a naar de K_b



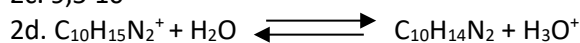
1c. $7,1 \cdot 10^{-11}$



$$K_b = \frac{[\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_3][\text{OH}^-]}{[\text{C}_3\text{H}_5\text{O}_3^-]}$$



2c. $9,5 \cdot 10^{-9}$



$$K_a = \frac{[\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{C}_{10}\text{H}_{15}\text{N}_2^+]}$$

25. Rekenen met pH en pOH

1a. $\text{pOH} = 9,3$; $[\text{H}_3\text{O}^+] = 2,0 \cdot 10^{-5} \text{ M}$; $[\text{OH}^-] = 5,0 \cdot 10^{-10} \text{ M}$;

1b. Oplossing is zuur

2a. $\text{pH} = 1,4$; $\text{pOH} = 12,6$; $[\text{OH}^-] = 2,6 \cdot 10^{-13} \text{ M}$;

2b. Oplossing is zuur

3a. $[\text{H}_3\text{O}^+] = 1,58 \cdot 10^{-12} \text{ M}$; $\text{pOH} = 2,2$; $[\text{OH}^-] = 6,3 \cdot 10^{-3} \text{ M}$;

3b. Oplossing is basisch

4a. $\text{pH} = 9,3$; $[\text{H}_3\text{O}^+] = 5,01 \cdot 10^{-10} \text{ M}$;

4b. Oplossing is basisch

5a. $\text{pH} = 2,2$, $\text{pOH} = 11,8$

5b. Oplossing is zuur

26. Het oplossen van een sterk zuur of een sterke base in water



1b. $\text{pH} = 1,5$



2b. $[\text{OH}^-] = 4,0 \text{ M}$

2c. $\text{pH} = 14,6$

2d. $[\text{H}_3\text{O}^+] = 2,5 \cdot 10^{-15} \text{ M}$

3a. $3,9 \cdot 10^{-2} \text{ mol HI}$

3b. $7,8 \cdot 10^{-2} \text{ M HI}$



- 3d. pH = 1,1
 4a. 0,79 M NaOH
 4b. pH = 14
 5a. $[\text{OH}^-] = 6,3 \cdot 10^{-5} \text{ M}$
 5b. 8,9 mg KOH
 6. 34 mg HCl

27. Rekenen aan het oplossen van een zwak zuur of een zwakke base in water

1. pH = 2,1
 2a. 5,6 mmol aspirine
 2b. $5,6 \cdot 10^{-2} \text{ M}$ aspirine
 2c. $\text{C}_9\text{H}_8\text{O}_4 + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{C}_9\text{H}_7\text{O}_4 + \text{H}_3\text{O}^+$
 2d. -
 2e. x mag verwaarloosd worden ($C_{\text{HA}}/K_a = 168$).
 2f. $K_a = x^2/5,55 \cdot 10^{-2} \text{ M}$
 2g. $x = 4,3 \cdot 10^{-3}$
 2h. $4,3 \cdot 10^{-3} \text{ M H}_3\text{O}^+$
 2i. pH = 2,4
 3a. $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_3 + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{C}_3\text{H}_5\text{O}_3^- + \text{H}_3\text{O}^+$

$$K_a = \frac{[\text{C}_3\text{H}_5\text{O}_3^-][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_3]}$$

 3b. $5,6 \cdot 10^{-2} \text{ M}$ melkzuur
 3c. Je mag x verwaarlozen ($C_{\text{HA}}/K_a = 402$)
 3d. pH = 2,6
 4a. $\text{HCOOH} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{HCOO}^- + \text{H}_3\text{O}^+$

$$K_a = \frac{[\text{HCOO}^-][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{HCOOH}]}$$

 4b. $K_a = 1,70 \cdot 10^{-4}$
 4c. pH = 2,6
 5a. $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{C}_3\text{H}_5\text{O}_2^- + \text{H}_3\text{O}^+$

$$K_a = \frac{[\text{C}_3\text{H}_5\text{O}_2^-][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2]}$$

 5b. pH = 2,4
 6a. $\text{NH}_3 + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{NH}_4^+ + \text{OH}^-$
 6b. $K_b = \frac{[\text{OH}^-][\text{NH}_4^+]}{[\text{NH}_3]}$
 6c. $[\text{OH}^-] = 2,9 \cdot 10^{-3} \text{ M}$
 6d. pOH = 2,5
 6e. pH = 11,5
 7a. $\text{C}_6\text{H}_5\text{NO}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{C}_6\text{H}_6\text{NO}_2^+ + \text{OH}^-$
 7b. $K_b = \frac{[\text{C}_6\text{H}_6\text{NO}_2^+][\text{OH}^-]}{[\text{C}_6\text{H}_5\text{NO}_2]}$
 pH = 7,1
 7c. Ja, want aniline is een heel zwakke base (met een heel lage K_b) en je lost ook nog eens maar heel weinig van deze stof op. Er zal zeer weinig OH^- gevormd worden en de pH zal dus amper stijgen.
 8a. $\text{C}_{21}\text{H}_{22}\text{N}_2\text{O}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{C}_{21}\text{H}_{23}\text{N}_2\text{O}_2^+ + \text{OH}^-$

$$K_b = \frac{[\text{C}_{21}\text{H}_{23}\text{N}_2\text{O}_2^+][\text{OH}^-]}{[\text{C}_{21}\text{H}_{22}\text{N}_2\text{O}_2]}$$

 8b. pH = 9,1
 8c. 12,3 ml

28. zuur-base reacties

1. $\text{KOH} + \text{HCl} \longrightarrow \text{KCl} + \text{H}_2\text{O}$
2. $\text{KOH} + \text{C}_9\text{H}_8\text{O}_4 \longrightarrow \text{K}^+ + \text{C}_9\text{H}_7\text{O}_4^- + \text{H}_2\text{O}$
3. $\text{C}_{13}\text{H}_{18}\text{O}_2 + \text{C}_8\text{H}_9\text{NO}_2 \rightleftharpoons \text{C}_{13}\text{H}_{17}\text{O}_2^- + \text{C}_8\text{H}_{10}\text{NO}_2^+$

Antwoorden voorbeeld tentamenvragen

Vraag 1.

- (a) $\text{CaCO}_3 + 2 \text{H}_3\text{O}^+ \rightarrow \text{Ca}^{2+} + 3 \text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2$
- (b) HCl is een sterk zuur en CH_3COOH is een zwak zuur. Beiden hebben een pH van 2,50, dus $[\text{H}_3\text{O}^+]$ is bij beiden even groot. Echter, omdat CH_3COOH een zwak zuur is, fungeert dit als een 'voorraadvat' van H_3O^+ : het evenwicht verschuift steeds verder naar rechts als er base wordt toegevoegd. Dus: er lost meer CaCO_3 op in azijnzuur oplossing **2** dan in zoutzuur oplossing **1**.
- (c) Het wordt $10^6 \times$ verdund, dus $[\text{H}_3\text{O}^+]$ wordt $3,2 \cdot 10^{-9} \text{ mol/L}$
 Dan zou de $\text{pH} = -\log[\text{H}_3\text{O}^+] = 8,5$ worden, maar dit kan niet want we hebben hier te maken met een zuur, dus wordt de pH 7, omdat alleen het waterevenwicht bepalend is.

Vraag 2.

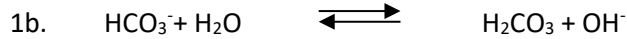
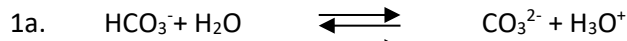
- a. 0.0152 M
- pH = 3.11
- b. 0,57 ml
- c. 8333%
- d. 4,5 gram

29. Meerwaardige zuren

- 1a. $\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7 + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{C}_6\text{H}_7\text{O}_7^- + \text{H}_3\text{O}^+$
 $\text{C}_6\text{H}_7\text{O}_7^- + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{C}_6\text{H}_6\text{O}_7^{2-} + \text{H}_3\text{O}^+$
 $\text{C}_6\text{H}_6\text{O}_7^{2-} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{C}_6\text{H}_5\text{O}_7^{3-} + \text{H}_3\text{O}^+$
- 1b. $K_{a1} = \frac{[\text{C}_6\text{H}_7\text{O}_7^-][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7]}$
 $K_{a2} = \frac{[\text{C}_6\text{H}_6\text{O}_7^{2-}][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{C}_6\text{H}_7\text{O}_7^-]}$
 $K_{a3} = \frac{[\text{C}_6\text{H}_5\text{O}_7^{3-}][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{C}_6\text{H}_6\text{O}_7^{2-}]}$
- 1c. $\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7$ (zuur) en $\text{C}_6\text{H}_7\text{O}_7^-$ (geconjugeerde base)
 $\text{C}_6\text{H}_7\text{O}_7^-$ (zuur) en $\text{C}_6\text{H}_6\text{O}_7^{2-}$ (geconjugeerde base)
 $\text{C}_6\text{H}_6\text{O}_7^{2-}$ (zuur) en $\text{C}_6\text{H}_5\text{O}_7^{3-}$ (geconjugeerde base)
- 1d. $\text{C}_6\text{H}_5\text{O}_7^{3-} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{C}_6\text{H}_6\text{O}_7^{2-} + \text{OH}^-$
 $\text{C}_6\text{H}_6\text{O}_7^{2-} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{C}_6\text{H}_7\text{O}_7^- + \text{OH}^-$
 $\text{C}_6\text{H}_7\text{O}_7^- + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7 + \text{OH}^-$
- 1e. $K_{b1} = \frac{[\text{C}_6\text{H}_6\text{O}_7^{2-}][\text{OH}^-]}{[\text{C}_6\text{H}_5\text{O}_7^{3-}]}$
 $K_{b2} = \frac{[\text{C}_6\text{H}_7\text{O}_7^-][\text{OH}^-]}{[\text{C}_6\text{H}_6\text{O}_7^{2-}]}$
 $K_{b3} = \frac{[\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7][\text{OH}^-]}{[\text{C}_6\text{H}_7\text{O}_7^-]}$
- 1f. K_{b2} , want $\text{C}_6\text{H}_6\text{O}_7^{2-}$ reageert als base in de tweede reactie van de basen. En K_{a3} , want $\text{C}_6\text{H}_6\text{O}_7^{2-}$ reageert als zuur in de derde reactie van de zuren.
- 2a. $\text{H}_2\text{SO}_4 + \text{H}_2\text{O} \longrightarrow \text{HSO}_4^- + \text{H}_3\text{O}^+$
 $\text{HSO}_4^- + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{SO}_4^{2-} + \text{H}_3\text{O}^+$

- 2b. $K_{a1} = \frac{[\text{HSO}_4^-][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{H}_2\text{SO}_4]}$
 $K_{a2} = \frac{[\text{SO}_4^{2-}][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{HSO}_4^-]}$
- 2c. H_2SO_4 (zuur) en HSO_4^- (geconjugeerde base)
 HSO_4^- (zuur) en SO_4^{2-} (geconjugeerde base)
- 2d. $\text{SO}_4^{2-} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{HSO}_4^- + \text{OH}^-$
 $\text{HSO}_4^- + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{SO}_4 + \text{OH}^-$
- 2e. $K_{b1} = \frac{[\text{HSO}_4^-][\text{OH}^-]}{[\text{SO}_4^{2-}]}$
 $K_{b2} = \frac{[\text{H}_2\text{SO}_4][\text{OH}^-]}{[\text{HSO}_4^-]}$
- 2f. K_{a2} , want HSO_4^- reageert als zuur in de tweede reactie van de zuren. En K_{b2} , want HSO_4^- reageert als base in de tweede reactie van de basen.
- 2g. Dat betekent dat H_2SO_4 een sterk zuur (en HSO_4^- is een zwak zuur)
- 3a. $\text{Na}^+ + \text{CO}_3^{2-} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{HCO}_3^- + \text{OH}^- + \text{Na}^+$
Het natrium kun je wegstrepen uit de reactie. Het doet verder niets met de reactie (= toeschouwer) en je kunt hem daarom wegstrepen. Dit maakt het opstellen van de evenwichtsvoorwaarde een stuk overzichtelijker
 $\text{HCO}_3^- + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{CO}_3 + \text{OH}^-$
- 3b. $K_{b1} = \frac{[\text{HCO}_3^-][\text{OH}^-]}{[\text{CO}_3^{2-}]}$
 $K_{b2} = \frac{[\text{H}_2\text{CO}_3][\text{OH}^-]}{[\text{HCO}_3^-]}$
- 3c. CO_3^{2-} (base) en HCO_3^- (geconjugeerde zuur)
 HCO_3^- (base) en H_2CO_3 (geconjugeerde zuur)
- 3d. $\text{H}_2\text{CO}_3 + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{HCO}_3^- + \text{H}_3\text{O}^+$
 $\text{HCO}_3^- + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{CO}_3^{2-} + \text{H}_3\text{O}^+$
- 3e. $K_{a1} = \frac{[\text{HCO}_3^-][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{H}_2\text{CO}_3]}$
 $K_{a2} = \frac{[\text{CO}_3^{2-}][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{HCO}_3^-]}$
- 3f. K_{a2} , want HCO_3^- reageert als zuur in de tweede reactie van de zuren. En K_{b2} , want HCO_3^- reageert als base in de tweede reactie van de basen.
- 4a. $\text{C}_2\text{O}_4^{2-} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{HC}_2\text{O}_4^- + \text{OH}^-$
 $\text{HC}_2\text{O}_4^- + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4 + \text{OH}^-$
- 4b. $K_{b1} = \frac{[\text{HC}_2\text{O}_4^-][\text{OH}^-]}{[\text{C}_2\text{O}_4^{2-}]}$
 $K_{b2} = \frac{[\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4][\text{OH}^-]}{[\text{HC}_2\text{O}_4^-]}$
- 4c. $\text{C}_2\text{O}_4^{2-}$ (base) en HC_2O_4^- (geconjugeerde zuur)
 HC_2O_4^- (base) en $\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4$ (geconjugeerde zuur)
- 4d. $\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4 + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{HC}_2\text{O}_4^- + \text{H}_3\text{O}^+$
 $\text{HC}_2\text{O}_4^- + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{C}_2\text{O}_4^{2-} + \text{H}_3\text{O}^+$
- 4e. $K_{a1} = \frac{[\text{HC}_2\text{O}_4^-][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4]}$
 $K_{a2} = \frac{[\text{C}_2\text{O}_4^{2-}][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{HC}_2\text{O}_4^-]}$
- 4f. K_{b1} , want $\text{C}_2\text{O}_4^{2-}$ reageert in de eerste reactie van de basen als base. $\text{C}_2\text{O}_4^{2-}$ heeft geen K_a , want het is geen zuur.

30. Amfolieten



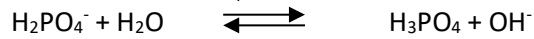
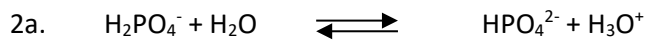
1c. $K_a = \frac{[\text{CO}_3^{2-}][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{HCO}_3^-]}$

$K_b = \frac{[\text{H}_2\text{CO}_3][\text{OH}^-]}{[\text{HCO}_3^-]}$

1d. De K_a van HCO_3^- is de K_{a2} van $\text{H}_2\text{CO}_3 = 5,6 \cdot 10^{-11}$

1e. De K_b kun je omrekenen uit de K_{a1} van H_2CO_3 ($4,3 \cdot 10^{-7}$). $K_b = 2,3 \cdot 10^{-8}$

1f. Als base, want de K_b is groter dan de K_a .



2b. $K_a = \frac{[\text{HPO}_4^{2-}][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{H}_2\text{PO}_4^-]}$

$K_b = \frac{[\text{H}_3\text{PO}_4][\text{OH}^-]}{[\text{H}_2\text{PO}_4^-]}$

2c. $K_a = 6,2 \cdot 10^{-8}$

$K_b = 1,6 \cdot 10^{-7}$

2d. Als base, want de K_b is groter dan de K_a .

3. $K_a = 1,7 \cdot 10^{-5}$; $K_b = 1,4 \cdot 10^{-11}$. Als zuur.

31. De Henderson Hasselbalch-vergelijking

1a. $\frac{[\text{CH}_3\text{COO}^-]}{[\text{CH}_3\text{COOH}]} = \frac{1,8 \cdot 10^3}{1}$

oftewel: $\begin{array}{ccc} [\text{CH}_3\text{COO}^-] & : & [\text{CH}_3\text{COOH}] \\ 1,8 \cdot 10^3 & : & 1 \end{array}$

1b. percentage $\text{CH}_3\text{COO}^- = 99,9\%$

2a. $\frac{[\text{CH}_3\text{COO}^-]}{[\text{CH}_3\text{COOH}]} = \frac{1}{1}$

oftewel: $\begin{array}{ccc} [\text{CH}_3\text{COO}^-] & : & [\text{CH}_3\text{COOH}] \\ 1 & : & 1 \end{array}$

2b. $\frac{[\text{CH}_3\text{COO}^-]}{[\text{CH}_3\text{COOH}]} = \frac{1}{10}$

oftewel: $\begin{array}{ccc} [\text{CH}_3\text{COO}^-] & : & [\text{CH}_3\text{COOH}] \\ 1 & : & 10 \end{array}$

2c. $\frac{[\text{CH}_3\text{COO}^-]}{[\text{CH}_3\text{COOH}]} = \frac{501}{10}$

oftewel: $\begin{array}{ccc} [\text{CH}_3\text{COO}^-] & : & [\text{CH}_3\text{COOH}] \\ 501 & : & 10 \end{array}$

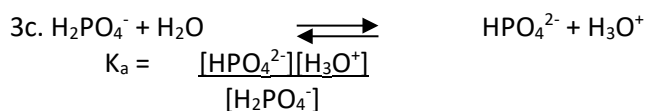
2d. $\frac{[\text{CH}_3\text{COO}^-]}{[\text{CH}_3\text{COOH}]} = 3,98 \cdot 10^{-4} = \frac{1}{2512}$

oftewel: $\begin{array}{ccc} [\text{CH}_3\text{COO}^-] & : & [\text{CH}_3\text{COOH}] \\ 2512 & : & 1 \end{array}$

2e. in mol. Dus wanneer je deze stoffen af moet wegen, zul je nog om moeten rekenen naar gram.

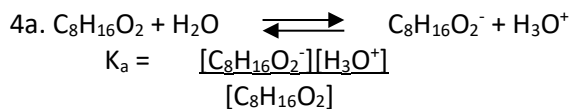
3a. 28 mM HPO_4^{2-} en 44 mM H_2PO_4^-

3b. H_2PO_4^- (zuur) en HPO_4^{2-} (base)



3d. $K_a = 6,2 \cdot 10^{-8}$, $\text{p}K_a = 7,2$

3e. $\text{pH} = 7,0$



4b. molariteit valproïnezuur = $3,46 \cdot 10^{-2}\text{M}$, $\text{pH} = 3,13$

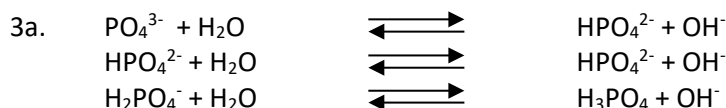
4c. 0,063 % $\text{C}_8\text{H}_{16}\text{O}_2$

32. Buffers

1a. oplossingen 1 en 3

1b. oplossing 3 (grotere buffercapaciteit)

2. bijvoorbeeld azijnzuur ($K_a = 1,8 \cdot 10^{-5}$) of citroenzuur ($K_{a2} = 1,7 \cdot 10^{-5}$). Alle zuren met een K_a in de buurt van $1,0 \cdot 10^{-5}$ zijn in principe geschikt, maar het liefst niet te duur en niet te giftig.



3b. $\text{p}K_a = 7,2$; $K_b = 1,4 \cdot 10^{-12}$

3c. als zuur

3d. HPO_4^{2-} (zuur) en H_2PO_4^- (base)

3e. $[\text{HPO}_4^{2-}] : [\text{H}_2\text{PO}_4^-]$
 $1,56 : 1$

3f. bij $\text{pH} = 2,1$ en $\text{pH} = 12,3$

4. Het belangrijkste zuur-base paar voor de buffering bij $\text{pH} = 10,40$ is HCO_3^- (zuur) en CO_3^{2-} (base).

$[\text{CO}_3^{2-}] : [\text{HCO}_3^-]$
 $1,41 \text{ mol} : 1 \text{ mol}$

5a. Omdat het bloed gebufferd is. Bovendien wordt het CO_2 ook weer afgevoerd via de longen.

5b. pH wordt 2,8. Dat betekent een pH -sprong van -4,6.

6a. $\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7$ (zuur) en $\text{C}_6\text{H}_7\text{O}_7^-$ (base)

6b. percentage $\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7 = 69 \%$

6c. $\text{p}K_a = 6,4$; $K_b = 5,9 \cdot 10^{-10}$

6d. als zuur

6e. $\text{C}_6\text{H}_6\text{O}_7^{2-}$ en $\text{C}_6\text{H}_5\text{O}_7^{3-}$.

6f. Meer geschikt voor het bufferen van zuren.

6g. $\text{pH} = 5,4$

Voorbeeld tentamenvragen

Vraag 1

a. 3.57 g afwegen

b. 300 ml water

20 mM

c. Je kiest buffersysteem met $\text{p}K_a$ in de buurt van gewenste pH .

pKa azijnzuur = 4.74

d. 10,66 g NaAc

zuur: 17,5 ml

e. 17,45 M

0,573 liter

f. 0,105 l FeP oplossing

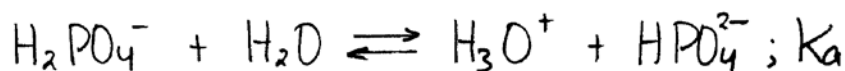
0.395 l acetaatbuffer

Vraag 2

zie volgende pagina.

Vraag 2

a) Er heerst in bloed het volgende evenwicht:



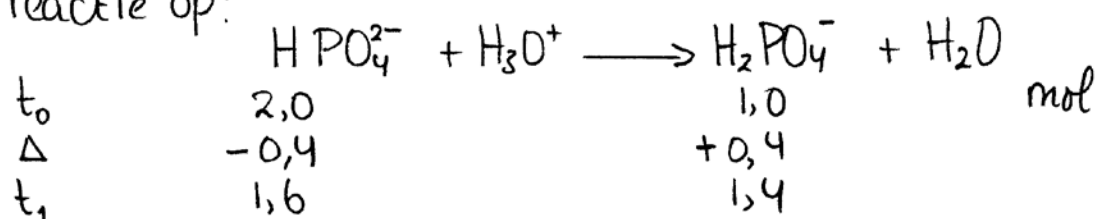
Er geldt $[\text{H}_3\text{O}^+] \times \frac{[\text{HPO}_4^{2-}]}{[\text{H}_2\text{PO}_4^-]} = K_a = 1,00 \times 10^{-7}$

$\text{pH} = 7,30 \longrightarrow [\text{H}_3\text{O}^+] = 10^{-\text{pH}} = 5,0 \times 10^{-8}$; invullen

Levert op $\frac{[\text{HPO}_4^{2-}]}{[\text{H}_2\text{PO}_4^-]} = \frac{K_a}{[\text{H}_3\text{O}^+]} = \frac{1,0 \times 10^{-7}}{5,0 \times 10^{-8}} = 2,0$

$n_{\text{HPO}_4^{2-}} : n_{\text{H}_2\text{PO}_4^-} = 2,0 : 1,0$

b) Door de extra H_3O^+ treedt de volgende reactie op:



invullen in ew-voorwaarde:

$$[\text{H}_3\text{O}^+] \times \frac{1,6}{1,4} = 1,0 \times 10^{-7} \longrightarrow [\text{H}_3\text{O}^+] = 8,75 \times 10^{-8} \text{ M}$$

$\text{pH} = 7,06$

$\Delta \text{pH} = -0,24$