

Säure-Base-Reaktionen und Puffer



In dieser Übung werden Sie anhand von vier Simulationen mehr über Säuren- und Basen-Gleichgewichte und über die Funktion von Pufferlösungen lernen.

Link zu den Simulationen für diese Aktivität: <https://tcel-hu-berlin.github.io/silc/saeure+basen/>

💡 = Hinweis auf der Website verfügbar

💬 = Diskussionspunkt

BONUS = optionale Frage

Vorbereitungsaufgaben

(vor der Übung zu bearbeiten)

1. Beantworten Sie die folgenden Fragen zum allgemeinen Verhalten von Säuren und Basen:
 - a) Formulieren Sie die Gleichung für die Dissoziation einer schwachen monoprotischen Säure HA in Wasser.
 - b) Formulieren Sie die Gleichung für die Dissoziation einer schwachen monoprotischen Base B in Wasser.
 - c) Formulieren Sie die Ausdrücke für die Gleichgewichtskonstanten (Massenwirkungsgesetz) der beiden vorherigen Dissoziationen.

2. Öffnen Sie die Simulation A und lesen Sie den Überblick durch.
 - a) Bitte geben Sie den ungefähren Zeitpunkt an, zu dem das System den Gleichgewichtszustand erreicht. Begründen Sie Ihre Antwort.
 - b) In der submikroskopischen Animation scheinen einige Säuremoleküle (HA) zu dissoziieren, nachdem das System den Gleichgewichtszustand erreicht hat. Erläutern Sie, warum das System als im Gleichgewicht befindlich angesehen wird, obwohl die Dissoziation von HA weitergeht.
 - c) Lesen Sie die Anfangs- und Gleichgewichtskonzentrationen von HA, A^- und H_3O^+ in der Simulation ab. Verwenden Sie diese Konzentrationen, um die Säuredissoziationskonstante von HA zu berechnen.

3. Öffnen Sie die Simulation D und lesen Sie den Überblick durch. Verwenden Sie bei Bedarf die Grafik des Titrationsaufbaus im Hilfemenü, um sich mit den Komponenten vertraut zu machen.
- a) Berechnen Sie das Volumen und den pH-Wert am Äquivalenzpunkt (ohne die Simulation zu benutzen), wenn 20 mL einer $0,8 \text{ mol L}^{-1}$ Salzsäurelösung mit einer $1,0 \text{ mol L}^{-1}$ Natriumhydroxidlösung titriert werden.

 - b) Führen Sie mit der Simulation eine Titration unter den vorgenannten Bedingungen durch und überprüfen Ihre Berechnung.

 - c) Simulieren Sie eine Titration mit einer $1,0 \text{ mol L}^{-1}$ Essigsäure ($\text{pK}_s 4,76$) als Probelösung und mit $1,0 \text{ mol L}^{-1}$ NaOH als Maßlösung.
 - (i) Welche Bedeutung hat der „flache“ Bereich vor dem Äquivalenzpunkt in dieser Titration?

 - (ii) Wie kann der pH-Wert im Zentrum dieses Bereichs ohne Berechnungen bestimmt werden?

 - (iii) Simulieren Sie eine ähnliche Titration mit einer $0,5 \text{ mol L}^{-1}$ Essigsäure-Probelösung. Welche Komponenten der Titrationskurven bleiben gleich und welche verändern sich?
-

Hauptaufgaben

(während der Übung zu bearbeiten)

In Simulation B können Sie die Anfangskonzentrationen von Säure (HA) und konjugierter Base (A^-) wählen, mit denen eine Lösung hergestellt wird, und die Entwicklung der Reaktion im Laufe der Zeit beobachten. Das submikroskopische Bild wurde der Einfachheit halber weggelassen.

1. Führen Sie drei kurze virtuelle Experimente durch, bei denen Sie die Anfangskonzentrationen von $[HA]_0$ und $[A^-]_0$ variieren und das System den Gleichgewichtszustand erreichen lassen.
 - Im **ersten** Versuch beginnen Sie mit einer beliebigen Konzentration für $[HA]_0$, während $[A^-]_0$ auf 0 gesetzt wird.
 - Im **zweiten** Versuch beginnen Sie mit einer beliebigen Konzentration von $[A^-]_0$, während $[HA]_0$ auf 0 gesetzt wird.
 - Im **dritten** Versuch wählen Sie eine beliebige Kombination aus Konzentrationen für $[HA]_i$ und $[A^-]_0$.
- a) Notieren Sie die Konzentrationswerte aller Substanzen in der Lösung, nachdem das System den Gleichgewichtszustand erreicht hat.

$[HA]_0$ (mM)	$[A^-]_0$ (mM)	$[HA]_{\text{Ende}}$ (mM)	$[A^-]_{\text{Ende}}$ (mM)	$[H_3O^+]_{\text{Ende}}$ (mM)	$[OH^-]_{\text{Ende}}$ (mM)	pH _{Ende}
	0,00					
0,00						

- b) Wie verhalten sich die Konzentrationen von HA, A^- , H_3O^+ und OH^- im Gleichgewichtszustand? Geben Sie zwei Gleichungen an, welche das Gleichgewicht zwischen den Konzentrationen der verschiedenen Ionen beschreiben.
- c) Verwenden Sie Ihre notierten Werte aus (a) und Ihre Gleichungen aus (b), um die numerischen Werte (in mol L⁻¹) der Dissoziationskonstante von HA und A^- (K_s und K_b) zu berechnen.

2. Für die Dissoziation einer schwachen Säure HA in Wasser mit Anfangskonzentration $[HA]_0$ können i. Allg. die Konzentrationen der Edukte und Produkte am Anfang und im Gleichgewichtszustand in der folgenden Tabelle zusammengefasst werden:



	HA	H ₂ O	A ⁻	H ₃ O ⁺
Anfangskonzentration (mol L ⁻¹)	$[HA]_0$	--	0	0
Konzentrationsänderung (mol L ⁻¹)	- x	--	+ x	+ x
Gleichgewichtskonzentration (mol L ⁻¹)	$[HA]_0 - x$	--	x	x

Die Information in der Tabelle ist auch im Hilfe-Menü unter *Abbildungen* grafisch dargestellt. Sie haben vielleicht bereits in der Vorlesung gelernt, dass der pH-Wert einer Lösung einer schwachen Säure HA mit der folgenden Formel berechnet werden kann:

$$pH = \frac{1}{2} (pK_s - \log[HA]_0)$$

Versuchen Sie, diese Formel ausgehend von der oberen Tabelle herzuleiten, unter Annahme, dass der Wert von K_s im Voraus bekannt ist.



3. Setzen Sie die Anfangskonzentrationen in Simulation B auf $[HA]_0 = 0,050$ mM und $[A^-]_0 = 0$ mM. Bevor Sie die Reaktion starten, verwenden Sie die Gleichung aus Frage 2, um die Konzentrationen von HA, A⁻, H₃O⁺ und OH⁻ im Gleichgewicht sowie den endgültigen pH-Wert der Lösung vorherzusagen.
4. Testen Sie Ihre Vorhersage, indem Sie das virtuelle Experiment in der Simulation B durchführen. Stimmen die Ergebnisse überein? Wenn nicht, überprüfen Sie Ihre Berechnung mit Ihren Kommilitonen.

In Simulation C wird untersucht, was passiert, wenn eine kleine Menge einer starken Base zu einem System hinzugefügt wird, in dem sich bereits ein Gleichgewicht zwischen der sauren Form HA und der konjugierten Base A⁻ eingestellt hat. Öffnen Sie die Simulation C und lesen Sie den Überblick durch.

5. Führen Sie Experimente durch, indem Sie 5 mL 5 M NaOH zu 100-mL-Lösungen hinzufügen, die sich aus den folgenden Kombinationen aus Konzentrationen von [HA]₀ und [A⁻]₀ ergeben. Notieren Sie den pH-Wert der Lösung, nachdem sie zum ersten Mal den Gleichgewichtszustand erreicht hat (d.h. vor der Zugabe von NaOH). Notieren Sie auch die *Änderung* des pH-Werts (ΔpH), die Sie beobachten, nachdem das System (nach der Zugabe der Base) zum zweiten Mal den Gleichgewichtszustand erreicht hat.

[HA] _i	[A ⁻] _i	pH-Wert vor Basenzugabe	ΔpH nach Basenzugabe
0.500	0.000		
0.500	0.005		
0.500	0.075		
0.500	0.100		
0.500	0.500		

Welche der oben genannten Lösungen würden Sie als "Pufferlösungen" bezeichnen? Diskutieren Sie mit Ihren Kommilitonen, warum Sie die spezifischen Lösungen gewählt haben.



BONUS

6. Die Henderson–Hasselbach-Gleichung lautet:

$$pH = pK_a + \log \left(\frac{[A^-]}{[HA]} \right)$$

Leiten Sie diese Gleichung aus dem Ausdruck für eine Säuredissoziationskonstante ab.

7. Sie wissen nun ein wenig mehr darüber, wie sich die Konzentrationen von Säuren und Basen in einer Lösung verändern. Nun überlegen Sie sich, wie ein Puffer im Labor hergestellt werden könnte. Beschreiben Sie Ihre Strategie für die Herstellung einer 100-ml-Pufferlösung mit einem pH-Wert von 4,90, indem Sie entweder:

a) eine Stammlösung von Essigsäure mit Konzentration 1.0 M und festes Natriumacetat ($M=80,03 \text{ g mol}^{-1}$) benutzen.



BONUS

b) eine Stammlösung von Essigsäure mit der Konzentration 0.500 M und eine Stammlösung von 0,100 M NaOH benutzen.

Bei Bedarf kann auch Wasser hinzugefügt werden. Der pK_s von Essigsäure beträgt 4,76. Überprüfen Sie Ihre Antworten mit denen Ihrer Kommilitonen.

8. Öffnen Sie die Simulation D und betrachten Sie eine Titration von 20 mL einer 0.5 mol L^{-1} Essigsäure mit 1.0 mol L^{-1} Natronlauge. Simulieren Sie jedoch die Titration erst nach Abschluss der Schritte (a-d) durch. Falls (c) eine größere Herausforderung darstellt, können Sie es auch später erledigen.



a) Berechnen Sie den pH-Wert der Essigsäurelösung vor der Zugabe von NaOH.

b) Berechnen Sie das zugefügte Volumen von NaOH am Äquivalenzpunkt.

BONUS

c) Berechnen Sie den pH-Wert am Äquivalenzpunkt.



- d) Geben Sie das Volumen von NaOH und den pH-Wert am Halbäquivalenzpunkt an.
- e) Führen Sie die Titration in der Simulation D mit Phenolphthalein als Indikator durch und überprüfen Sie Ihre Antworten bei (a)-(c).
- f) Versuchen Sie die Titration mit Methylorange als Indikator zu simulieren. Warum ist das keine gute Idee?

BONUS

9. Führen Sie mit der Simulation eine Titration der unbekannten Base „Mystery-Base“ mit einer Maßlösung von 1.0 mol L^{-1} Salzsäure durch. Sie können Methylorange als Indikator auswählen.
- a) Berechnen Sie die Konzentration der Mystery-Base in mol L^{-1} .
- b) Sie haben einen Hinweis erhalten, dass es sich bei der Mystery-Base entweder um Cyanid, Methylamin oder Anilin handelt. Verwenden Sie die in der Simulation und im Hilfemenü verfügbaren Informationen, um die Identität der Base zu bestimmen.

