

**Kollegium Spiritus Sanctus Brig**

**Maturaarbeit 2023/24**

**Berechnung des pH-Werts  
wässriger Lösungen unter  
Berücksichtigung der  
Autoprotolyse des Wassers**

**Von:**

**Ritz Natanael, 5A**

**Eingereicht im Fachbereich Mathematik**

**Betreut durch:**

**Hildbrand Reto**

## Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b> .....	<b>3</b>
<b>2. Säuren und Basen</b> .....	<b>4</b>
2.1. Säure- und Basenstärke .....	4
2.2. Säure/Base-Reaktionen .....	5
2.3. Mehrprotonige Säuren und Basen .....	5
2.4. Ampholyte .....	6
<b>3. Der pH-Wert</b> .....	<b>7</b>
3.1. Autoprotolyse des Wassers .....	7
3.2. Ionenprodukt des Wassers .....	7
3.3. Der pH-Wert .....	8
3.4. Zusammenhang zwischen pH- und pOH-Wert .....	9
<b>4. Herkömmliche pH-Wert Berechnungen</b> .....	<b>10</b>
4.1. Vereinfachte pH-Wert Berechnung für starke Säuren und Basen .....	10
4.2. Vereinfachte pH-Wert Berechnung für schwache Säuren und Basen .....	11
<b>5. Die grosse pH-Formel</b> .....	<b>14</b>
5.1. Ungenauigkeit der vereinfachten Formeln .....	14
5.2. Gekoppelte Gleichgewichte .....	14
5.3. Herleitung der grossen pH-Formel .....	15
<b>6. Auflösen einer kubischen Gleichung</b> .....	<b>18</b>
6.1. Newton-Raphson-Verfahren .....	18
6.2. Iterationsformel des Newtonverfahrens .....	19
<b>7. Excel-Programm zur pH-Wert Berechnung</b> .....	<b>20</b>
7.1. Auswahl des Startwerts .....	20
7.2. Entwicklung des Excel-Programms .....	21
<b>8. Resultate</b> .....	<b>22</b>
<b>9. Diskussion</b> .....	<b>23</b>
9.1. Resultate .....	23
9.2. Probleme .....	23
9.3. Weiterführungen .....	23
<b>10. Fazit</b> .....	<b>24</b>
<b>11. Quellenverzeichnis</b> .....	<b>25</b>
11.1. Internetquellenverzeichnis .....	25
11.2. Literaturverzeichnis .....	26
11.3. Abbildungsverzeichnis .....	26
<b>12. Anhang</b> .....	<b>27</b>
<b>13. Authentizitätserklärung</b> .....	<b>30</b>

## 1. Einleitung

Es war für mich von Anfang an klar, dass ich meine Maturaarbeit zu einem wissenschaftlichen Thema schreiben würde. Mich faszinieren die logischen Denkprozesse und die Tatsache, dass es für nahezu alle Phänomene, selbst alltägliche, grundlegende Erklärungen gibt. In dem Grundlagenfach Chemie habe ich die Berechnung des pH-Werts erlernt, jedoch wurde dabei die Autoprotolyse des Wassers vernachlässigt. Dies hätte mich besonders interessiert, und daher war es für mich, als ich die Auswahl der Themen für die Maturaarbeit durchging, eine unmittelbare Entscheidung, dass ich meine Arbeit zu diesem Thema schreiben werde.

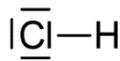
Meine Maturaarbeit verfolgt das Ziel den pH-Wert einer wässrigen Lösung zu berechnen, wobei die Autoprotolyse des Wassers, die meistens vernachlässigt wird, mitberücksichtigt wird. Anhand eines konkreten Beispiels kann schnell aufgezeigt werden, wo die häufig verwendeten und vereinfachten Formeln zur Berechnung des pH-Werts, die auch im Grundlagenfach Chemie am Kollegium unterrichtet werden, an ihre Grenzen stossen und, wenn auch nur in kleinem Masse, ungenaue pH-Werte liefern. In solchen Fällen ist es erforderlich, sich einer neuen Formel zu bedienen. Diese Formel werde ich herleiten und dieselbe Berechnung noch einmal durchführen, um die Abweichung des pH-Werts im Vergleich zu den vereinfachten Formeln zu demonstrieren.

Ein weiteres Vorhaben ist es, ein Excel-Programm zu erstellen, das in der Lage ist, den pH-Wert für beliebige Säuren und Basen unter Einbeziehung der Autoprotolyse des Wassers zu berechnen. Das Programm soll auch stets den Unterschied im Endresultat zu den vereinfachten Formeln, die die Autoprotolyse des Wassers vernachlässigen, anzeigen.

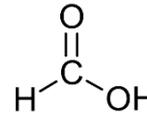
An dieser Stelle möchte ich mich bei meinem Betreuer Reto Hildbrand für seine Unterstützung und Hilfe während der gesamten Arbeit bedanken. Ebenso bedanke ich mich bei meinem ehemaligen Chemielehrer Didier Lötscher, der mich immer für das Fach Chemie begeistern konnte und ohne dessen inspirierende Leidenschaft für Chemie ich mich nicht für dieses Thema entschieden hätte. Ein abschliessender Dank gebührt meiner Familie und meinen Freunden für ihren Beistand und ihre grossartige Unterstützung.

## 2. Säuren und Basen

Eine Säure ist eine chemische Verbindung, die in der Lage ist, ein oder mehrere Wasserstoff-Kationen ( $\text{H}^+$ ) an einen Reaktionspartner abzugeben. Eine Säure muss dementsprechend in ihrer Struktur mindestens ein kovalent gebundenes Wasserstoff-Atom aufweisen, welches es abgeben kann. Da ein Wasserstoff-Kation fast immer nur noch aus einem Proton besteht, werden Säuren auch als Protonendonatoren (Protonenspender) bezeichnet.<sup>1</sup> Teilchen, welche die strukturellen Bedingungen einer Säure erfüllen, werden als potenzielle Säuren bezeichnet, und zwar unabhängig davon, ob sie die Funktion einer Säure in einer konkreten Reaktion wirklich einnehmen.<sup>2</sup>



*Chlorwasserstoff als Beispiel einer potenziellen Säure*

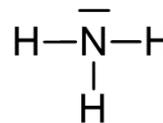


*Ameisensäure als Beispiel einer potenziellen Säure*

Basen können als Gegenstücke zu den Säuren bezeichnet werden. Eine Base ist eine chemische Verbindung, die in der Lage ist, ein oder mehrere Wasserstoff-Kationen aufzunehmen. Dazu muss eine Base mindestens ein nichtbindendes Elektronenpaar aufweisen, an welches ein Wasserstoff-Kationen andocken kann.<sup>1</sup> Hier gilt ebenfalls, dass Teilchen, welche diese strukturellen Bedingungen erfüllen, als potenzielle Basen bezeichnet werden, unabhängig davon, ob sie in einer konkreten Reaktion die Funktion einer Base wirklich einnehmen. Analog zu den Säuren werden Basen Protonenakzeptoren (Protonenempfänger) genannt.



*Fluorid als Beispiel einer potenziellen Base*



*Ammoniak als Beispiel einer potenziellen Base*

### 2.1. Säure- und Basenstärke

Nicht alle Säuren sind gleichbereit, ihr Wasserstoff-Atom abzugeben. Die Neigung einer bestimmten Säure, ihr Wasserstoff-Kation abzugeben, wird als Säurestärke bezeichnet. Die Säurestärke einer spezifischen Säure wird durch ihre individuelle Säurekonstante  $K_A$  bestimmt. Das tiefstehende A steht für «acid», den englischen Begriff für Säure. Die Säurekonstante wird aus Gründen der Übersichtlichkeit meistens durch ihren negativen dekadischen Logarithmus angegeben, der als  $\text{p}K_A$ -Wert bezeichnet wird.

$$\text{p}K_A = -\lg(K_A)$$

Analog dazu ist die Basenstärke und die Basenkonstante  $K_B$  sowie der  $\text{p}K_B$ -Wert definiert, mit dem Unterschied, dass es sich um die Neigung der Base handelt, ein Wasserstoff-Kation aufzunehmen.<sup>3</sup>

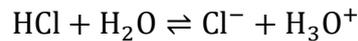
<sup>1</sup> Stieger, M. (2018). Elemente: Grundlagen der Chemie für Schweizer Maturitätsschulen, S.228

<sup>2</sup> Lötscher, Didier, Skript Grundlagen der Chemie – GF 3. Jahr, 2021, S.224

<sup>3</sup> Säurekonstante: <https://www.chemie.de/lexikon/Säurekonstante.html> (8.11.2023)

## 2.2. Säure/Base-Reaktionen

Eine Säure/Base-Reaktion bezeichnet eine chemische Reaktion, bei der eine Protolyse (Übertragung von Protonen) von einer Säure auf eine Base stattfindet. Solche Reaktionen sind immer Gleichgewichtsreaktionen, was bedeutet, dass sowohl die Hin- als auch die Rückreaktion ablaufen. Bei der Hinreaktion geht die Säure in ihre korrespondierende Base über und umgekehrt die Base in ihre korrespondierende Säure. Als Beispiel die Säure/Base-Reaktion von Chlorwasserstoff und Wasser mit Chlorwasserstoff als Säure und Wasser als Base:



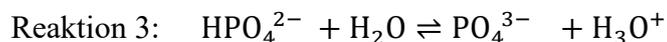
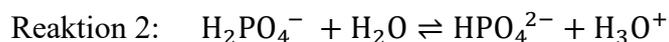
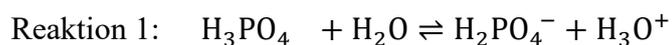
Die Säure HCl geht in ihre korrespondierende Base  $\text{Cl}^-$  über und die Base  $\text{H}_2\text{O}$  in ihre korrespondierende Säure  $\text{H}_3\text{O}^+$ . Säure und korrespondierende Base werden als Säure/Base-Paar bezeichnet (in der obigen Reaktion sind dies HCl und  $\text{Cl}^-$ ). Base und korrespondierende Säure bilden das zweite Säure/Base-Paar (in der obigen Reaktion:  $\text{H}_3\text{O}^+$  und  $\text{H}_2\text{O}$ ). In einer Säure/Base-Reaktion liegen folglich immer zwei Säure/Base-Paare vor.<sup>4</sup>

Wie weit das Gleichgewicht einer Säure/Base-Reaktion auf der rechten oder der linken Seite liegt, hängt von der Säure- beziehungsweise der Basenstärke der beteiligten Teilchen ab.

## 2.3. Mehrprotonige Säuren und Basen

Eine Säure, die beispielsweise zwei Wasserstoff-Atome aufweist, besitzt, nachdem sie in einer Reaktion ein  $\text{H}^+$ -Ion abgegeben hat immer noch ein Wasserstoff-Atom und kann somit in einer weiteren Reaktion nochmals als Säure fungieren und das zweite  $\text{H}^+$ -Ion abgeben. Diese Säure würde man dann als eine potenzielle zweiprotonige Säure bezeichnen. Genau gleich kann eine Base, insofern sie mehrere freie Elektronenpaare besitzt, der Anzahl freien Elektronenpaare entsprechend viele  $\text{H}^+$ -Ionen aufnehmen und wird als potenzielle n-protonige Base bezeichnet, wobei n der Anzahl  $\text{H}^+$ -Ionen entspricht, die sie aufnehmen kann.<sup>5</sup>

Die Protolysen von mehrprotonigen Säuren oder Basen laufen nicht gleichzeitig, sondern stufenweise nacheinander ab. Wie dies funktioniert, kann mithilfe des Beispiels einer dreiprotonigen Säure, der Phosphorsäure ( $\text{H}_3\text{PO}_4$ ), veranschaulicht werden:



Jede Dissoziationsstufe stellt ihr eigenes Reaktionsgleichgewicht ein. In Wasser findet nur die erste Protolyse in nennenswertem Ausmass statt. Bei der zweiten Protolyse liegt das Gleichgewicht weit links und bei der dritten Protolyse ist das Gleichgewicht so weit links liegend, dass sie praktisch keinen Einfluss auf die Konzentrationsänderung der Hydronium-Ionen hat.<sup>6</sup>

Alle in meiner Arbeit verwendeten Formeln und durchgeführten Berechnungen gelten ausschliesslich für einprotonige Säuren/Basen. Im Falle von mehrprotonigen Säuren und Base wird angenommen, dass jeweils nur deren erste Protolyse-Reaktion abläuft.

---

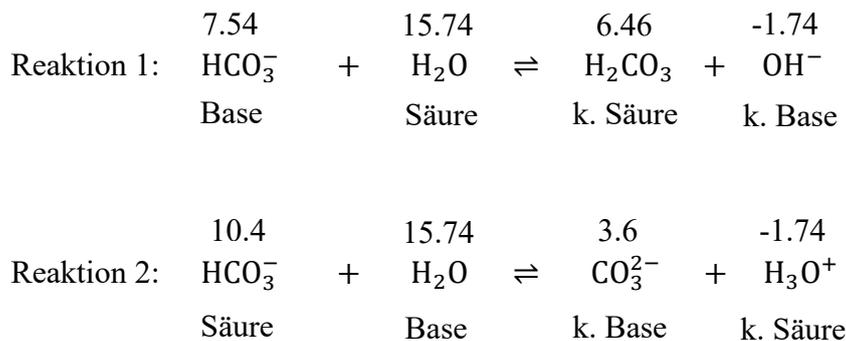
<sup>4</sup> Säure/Base-Reaktion: <https://studyflix.de/chemie/korrespondierende-saure-base-paare-7071> (8.11.2023)

<sup>5</sup> Mehrprotonige Säuren: <https://www.abiweb.de/anorganische-chemie/donator-akzeptor-prinzip/saure-base-chemie/mehrprotonige-sauren.html> (8.11.2023)

<sup>6</sup> Stieger, M. (2018). Elemente: Grundlagen der Chemie für Schweizer Maturitätsschulen, S.231

## 2.4. Ampholyte

Ampholyte sind Teilchen, die sowohl die strukturellen Bedingungen einer Säure wie auch die einer Base erfüllen. Wenn ein Ampholyt (griech. *amphis*, beides) in Wasser gegeben wird, kann er folglich in einer Säure/Base-Reaktion sowohl als Säure wie auch als Base fungieren.<sup>7</sup> Hydrogencarbonat ( $\text{HCO}_3^-$ ) zum Beispiel ist ein Teilchen, das diese Eigenschaft aufweist und somit zu den Ampholyten zählt. Anhand von Hydrogencarbonat kann gezeigt werden, welche Reaktionen in einer wässrigen Lösung ablaufen.



In einer Reaktion übernimmt Hydrogencarbonat die Rolle der Base und in der anderen die der Säure. In den obigen Reaktionsgleichungen sind die über den Reaktanden stehenden Zahlen deren  $\text{pK}_\text{A}$ - oder  $\text{pK}_\text{B}$ -Wert<sup>8</sup>. Diese beiden Reaktionen laufen aber nicht in gleichem Masse ab. Aufgrund der Säure- und Basenstärke der Reaktanden, weil die korrespondierenden Säuren und Basen jeweils stärker sind, lässt sich schliessen, dass die chemischen Gleichgewichte bei beiden Reaktionen auf der Seite der Edukte liegen. Dies gibt immer noch nicht Aufschluss darüber, welche der beiden Reaktionen vermehrt abläuft. Wasser hat mit einem  $\text{pK}_\text{A}$ - und  $\text{pK}_\text{B}$ -Wert von jeweils 15.74 ein gleichgrosses Bestreben als Säure oder Base zu agieren. Hydrogencarbonat hingegen hat einen  $\text{pK}_\text{A}$ -Wert von 10.4 und einen  $\text{pK}_\text{B}$ -Wert von 7.54. Es reagiert daher lieber als Base, weshalb die erste Reaktion im Vergleich zur zweiten vermehrt abläuft.

Alle in meiner Arbeit verwendeten Formeln und Berechnungen gelten bei Ampholyten nur jeweils für eine der beiden ablaufenden Reaktionen, nie aber für beide gleichzeitig. Ein Ampholyt wird entweder nur als Säure oder nur als Base betrachtet.

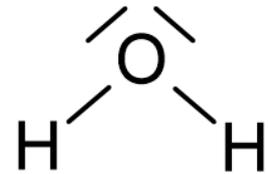
<sup>7</sup> Stieger, M. (2018). Elemente: Grundlagen der Chemie für Schweizer Maturitätsschulen, S.229

<sup>8</sup> Tabelle  $\text{pK}_\text{A}$ -Werte: [https://ethz.ch/content/dam/ethz/special-interest/dual/educeth-dam/documents/Unterrichtsmaterialien/chemie/Leitf%C3%A4higkeit/saeure\\_base\\_reihe2\\_20060706.pdf](https://ethz.ch/content/dam/ethz/special-interest/dual/educeth-dam/documents/Unterrichtsmaterialien/chemie/Leitf%C3%A4higkeit/saeure_base_reihe2_20060706.pdf) (11.11.2023)

### 3. Der pH-Wert

#### 3.1. Autoprotolyse des Wassers

Wenn man die Lewis-Struktur eines Wassermoleküls betrachtet, kann man feststellen, dass es sowohl die Bedingungen einer Säure wie auch die einer Base erfüllt. Es ist somit ein Ampholyt und kann sowohl als Säure wie auch als Base fungieren. Wassermoleküle können daher mit sich selbst reagieren und unter sich eine sogenannte Autoprotolyse (griech. *auto*, selbst) durchführen. Bei einer Autoprotolyse findet eine Protonenübertragung zwischen zwei gleichen Teilchen statt. Eines der Teilchen übernimmt die Rolle der Säure und spendet ein  $H^+$ -Ion, während das andere die Rolle der Base übernimmt und das  $H^+$ -Ion aufnimmt:<sup>9</sup>



*Wasser als Ampholyt*



Grundsätzlich kann jeder Ampholyt eine Autoprotolyse eingehen. Im Falle von Wasser ist dies jedoch besonders bedeutsam, da Wasser in der überwiegenden Mehrheit der Säure/Base-Reaktionen als Lösungsmittel für die Reaktanden verwendet wird.<sup>10</sup>

#### 3.2. Ionenprodukt des Wassers

Eine weitere essenzielle Definition für den pH-Wert ist die des Ionenprodukts des Wassers. Diese Definition leitet sich aus der Anwendung des Massenwirkungsgesetzes auf die Autoprotolyse-Reaktion von Wasser ab. Man erhält folgenden Ausdruck, wobei  $K$  die Gleichgewichtskonstante der Reaktion ist:

$$K = \frac{c(H_3O^+) \cdot c(OH^-)}{c^2(H_2O)}$$

Die konstante Konzentration von Wasser  $c^2(H_2O)$  wird nun auf beiden Seiten multipliziert, sodass man den neuen Ausdruck erhält:

$$K \cdot c^2(H_2O) = c(H_3O^+) \cdot c(OH^-)$$

Die so auf der linken Seite neu entstandene Konstante  $K \cdot c^2(H_2O)$  wird durch  $K_W$  abgekürzt.

$$K_W = c(H_3O^+) \cdot c(OH^-) \quad (\text{Ionenprodukt des Wassers})$$

Diese neue Konstante  $K_W$  wird als Ionenprodukt des Wassers bezeichnet. Diese Gleichung besagt nun, dass die Konzentration der  $H_3O^+$ -Ionen multipliziert mit der Konzentration der  $OH^-$ -Ionen immer konstant sein muss.<sup>11</sup>

In reinem Wasser ist die die Konzentration der  $H_3O^+$ -Ionen und der  $OH^-$ -Ionen gleich gross, was sich aus den stöchiometrischen Faktoren der Autoprotolyse-Reaktion ablesen lässt. Mithilfe von Leitfähigkeitsmessungen konnte die Konzentration der Hydronium-Ionen sowie die der Hydroxid-Ionen in reinem Wasser bei einer Temperatur von  $25^\circ C$  auf  $10^{-7} \text{ mol/L}$  bestimmt werden. Daraus folgend weist das Ionenprodukt des Wassers laut der Gleichung

<sup>9</sup> Stieger, M. (2018). Elemente: Grundlagen der Chemie für Schweizer Maturitätsschulen, S.237

<sup>10</sup> Lötscher, Didier, Skript Grundlagen der Chemie – GF 3. Jahr, 2021, S.233

<sup>11</sup> Ionenprodukt des Wassers: <https://studyflix.de/chemie/ionenprodukt-des-wassers-2039> (8.11.2023)

$$K_W = c(\text{H}_3\text{O}^+) \cdot c(\text{OH}^-) = 10^{-7} \frac{\text{mol}}{\text{L}} \cdot 10^{-7} \frac{\text{mol}}{\text{L}} = 10^{-14} \frac{\text{mol}^2}{\text{L}^2}$$

den Wert  $10^{-14} \text{mol}^2/\text{L}^2$  auf. Dieser Wert wurde experimentell ermittelt und gilt nur bei einer Raumtemperatur von  $25^\circ\text{Celsius}$ .

An dieser Stelle muss darauf hingewiesen werden, dass chemische Gleichgewichte temperaturabhängig sind. Dies trifft auch auf die Autoprotolyse-Reaktion des Wassers zu. Da sich das Ionenprodukt des Wassers aus dieser Reaktion ableitet, ist es ebenfalls von der Temperatur abhängig.<sup>12</sup>

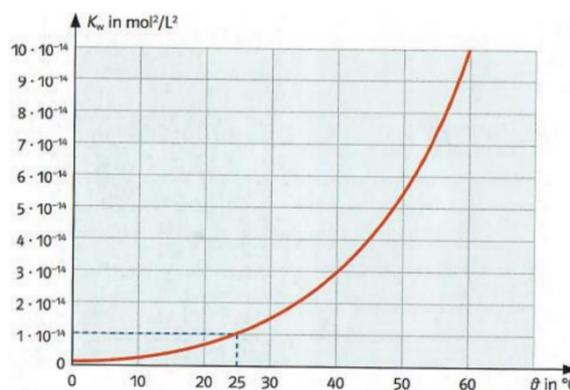


Abb. 1: Temperaturabhängigkeit des Ionenprodukts des Wassers

In allen in dieser Arbeit verwendeten Formeln und Berechnungen wird angenommen, dass alle chemischen Reaktionen bei  $25^\circ\text{C}$  ablaufen. Entsprechend wird für das Ionenprodukt des Wassers der Wert  $K_W = 10^{-14} \text{mol}^2/\text{L}^2$  verwendet.<sup>13</sup>

### 3.3. Der pH-Wert

Der pH-Wert (lat. *pondus hydrogenii*, Gewicht des Wasserstoffs) ist ein Mass, der den sauren beziehungsweise basischen Charakter einer wässrigen Lösung angibt. Er ist eine Grösse ohne Einheit (ein reiner Zahlenwert) und wird durch die Konzentration der Hydronium-Ionen bestimmt.<sup>14</sup>

Wenn die Konzentration der  $\text{H}_3\text{O}^+$ -Ionen und der  $\text{OH}^-$ -Ionen einer wässrigen Lösung gleich gross ist, wird sie als neutral bezeichnet. Laut Ionenprodukt des Wassers ist dies genau dann der Fall, wenn:

$$K_W = c(\text{H}_3\text{O}^+) \cdot c(\text{OH}^-)$$

Da beide Faktoren gleich gross sind, kann aus dem  $K_W$  die Wurzel gezogen werden.

$$c(\text{H}_3\text{O}^+) = c(\text{OH}^-) = \sqrt{K_W} = 10^{-7} \frac{\text{mol}}{\text{L}}$$

Ist in einer wässrigen Lösung die Konzentration der  $\text{H}_3\text{O}^+$ -Ionen grösser als  $10^{-7} \text{mol/L}$ , so wird sie als sauer bezeichnet. Ist sie jedoch kleiner als  $10^{-7} \text{mol/L}$ , so nennt man sie basisch (oder alkalisch).

Die Konzentration der  $\text{H}_3\text{O}^+$ -Ionen gibt nun eigentlich direkt Aufschluss über den Säuregrad einer wässrigen Lösung. Zur Vereinfachung wird die Konzentration der Hydronium-Ionen durch ihren negativen dekadischen Logarithmus, der als pH-Wert bezeichnet wird, ausgedrückt. Dabei wird die Einheit mol/L weggelassen.

$$\text{pH} = -\lg c(\text{H}_3\text{O}^+)$$

<sup>12</sup> Autoprotolyse des Wassers: <https://www.lernort-mint.de/chemie/anorganische-chemie/saeure-base-reaktionen/die-autoprotolyse-von-wasser/> (8.11.2023)

<sup>13</sup> Stieger, M. (2018). Elemente: Grundlagen der Chemie für Schweizer Maturitätsschulen, S.238

<sup>14</sup> pH-Wert: <https://www.chemie.de/lexikon/PH-Wert.html> (18.10.2023)

In reinem Wasser beträgt die Konzentration der  $\text{H}_3\text{O}^+$ -Ionen  $10^{-7} \text{ mol/L}$ . Dementsprechend beträgt der pH-Wert:

$$\text{pH} = -\lg[10^{-7}] = 7 \quad (\text{Einheit mol/L der Konzentration wird weggelassen})$$

Folglich hat Wasser einen pH-Wert von 7 und gilt als neutral. Wenn die Konzentration der  $\text{H}_3\text{O}^+$ -Ionen steigt, wird der pH-Wert kleiner als 7. Sinkt ihre Konzentration, wird der pH-Wert größer als 7. Daher weisen saure Lösungen einen pH-Wert  $< 7$  auf, während basische Lösungen einen pH-Wert  $> 7$  haben. Die folgende Abbildung soll diesen Zusammenhang verdeutlichen.

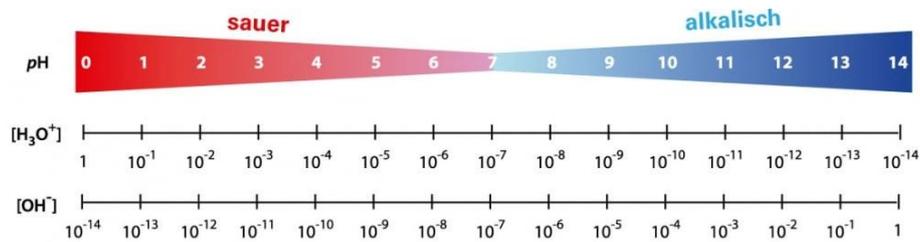


Abb. 2: pH-Skala

In der Theorie sind negative pH-Werte oder Werte über 14 möglich, wenn ausreichend große Mengen an Säure oder Base in die Lösung gegeben werden. Der bisher niedrigste in einer natürlichen Umgebung vorkommende pH-Wert zum Beispiel liegt sogar bei -3.6 und wurde in einem Pyrit-Bergwerk in Kalifornien gemessen.<sup>15</sup> In der Praxis arbeitet man jedoch sehr selten mit Konzentrationen von 1 mol/L oder mehr. Aus diesem Grund wird der pH-Wert üblicherweise im Bereich von 0 bis 14 angegeben.<sup>16</sup>

### 3.4. Zusammenhang zwischen pH- und pOH-Wert

Analog zum pH-Wert gibt es auch den pOH-Wert. Dieser wird auf die genau gleiche Weise wie der pH-Wert durch den negativen dekadischen Logarithmus der  $\text{OH}^-$ -Ionen-Konzentration gebildet. Er ist das Äquivalent des pH-Werts und gibt die Basizität einer wässrigen Lösung an. Die Konzentration der Hydronium-Ionen und der Hydroxid-Ionen stehen durch das Ionenprodukt des Wassers in direktem Zusammenhang und ergeben multipliziert immer den Wert  $10^{-14} \text{ mol}^2/\text{L}^2$ .

$$c(\text{H}_3\text{O}^+) \cdot c(\text{OH}^-) = 10^{-14} \frac{\text{mol}^2}{\text{L}^2}$$

Da sowohl der pH-Wert als auch der pOH-Wert sich aus dem negativen dekadischen Logarithmus ableiten, ergibt sich durch Anwendung des negativen dekadischen Logarithmus auf die Gleichung die folgende Beziehung.

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

Die Einheiten werden hier wieder weggelassen, da es sich um Größen der Dimension Eins ohne spezifische Einheiten handelt. Da die eine Größe leicht aus der anderen berechnet werden kann, genügt eine einzige Größe, um den Säuregrad einer wässrigen Lösung anzugeben. Aus Konvention hat sich der pH-Wert als die gängige Größe etabliert. Der Zusammenhang zwischen pH-Wert und pOH-Wert ist jedoch für die pH-Wert-Berechnung von wässrigen Lösungen relevant.<sup>17</sup>

<sup>15</sup> pH-Wert: <https://www.chemie.de/lexikon/PH-Wert.html> (8.11.2023)

<sup>16</sup> Stieger, M. (2018). Elemente: Grundlagen der Chemie für Schweizer Maturitätsschulen, S.239

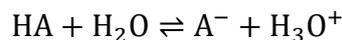
<sup>17</sup> Zusammenhang pH- und pOH-Wert: <https://studyflix.de/chemie/autoprotolyse-6168> (8.11.2023)

## 4. Herkömmliche pH-Wert Berechnungen

Für die pH-Wert-Berechnung ohne die Berücksichtigung der Autoprotolyse des Wassers werden Vereinfachungen getroffen, wie die Unterteilung in starke und schwache Säuren und Basen. Für die jeweiligen Stärkegrade werden dann aufgrund Annäherungen und weiteren Vereinfachungen unterschiedliche Formeln abgeleitet. Im Folgenden werde ich die für gewöhnlich verwendeten Formeln herleiten, die die Autoprotolyse des Wassers nicht berücksichtigen.

### 4.1. Vereinfachte pH-Wert Berechnung für starke Säuren und Basen

Um diese Formel aufzustellen, muss die Annahme getroffen werden, dass für starke Säuren mit einem  $pK_A$ -Wert  $\leq 0$  das Gleichgewicht



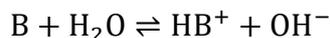
sehr stark rechts liegt. Dies bedeutet, dass die Säure nahezu vollständig dissoziiert und davon ausgegangen werden kann, dass alle  $H^+$ -Ionen der Säure an die Base abgegeben werden. Für jedes HA entsteht ein  $H_3O^+$ . Somit gilt folgendes:

$$c_0(HA) \approx c(H_3O^+)$$

Die Konzentration der  $H_3O^+$ - Ionen entspricht demnach der Anfangskonzentration der Säure. Der pH-Wert kann nun ganz einfach berechnet werden:

$$pH = -\lg c_0(HA)$$

Für starke Basen mit einem  $pK_B$ -Wert  $\leq 0$  lässt sich analog genau dieselbe Überlegung anstellen. Es wird wieder angenommen, dass das Gleichgewicht



sehr weit rechts liegt. Infolgedessen nehmen alle Base-Teilchen ein  $H^+$ -Ion von Wasser auf und es entstehen für jedes B ein  $OH^-$ .

$$c_0(B) \approx c(OH^-)$$

Daraus kann der pOH-Wert gerechnet werden:

$$pOH = -\lg c_0(B)$$

Jetzt wird die Beziehung von pH-Wert und pOH-Wert benötigt. Aus dieser lässt sich schliesslich der pH-Wert berechnen:<sup>18</sup>

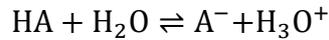
$$pH = 14 - pOH = 14 - \lg c_0(B)$$

---

<sup>18</sup> pH-Wert-Berechnung: <http://www.explain-it-arium.de/ph-wert-berechnung-2-formelsammlung-331>  
(19.10.2023)

## 4.2. Vereinfachte pH-Wert Berechnung für schwache Säuren und Basen

Für schwache Säuren mit einem  $pK_A$ -Wert  $> 1$  läuft die Protolyse unvollständig ab. Über die Gleichgewichtsreaktion



lässt sich sagen, dass ihr Gleichgewicht auf der linken Seite liegt. Von der Säure HA dissoziieren daher nicht alle Teilchen zu  $A^-$ . So gibt es in der Lösung neben den entstandenen  $A^-$  und  $H_3O^+$ -Ionen noch undissoziierte HA-Teilchen der Säure. Wasser als Lösungsmittel wird als konstant angenommen. Die untenstehende Tabelle soll diesen Sachverhalt darstellen.

Bevor die Säure in die Lösung gegeben wird und eine Reaktion stattfinden kann, findet sich die vollständige Anfangskonzentration  $c_0$  der Säure HA vor. Es sind somit noch keine  $A^-$ - oder  $H_3O^+$ -Ionen vorhanden, weshalb deren Konzentration gleich null ist. Wenn die Säure ins Lösungsmittel gegeben wird und die Protolyse abläuft, ändern sich die jeweiligen Konzentrationen der Teilchen. Ein Teil der Säure HA, der in der Tabelle als  $x$  bezeichnet ist, reagiert nun weg. Aufgrund der stöchiometrischen Koeffizienten der Reaktionsgleichung entstehen in demselben Verhältnis  $A^-$  und  $H_3O^+$ -Ionen. Durch Anfangskonzentration und Konzentrationsänderung lässt sich die Zusammensetzung der Konzentrationen im Gleichgewicht wie in der letzten Zeile der Tabelle dargestellt mathematisch ausdrücken<sup>19</sup>.

	HA	+	H <sub>2</sub> O	⇌	A <sup>-</sup>	+	H <sub>3</sub> O <sup>+</sup>
Anfangskonzentration	$c_0$		konstant		0		0
Konzentrationsänderung	$-x$				$+x$		$+x$
im Gleichgewicht	$c_0 - x$		konstant		$x$		$x$

Tab. 1: Sachverhalt der Konzentrationsänderung bei schwachen Säuren/Basen

Um die Formel für die pH-Wert-Berechnung schwacher Säuren aufzustellen, wird die Gleichung der Säurekonstante  $K_A$  benötigt, wobei die jeweiligen Konzentrationen mit den Termen der letzten Zeile aus der Tabelle ersetzt werden können:

$$K_A = \frac{c(A^-) \cdot c(H_3O^+)}{c(HA)} = \frac{x \cdot x}{c_0 - x} = \frac{x^2}{c_0 - x}$$

Hierbei entspricht  $x$  der Konzentration der  $H_3O^+$ -Ionen, weshalb die Gleichung umgeformt und nach  $x$  aufgelöst werden kann. Es wird auf beiden Seiten mit  $(c_0 - x)$  multipliziert.

$$K_A = \frac{x^2}{c_0 - x} \quad | \cdot (c_0 - x)$$

$$K_A c_0 - K_A x = x^2$$

<sup>19</sup> Lötcher, Didier, Skript Grundlagen der Chemie – GF 3. Jahr, 2021, S.238f

Man erhält die Quadratische Gleichung

$$x^2 + K_A x - K_A c_0 = 0$$

die durch Einsetzen in die Mitternachtsformel folgende Lösung hat.:

$$c(\text{H}_3\text{O}^+) = x = \frac{-K_A + \sqrt{K_A^2 + 4K_A c_0}}{2}$$

Die zweite Lösung der quadratischen Gleichung kann ignoriert werden, da es keine negativen Konzentrationen geben kann. Der pH-Wert berechnet sich aus dem negativen dekadischen Logarithmus der obigen Formel.

Bei dieser Formel wird meistens noch eine weitere Vereinfachung gemacht. Bei schwachen Säuren liegt das Gleichgewicht weit links, weshalb angenommen werden kann, dass  $c(\text{HA})$  im Gleichgewicht immer noch beinahe der Anfangskonzentration  $c_0$  entspricht<sup>20</sup>.

$$K_A = \frac{c(\text{A}^-) \cdot c(\text{H}_3\text{O}^+)}{c(\text{HA})} = \frac{x^2}{c_0 - x} \approx \frac{x^2}{c_0}$$

Diese Formel lässt sich nun viel einfacher nach  $x$  auflösen und eine quadratische Gleichung wird vermieden.

$$x^2 = K_A c_0$$

$$c(\text{H}_3\text{O}^+) = x = (K_A c_0)^{\frac{1}{2}}$$

$$\text{pH} = -\lg(K_A c_0)^{\frac{1}{2}}$$

$$\text{pH} = -\frac{1}{2} \lg(K_A c_0)$$

$$\text{pH} = \frac{1}{2} (\text{p}K_A - \lg c_0)$$

Für die Berechnung des pH-Werts einer schwachen Base gilt analog:

$$\text{pH} = 14 - \text{pOH} = 14 - \frac{1}{2} (\text{p}K_B - \lg c_0)$$

Es soll noch kurz anhand eines Beispiels verdeutlicht werden, dass der Unterschied in den Ergebnissen zwischen der quadratischen Gleichung und der weiter vereinfachten Formel sehr gering ist, weshalb die zusätzliche Vereinfachung ohne Bedenken gemacht werden darf.

---

<sup>20</sup> Lötcher, Didier, Skript Grundlagen der Chemie – GF 3. Jahr, 2021, S.238f

Essigsäure besitzt einen  $pK_A$  -Wert von 4.76. Nimmt man eine Essigsäurelösung der Konzentration 0.1 mol/L und setzt dies in die quadratische Formel ein, erhält man:

$$pH = -\lg c(\text{H}_3\text{O}^+) = -\lg \left( \frac{-10^{-4.76} + \sqrt{(10^{-4.76})^2 + 4 \cdot 10^{-4.76} \cdot 0.1}}{2} \right) = 2.882862527$$

Mit der weiter vereinfachten Formel erhält man für die Berechnung mit denselben Werten:

$$pH = \frac{1}{2} (4.76 - \lg 0.1) = 2.88$$

Da die Abweichung erst bei der dritten Nachkommastelle auftritt und es sich bei beiden Formeln sowieso bereits um vereinfachte Formeln handelt, ist die kürzere Formel mit minimaler Abweichung im Ergebnis bedenkenlos zu verwenden.

## 5. Die grosse pH-Formel

### 5.1. Ungenauigkeit der vereinfachten Formeln

Durch die in Kapitel 4 hergeleiteten Formeln lässt sich der pH-Wert wässriger Lösungen schon einigermaßen akkurat berechnen. Doch durch die Vernachlässigung der Autoprotolyse des Wassers sind die Resultate nicht ganz genau und weichen, wenn auch nur in kleinem Masse, von der Realität ab. Anhand eines einfachen Beispiels kann aufgezeigt werden, wo die vereinfachte Formel für die pH-Wert-Berechnung starker Säuren und Basen fehlschlägt. Man nehme eine wässrige Lösung von Chlorwasserstoff der Konzentration  $10^{-7}$  mol/L. Chlorwasserstoff hat einen  $pK_A$ -Wert von  $-6$  und ist daher eine starke Säure. Der pH-Wert berechnet sich mit der Gleichung aus Kapitel 4.1 folgendermassen:

$$\text{pH} = -\lg c_0(\text{HA})$$

$$\text{pH} = -\lg 10^{-7} = 7$$

Man erhält einen pH-Wert von 7. Die Lösung wäre demzufolge neutral. Reines Wasser hätte einen pH-Wert von 7, jedoch wurde eine Säure hinzugegeben, wodurch der pH-Wert kleiner 7 sein müsste. Gibt man eine noch kleinere Konzentration wie beispielsweise  $10^{-8}$  mol/L einer starken Säure in Wasser erhält man mit der Formel

$$\text{pH} = -\lg 10^{-8} = 8$$

sogar pH-Werte grösser als 7. Dies würde heissen die Lösung ist basisch, was erst recht nicht sein kann.

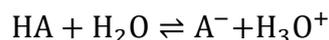
Bei der Formel für schwache Säure/Basen treten solche Ungenauigkeiten ebenso auf. Nimmt man beispielweise eine Lösung von der schwachen Base Formiat mit einem  $pK_B$ -Wert von 10.3 und der Konzentration 0.00005 mol/L und setzt diese Werte in die Formel aus Kapitel 4.2 ein:

$$\text{pH} = 14 - \frac{1}{2}(10.3 - \lg(0.00005)) = 6.699485002$$

so erhält man einen sauren pH-Wert, was für eine Base nicht stimmen kann. Dieser Fehler ist der Vernachlässigung der Autoprotolyse des Wassers in der Formel zu verschulden.

### 5.2. Gekoppelte Gleichgewichte

Bisher wurde die Autoprotolyse des Wassers in allen Formeln vernachlässigt. Es wurde demnach davon ausgegangen, dass wenn eine Säure in Wasser gegeben wird, nur die folgende Reaktion abläuft:

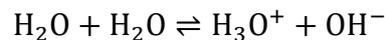


In der Realität ist dies aber nicht der Fall. Da Wasser ein Ampholyt ist und als Lösungsmittel vorliegt, läuft sowohl bereits vor Zugabe der Säure wie auch danach stets die Autoprotolyse-Reaktion von Wasser ab. Somit liegen zwei Gleichgewichtsreaktionen vor, die gleichzeitig ablaufen und sich auch gegenseitig beeinflussen.

Man spricht in einem solchen Fall von gekoppelten Gleichgewichten:



Anfänglich beträgt durch die Autoprotolyse des Wassers die Konzentration der  $\text{H}_3\text{O}^+$ -Ionen  $10^{-7} \text{ mol/L}$ . Wie anhand der obigen Säure/Base-Reaktion zu sehen ist, entstehen durch die Zugabe der Säure HA zusätzliche  $\text{H}_3\text{O}^+$ -Ionen. Das Ionenprodukt des Wassers  $K_W = c(\text{H}_3\text{O}^+) \cdot c(\text{OH}^-) = 10^{-14} \text{ mol}^2/\text{L}^2$  muss jedoch stets gelten. Wenn sich nun also die Konzentration der  $\text{H}_3\text{O}^+$ -Ionen erhöht, muss sich, um den  $K_W$  zu erhalten, die Konzentration der  $\text{OH}^-$ -Ionen verringern. Die einzige Möglichkeit dies zu gewährleisten, liegt darin, dass sich das Autoprotolyse-Gleichgewicht



ein wenig nach links verschiebt und einige  $\text{OH}^-$ -Ionen wieder mit  $\text{H}_3\text{O}^+$ -Ionen zurück zu Wasser reagieren.

Für die Berechnung des pH-Werts unter Berücksichtigung der Autoprotolyse des Wassers muss eine neue Formel hergeleitet werden, die diese gekoppelten Gleichgewichte miteinbezieht.

### 5.3. Herleitung der grossen pH-Formel

Die Formel für die pH-Wert-Berechnung unter Berücksichtigung der Autoprotolyse des Wassers ist eine kubische Gleichung, die oft, wie auch im weiteren Verlauf dieser Arbeit als die grosse pH-Formel bezeichnet wird. Zur Herleitung werden vier Ausgangsgleichungen benötigt, die im Gleichgewichtszustand auf die beiden gekoppelten Gleichgewichtsreaktionen in einer wässrigen Säurelösung immer zutreffen. Durch Umformen der einzelnen Gleichungen und mehrmaligem Anwenden des Einsetzungsverfahrens erhält man am Ende ein Gleichungssystem mit nur noch einer Unbekannten, nämlich der Konzentration der Hydronium-Ionen, aus der schliesslich noch der pH-Wert gerechnet werden kann.

**Säurekonstante:** Zu Beginn wird die Gleichung der Säurekonstante  $K_A$  benötigt und wie folgt umgeformt:

$$\textcircled{1} \quad K_A = \frac{c(\text{A}^-) \cdot c(\text{H}_3\text{O}^+)}{c(\text{HA})} \quad | \cdot c(\text{HA})$$

$$\textcircled{2} \quad K_A \cdot c(\text{HA}) = (\text{A}^-) \cdot c(\text{H}_3\text{O}^+)$$

**Anfangskonzentration:** Die Anfangskonzentration der Säure  $c_0(\text{HA})$  entspricht im Gleichgewichtszustand der Summe der Konzentration der dissoziierten  $\text{A}^-$  und der Konzentration der noch undissoziierten HA. Es gilt folgende Gleichung, die wie folgt umgeformt wird.

$$\textcircled{3} \quad c_0(\text{HA}) = c(\text{HA}) + c(\text{A}^-) \quad | -c(\text{A}^-)$$

$$\textcircled{4} \quad c(\text{HA}) = c_0(\text{HA}) - c(\text{A}^-)$$

Die Gleichung ④ wird in die Gleichung ② eingesetzt:

$$\textcircled{2} K_A \cdot c(\text{HA}) = (\text{A}^-) \cdot c(\text{H}_3\text{O}^+) \quad \text{wobei} \quad \textcircled{4} c(\text{HA}) = c_0(\text{HA}) - c(\text{A}^-)$$

Dadurch erhält man die neue Gleichung:

$$\textcircled{5} K_A \cdot (c_0(\text{HA}) - c(\text{A}^-)) = (\text{A}^-) \cdot c(\text{H}_3\text{O}^+)$$

**Ladungsbilanz:** Wenn eine Säure HA mit Wasser reagiert, entsteht immer ein  $\text{A}^-$  (ein einfach negativ geladenes Teilchen) und ein  $\text{H}_3\text{O}^+$  (ein einfach positiv geladenes Teilchen). Die Ladungsbilanz besagt, dass die Summe aller Anionen und aller Kationen gleich sein muss. In einer wässrigen Säurelösung finden sich folgende Ladungsträger vor:  $\text{H}_3\text{O}^+$ ,  $\text{OH}^-$  und  $\text{A}^-$ . Folglich gilt:

$$\textcircled{6} c(\text{H}_3\text{O}^+) = c(\text{OH}^-) + c(\text{A}^-) \quad | -c(\text{OH}^-)$$

$$\textcircled{7} c(\text{A}^-) = c(\text{H}_3\text{O}^+) - c(\text{OH}^-)$$

Die Gleichung ⑦ wird in die Gleichung ⑤ eingesetzt:

$$\textcircled{5} K_A \cdot (c_0(\text{HA}) - c(\text{A}^-)) = (\text{A}^-) \cdot c(\text{H}_3\text{O}^+) \quad \text{wobei} \quad \textcircled{7} c(\text{A}^-) = c(\text{H}_3\text{O}^+) - c(\text{OH}^-)$$

Man erhält die neue Gleichung:

$$\textcircled{8} K_A \cdot (c_0(\text{HA}) - (c(\text{H}_3\text{O}^+) - c(\text{OH}^-))) = (c(\text{H}_3\text{O}^+) - c(\text{OH}^-)) \cdot c(\text{H}_3\text{O}^+)$$

**Ionenprodukt des Wassers:** Als letztes wird die Gleichung des Ionenprodukts des Wassers benötigt, die auch in einer wässrigen Säurelösung gelten muss:

$$\textcircled{9} K_W = c(\text{H}_3\text{O}^+) \cdot c(\text{OH}^-) \quad | \div c(\text{H}_3\text{O}^+)$$

$$\textcircled{10} c(\text{OH}^-) = \frac{K_W}{c(\text{H}_3\text{O}^+)}$$

Die Gleichung ⑩ wird in die Gleichung ⑧ eingesetzt:

$$\textcircled{8} K_A \cdot (c_0(\text{HA}) - (c(\text{H}_3\text{O}^+) - c(\text{OH}^-))) = (c(\text{H}_3\text{O}^+) - c(\text{OH}^-)) \cdot c(\text{H}_3\text{O}^+)$$

$$\text{wobei} \quad \textcircled{10} c(\text{OH}^-) = \frac{K_W}{c(\text{H}_3\text{O}^+)}$$

Daraus erhält man die Gleichung:

$$\textcircled{11} K_A \cdot \left( c_0(\text{HA}) - \left( c(\text{H}_3\text{O}^+) - \frac{K_W}{c(\text{H}_3\text{O}^+)} \right) \right) = \left( c(\text{H}_3\text{O}^+) - \frac{K_W}{c(\text{H}_3\text{O}^+)} \right) \cdot c(\text{H}_3\text{O}^+)$$

Die Gleichung ⑪ kann nun vereinfacht werden zu:

$$\textcircled{12} K_A \cdot \left( c_0(\text{HA}) - c(\text{H}_3\text{O}^+) + \frac{K_W}{c(\text{H}_3\text{O}^+)} \right) = c^2(\text{H}_3\text{O}^+) - K_W$$

Durch eine weitere Vereinfachung der Gleichung (12) erhält man:

$$(13) \quad K_A \cdot c_0(\text{HA}) - K_A \cdot c(\text{H}_3\text{O}^+) + K_A \cdot \frac{K_W}{c(\text{H}_3\text{O}^+)} = c^2(\text{H}_3\text{O}^+) - K_W$$

Man multipliziert beide Seiten der Gleichung (13) mit  $c(\text{H}_3\text{O}^+)$  und erhält:

$$(14) \quad K_A \cdot c_0(\text{HA}) \cdot c(\text{H}_3\text{O}^+) - K_A \cdot c^2(\text{H}_3\text{O}^+) + K_A \cdot K_W = c^3(\text{H}_3\text{O}^+) - K_W \cdot c(\text{H}_3\text{O}^+)$$

Die Gleichung (14) wird gleich null gesetzt:

$$(15) \quad c^3(\text{H}_3\text{O}^+) + K_A \cdot c^2(\text{H}_3\text{O}^+) - K_W \cdot c(\text{H}_3\text{O}^+) - K_A \cdot c_0(\text{HA}) \cdot c(\text{H}_3\text{O}^+) - K_A \cdot K_W = 0$$

Durch eine letzte Vereinfachung der Gleichung (15) erhält man die Gleichung der grossen pH-Formel:

$$(16) \quad c^3(\text{H}_3\text{O}^+) + K_A \cdot c^2(\text{H}_3\text{O}^+) - (K_W + K_A \cdot c_0(\text{HA})) \cdot c(\text{H}_3\text{O}^+) - K_A \cdot K_W = 0$$

Diese Formel entspricht einer kubischen Gleichung der Form

$$x^3 + K_A \cdot x^2 - (K_W + K_A \cdot c_0(\text{HA})) \cdot x - K_A \cdot K_W = 0$$

wobei  $x$  stellvertretend für die Konzentration der  $\text{H}_3\text{O}^+$ -Ionen eingesetzt wurde und die Lösungsvariable ist, nach der die Gleichung aufzulösen ist.

Der pH-Wert berechnet sich aus dem negativen dekadischen Logarithmus der Lösung der kubischen Gleichung<sup>21</sup>.

Zu der kubischen Gleichung der grossen pH-Formel ist noch folgendes zu bemerken:

Das Ionenprodukt des Wassers  $K_W$  ist eine Konstante, die für jede Berechnung unverändert bleibt. Die Säurekonstante  $K_A$  und die Anfangskonzentration der Säure  $c_0(\text{HA})$  sind Variablen, die für jede Berechnung, der verwendeten Säure und Anfangskonzentration entsprechend eingesetzt werden müssen. Dadurch erhält man für jede spezifische Berechnung einen anderen Funktionsgraphen, dessen Nullstellen berechnet werden müssen, um daraus den pH-Wert zu berechnen.

Unter einer Nullstelle versteht man bei einer Funktion einen  $x$ -Wert  $x_0$ , dessen Funktionswert  $f(x_0) = 0$  ist. Der Punkt  $(x_0|0)$  ist damit ein Schnitt- oder Berührungspunkt des Funktionsgraphen von  $f$  mit der  $x$ -Achse. Die kubische Gleichung der grossen pH-Formel kann auch als Funktion betrachtet werden. Da die Gleichung auf der rechten Seite gleich Null gesetzt ist, sind gerade eben diejenigen Werte für  $x$  gesucht, für die der Funktionswert Null herauskommt, sprich die Nullstellen ihres Funktionsgraphen<sup>22</sup>

---

<sup>21</sup> Die grosse pH-Formel: <http://www.explain-it-arium.de/ph-wert-berechnung-6-herleitung-der-grossen-ph-formel-ein-protonige-saeuren-343> (19.10.2023)

<sup>22</sup> Funktionsgraphen: <https://learnattack.de/schuelerlexikon/mathematik/nullstellen> (26.11.2023)

## 6. Auflösen einer kubischen Gleichung

Mit der Herleitung der grossen pH-Formel ist die Arbeit noch nicht getan. Die kubische Gleichung muss noch aufgelöst werden. Zur Berechnung der Nullstellen einer Gleichung dritten Grades gibt es verschiedene Möglichkeiten. Ich habe mich aus Gründen, die ich später noch erläutern werde, für das Newton-Raphson-Verfahren oder einfach nur Newtonverfahren entschieden. Dieses Verfahren wurde von Isaac Newton und Joseph Raphson im 17. Jahrhundert entwickelt. Das Newtonverfahren ist ein numerisches Iterationsverfahren zur Approximation der Nullstellen nicht-linearer Gleichungen.<sup>23</sup>

### 6.1. Newton-Raphson-Verfahren

Mit Hilfe des Newtonverfahrens können für stetig differenzierbare Funktionen höheren Grades die Nullstellen näherungsweise bestimmt werden. Die grundlegende Idee besteht darin, die Funktion in einem Ausgangspunkt zu linearisieren, indem an diesem Punkt ihre Tangente bestimmt wird. Die Nullstelle dieser Tangente ist nun ein verbesserter Näherungswert der Nullstelle der Funktion. Der erhaltene Näherungswert wird als Ausgangspunkt für den nächsten Durchgang verwendet. Dieses Verfahren kann so lange wiederholt werden, bis der Näherungswert so nahe an der Nullstelle der Funktion liegt, dass es den gegebenen Ansprüchen genügt.<sup>20</sup>

Das Newtonverfahren kann am deutlichsten durch eine graphische Darstellung veranschaulicht werden. Es zielt darauf ab, die Nullstelle  $r$  der Funktion  $f(x)$  zu bestimmen, wie in Abbildung 3 markiert. Das Verfahren beginnt mit der Auswahl eines Startwerts  $x_0$ , der idealerweise bereits nahe der gesuchten Nullstelle liegt. An der Stelle  $x_0$  wird an dem Graphen der Funktion die Tangente bestimmt und deren Schnittpunkt mit der  $x$ -Achse berechnet. Man erhält den Wert  $x_1$ , der bereits näher an der tatsächlichen Nullstelle  $r$  liegt.

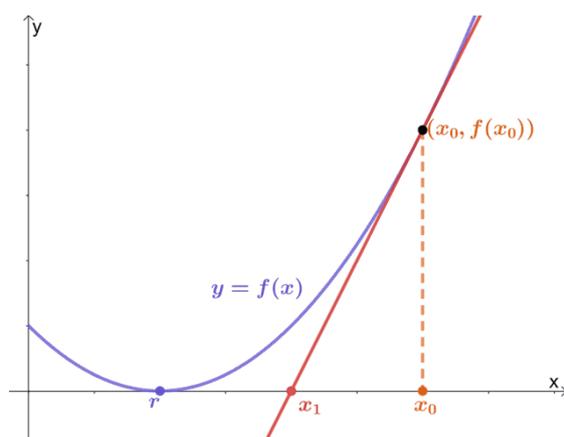


Abb. 3: Newtonverfahren

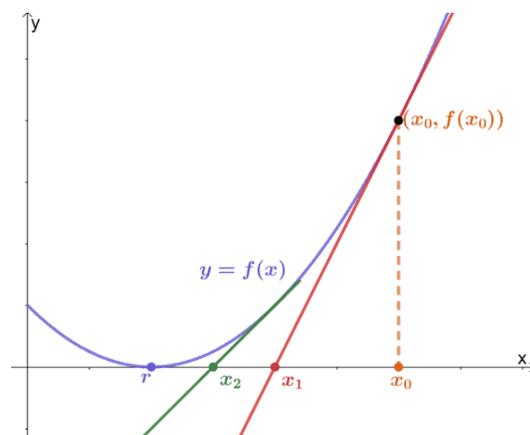


Abb. 4: Newtonverfahren Iteration

Wie in Abbildung 4 dargestellt, wird dieselbe Vorgehensweise nochmals angewandt, wobei der Wert  $x_1$  als neuer Startwert dient. Daraus erhält man den Wert  $x_2$ , der wiederum ein besserer Näherungswert der Nullstelle  $r$  der Funktion  $f(x)$  ist.<sup>24</sup>

<sup>23</sup> Newton-Raphson-Method: <https://www.geeksforgeeks.org/newton-raphson-method/> (10.11.2023)

<sup>24</sup> Newtonverfahren: <https://www.storyofmathematics.com/newtons-method/> (10.11.2023)

## 6.2. Iterationsformel des Newtonverfahrens

Der Vorgang, wie man in einer Iteration von einem Ausgangswert  $x_n$  auf den nächsten verbesserten Näherungswert  $x_{n+1}$  gelangt, kann mathematisch wie folgt beschrieben werden:

Zuerst bestimmt man die Gleichung der Tangente an der Stelle  $x_n$  der Funktion  $f(x)$ . Dabei wird die allgemeine Form der Tangentengleichung benutzt.

$$\textcircled{1} y = mx + q$$

Es ist bekannt, dass die Steigung  $m$  der Tangente der ersten Ableitung der Funktion  $f(x)$  an der Stelle  $x_n$  entspricht. Somit gilt:

$$\textcircled{2} y = f'(x_n) \cdot x + q$$

Der Berührungspunkt  $(x_n | f(x_n))$  der Tangente mit dem Graphen von  $f(x)$  muss auf der Tangente liegen und wird nun in die Tangentengleichung  $\textcircled{2}$  eingesetzt:

$$\textcircled{3} f(x_n) = f'(x_n) \cdot x_n + q$$

Anschliessend wird nach  $q$  umgeformt:

$$\textcircled{4} q = f(x_n) - f'(x_n) \cdot x_n$$

Dieser Term für  $q$  wird wiederum in die allgemeine Tangentengleichung eingesetzt ( $\textcircled{4}$  in  $\textcircled{2}$ ):

$$\textcircled{2} y = f'(x_n) \cdot x + q \quad \text{wobei} \quad \textcircled{4} q = f(x_n) - f'(x_n) \cdot x_n$$

$$\textcircled{5} y = f'(x_n) \cdot x + f(x_n) - f'(x_n) \cdot x_n$$

Durch Ausklammern von  $f'(x_n)$  erhält man die sogenannte Punktsteigungsform der Tangentengleichung:

$$\textcircled{6} y = f(x_n) + f'(x_n) \cdot (x - x_n)$$

Jetzt kann die Tangentengleichung gleich Null gesetzt werden, um deren Schnittstelle mit der  $x$ -Achse, also den nächsten Näherungswert zu bestimmen.

$$\textcircled{7} f(x_n) + f'(x_n) \cdot (x - x_n) = 0$$

Durch Auflösen nach  $x$  erhält man den Term:

$$\textcircled{8} x = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

Dieses  $x$  entspricht der Nullstelle der Tangente und ist der neue Näherungswert, der nun noch als  $x_{n+1}$  bezeichnet werden kann. So ergibt sich der Ausdruck

$$\textcircled{9} x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

der beliebig oft durchgeführt werden kann, um den Näherungswert zu verbessern und dementsprechend auch die Nullstelle der Funktion  $f(x)$  genauer zu approximieren.

Es ist noch zu erwähnen, dass die Approximation der Nullstellen einer Funktion durch Iteration des Ausdrucks

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

nur dann funktioniert, solange  $f'(x_n) \neq 0$  ist. Ergibt die erste Ableitung der Funktion  $f(x)$  an der Stelle  $x_n$  null, so wäre die Tangente nämlich eine Parallele zur x-Achse und hätte folglich mit ihr keinen Schnittpunkt, der als verbesserter Näherungswert berechnet werden kann.<sup>25</sup>

## 7. Excel-Programm zur pH-Wert Berechnung

Da die Berechnung einer kubischen Gleichung von Hand sehr aufwändig ist, habe ich ein Excel-Programm entworfen, das die Berechnung mithilfe des Newtonverfahrens durchführt.

Die grosse pH-Formel ist eine kubische Gleichung, die bis zu drei Nullstellen aufweisen kann. Für die Berechnung des pH-Werts ist jedoch nur eine der drei Lösungen relevant. Durch geschickte Auswahl eines Startwerts, der bereits nahe an der gesuchten Nullstelle liegt, ermöglicht das Newtonverfahren eine präzise Approximation an diese Nullstelle. Aus diesem Grund, weil es aus meiner Sicht zur Erstellung meines Excel-Programms die bestmöglich umsetzbare Methode ist, um die relevante Nullstelle zu bestimmen, habe ich das Newtonverfahren verwendet. Nun besteht die Herausforderung darin, einen Startwert zu finden, der bereits möglichst nahe an der gesuchten Nullstelle liegt.

### 7.1. Auswahl des Startwerts

Die gesuchte Nullstelle entspricht der Konzentration der  $\text{H}_3\text{O}^+$ -Ionen in der wässrigen Lösung. Daher kann schon einmal gesagt werden, dass die Nullstelle  $\geq 0$  sein muss, da es keine negativen Konzentrationen gibt. Als nächster Schritt kann man sich die Konzentration an  $\text{H}_3\text{O}^+$ -Ionen überlegen, die in der wässrigen Lösung maximal überhaupt vorhanden sein könnte. Wenn angenommen wird, dass die Säure HA vollständig dissoziiert, erhält man die grösstmögliche Konzentration an  $\text{H}_3\text{O}^+$ -Ionen, die durch die Säure/Base-Reaktion entstehen kann. Diese entspricht folglich der Anfangskonzentration der Säure  $c_0(\text{HA})$ . Es ist noch zu berücksichtigen, dass vor Zugabe der Säure bereits eine Konzentration von  $10^{-7}$  mol/L an  $\text{H}_3\text{O}^+$ -Ionen durch die Autoprotolyse-Reaktion des Wassers vorhanden ist. Durch Zugabe einer Säure verschiebt sich das Autoprotolyse-Gleichgewicht nach links, was bedeutet, dass die Konzentration von  $10^{-7}$  mol/L an  $\text{H}_3\text{O}^+$ -Ionen kleiner werden kann, ganz sicher aber nicht grösser. Somit ist die grösstmögliche Konzentration an  $\text{H}_3\text{O}^+$ -Ionen, die durch die Autoprotolyse-Reaktion entstehen kann,  $10^{-7}$  mol/L. Addiert man diese zwei grösstmöglichen Konzentrationen der beiden Reaktionen, die in einer wässrigen Lösung ablaufen, erhält man daraus die grösstmögliche Konzentration an  $\text{H}_3\text{O}^+$ -Ionen, die in einer wässrigen Lösung niemals überschritten werden kann. Diese Konzentration entspricht  $c_0(\text{HA}) + 10^{-7}$  mol/L.

Für die tatsächliche Konzentration an  $\text{H}_3\text{O}^+$ -Ionen und somit die gesuchte Nullstelle gilt folglich:

$$0 \leq c(\text{H}_3\text{O}^+) \leq c_0(\text{HA}) + 10^{-7} \text{ mol/L}$$

---

<sup>25</sup> Newton's Method:

[https://math.libretexts.org/Bookshelves/Calculus/Calculus\\_\(OpenStax\)/04%3A\\_Applications\\_of\\_Derivatives/4.09%3A\\_Newton's\\_Method](https://math.libretexts.org/Bookshelves/Calculus/Calculus_(OpenStax)/04%3A_Applications_of_Derivatives/4.09%3A_Newton's_Method) (10.11.2023)

Der Startwert für das Newtonverfahren sollte daher in diesem Bereich gewählt werden. Nach mehreren Versuchen habe ich festgestellt, dass der Funktionsgraph der kubischen Gleichung eine zweite Nullstelle besitzt, die auf der negativen x-Achse nahe an Null liegt. Um sicherzustellen, dass nicht diese falsche Nullstelle approximiert wird, entschied ich mich für den Startwert:

$$x_n = c_0(\text{HA}) + 10^{-7} \text{ mol/L}$$

## 7.2. Entwicklung des Excel-Programms

Nachdem ich einen geschickten Startwert für das Newtonverfahren gefunden hatte, musste ich die Funktionsgleichung der grossen pH-Formel und deren Ableitung in die Iterationsformel des Newtonverfahrens einsetzen, woraus ich folgende Gleichung erhielt:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n^3 + K_A \cdot x_n^2 - (K_W + K_A \cdot c_0(\text{HA})) \cdot x_n - K_A \cdot K_W}{3 \cdot x_n^2 + 2 \cdot K_A \cdot x_n - (K_W + K_A \cdot c_0(\text{HA}))}$$

Nun programmierte ich die Iteration dieses Terms. Ich entschloss mich für eine möglichst präzise Approximation der Nullstelle diesen Vorgang fünfzig Mal zu iterieren, wobei durch die geschickte Auswahl des Startwerts oft weniger Iterationen bereits ausreichend wären. Für die erste Iteration habe ich den Startwert  $x_n = c_0(\text{HA}) + 10^{-7} \text{ mol/L}$  verwendet, wie im vorherigen Kapitel ausgewählt.

Alle Berechnungen programmierte ich auf einem Arbeitsblatt, während ich ein zweites Arbeitsblatt als User Interface verwendete. Auf diesem habe ich Eingabefelder erstellt, in denen die Anfangskonzentration und die Säurestärke für die gewünschte pH-Wert Berechnung eingetragen werden können. Diese Werte werden dann aus den entsprechenden Zellen herausgenommen und in die Iterationsformel für die Variablen  $K_A$  und  $c_0(\text{HA})$  eingesetzt. Zudem habe ich eine Liste mit den gängigsten Säuren und deren Säurestärken hinterlegt, die zur Auswahl stehen. Auch hierbei ist anzumerken, dass die Säurekonstanten von Säuren auf experimentelle Weise bestimmt werden und daher je nach Quelle minimal variieren können. Für meine Liste habe ich die  $\text{p}K_A$ -Werte aus dem Unterrichtsmaterial der ETH-Zürich entnommen.<sup>26</sup>

Eingabefelder:	
Säure oder Base?	Säure
$\text{p}K_A/\text{p}K_B$	-3
Anfangskonzentration in mol/L	0.002

Abb. 5: Eingabefelder des Excel-Programms

Sind die fünfzig Iterationen durchlaufen, erhält man einen Endwert, der eine sehr genaue Approximation der relevanten Nullstelle ist und somit der Konzentration der  $\text{H}_3\text{O}^+$ -Ionen entspricht. Dieser Wert wird zuletzt noch durch seinen negativen dekadischen Logarithmus als pH-Wert im User Interface angegeben. Darunter wird der pH-Wert angegeben, der durch die vereinfachten Formeln berechnet wurde. Zudem wird die Abweichung der beiden Resultate zur Veranschaulichung angezeigt.

Auswertung:	
pH-Wert unter Berücksichtigung der Autoprotolyse des Wassers	2.69897087183664
pH-Wert OHNE Berücksichtigung der Autoprotolyse des Wassers	2.698970004
Abweichung	0.00000086750062

Abb. 6: Auswertung des Excel-Programms

<sup>26</sup> Tabelle  $\text{p}K_A$ -Werte: [https://ethz.ch/content/dam/ethz/special-interest/dual/educeth-dam/documents/Unterrichtsmaterialien/chemie/Leitf%C3%A4higkeit/saeure\\_base\\_reihe2\\_20060706.pdf](https://ethz.ch/content/dam/ethz/special-interest/dual/educeth-dam/documents/Unterrichtsmaterialien/chemie/Leitf%C3%A4higkeit/saeure_base_reihe2_20060706.pdf) (11.11.2023)

## 8. Resultate

Die in Kapitel 4.1 durchgeführte pH-Wert Berechnung mit der vereinfachten Formel kann jetzt noch einmal mit der grossen pH-Formel gerechnet werden, um die Abweichung im Resultat aufzuzeigen. Mit einer wässrigen Lösung von Chlorwasserstoff der Konzentration  $10^{-7}$  mol/L erhält man mit der vereinfachten Formel für starke Säuren den pH-Wert 7.

Gibt man dieselben Ausgangswerte in das Excel-Programm ein, so erhält man auf drei Nachkommastellen gerundet einen pH-Wert von etwa 6.791. Dieser Wert erscheint direkt viel plausibler, da auch wenn eine sehr kleine Konzentration einer Säure hinzugefügt wird, eine leichte Veränderung im pH-Wert auftreten sollte. Die Abweichung der beiden pH-Werte beträgt folglich 0.209.

Berechnung für Säuren	
	<b>Eingabefelder:</b>
Säurenliste mit $pK_A$	Chlorwasserstoff -6
Anfangskonzentration in mol/L	0.000001
	<b>Auswertung:</b>
pH-Wert unter Berücksichtigung der Autoprotolyse des Wassers	6.79101235975005
pH-Wert OHNE Berücksichtigung der Autoprotolyse des Wassers	7
Abweichung	0.20898764024995

Abb. 7: pH-Wert Berechnung einer starken Säure mithilfe des Excel-Programms

Um dasselbe für die vereinfachte Formel zur pH-Wert Berechnung schwacher Säuren/Basen aufzuzeigen, habe ich auch hier eine Berechnung als Beispiel durchgeführt. Nimmt man eine wässrige Lösung von Carbonat ( $pK_B = 3.6$ ) der Konzentration 0.0002 mol/L erhält man durch die vereinfachte Formel für schwache Basen

$$pH = 14 - \frac{1}{2}(3.6 - \lg(0.0002))$$

$$pH = 10.350515$$

auf drei Stellen gerundet einen pH-Wert von 10.350. Mithilfe des Excel-Programms unter Berücksichtigung der Autoprotolyse des Wassers erhält man auf drei Stellen gerundet einen pH-Wert von 10.118. Die Abweichung der beiden Werte beträgt 0.232.

Berechnung für Basen	
	<b>Eingabefelder:</b>
Basenliste mit $pK_B$	Carbonat 3.60
Anfangskonzentration in mol/L	0.0002
	<b>Auswertung:</b>
pH-Wert unter Berücksichtigung der Autoprotolyse des Wassers	10.11837414024220
pH-Wert OHNE Berücksichtigung der Autoprotolyse des Wassers	10.350515
Abweichung	0.23214085758983

Abb. 8: pH-Wert Berechnung einer schwachen Base mithilfe des Excel-Programms

## **9. Diskussion**

### **9.1. Resultate**

In meinem ersten Beispiel liegt die Abweichung der beiden pH-Werte (mit und ohne Berücksichtigung der Autoprotolyse des Wassers) bei 0.209, wobei man diese vielleicht sogar als sehr gering Einstufen würde. Hier ist jedoch nicht zu vergessen, dass die pH-Skala logarithmischer Natur ist. Eine Abweichung von etwa 0.2 bedeutet, dass die Lösung in Wirklichkeit zweimal so sauer/basisch ist, wie man es durch die vereinfachten Formeln berechnet hat.

Je nach Ausgangswerte (Anfangskonzentration und Säure-/Basenstärke) kann die Abweichung in den beiden pH-Werten erst bei der zehnten Nachkommastelle auftreten. In solchen Fällen dürfte man dies als eine sehr geringe Abweichung einstufen. Auf der anderen Seite können die vereinfachten Formeln komplett falsche und teilweise sogar unmögliche pH-Werte liefern (z.B. einen basischen pH-Wert für eine Säure), wodurch die Abweichung sogar  $> 1$  sein kann.

### **9.2. Probleme**

Zu Beginn der Arbeit hatte ich Mühe Literatur zur Herleitung der grossen pH-Formel zu finden. Als ich sie dann endlich fand, stellte sich mir die zweite wichtigste Frage: Wie ist es möglich, diese kubische Gleichung aufzulösen, um die richtige Nullstelle herauszubekommen. Die Methode musste auch in Excel umsetzbar sein. Es hat mich einige Zeit in Anspruch genommen mich mit Excel vertraut zu machen und um herauszufinden, welche Verfahren zur Auflösung einer Gleichung dritten Grades damit realisierbar sind.

Nachdem ich meinte mit dem Excel-Programm fertig zu sein und einige Test-Berechnungen durchführte, lieferte mir das Tool teilweise nicht plausible Werte oder Fehlermeldungen. Auf Überprüfung stellte ich fest, dass dies an der nicht überlegten Auswahl des Startwerts für das Newtonverfahren lag, weshalb ich dies noch auskorrigieren musste.

### **9.3. Weiterführungen**

Das Ziel meiner Arbeit bestand darin ein Konzept, nämlich jenes der pH-Wert Berechnung genauer zu untersuchen und dabei neue Erkenntnisse zu gewinnen, die auch zur Verbesserung der Präzision der pH-Wert Berechnung beitragen. Dabei habe ich jedoch immer noch einige Dinge vernachlässigt, oder der Korrektheit halber ausgeschlossen. Aufbauend auf meinen erarbeiteten Kenntnissen zur pH-Wert Berechnung wässriger Lösungen unter Berücksichtigung der Autoprotolyse des Wassers könnte man dieses Konzept erweitern, sodass es beispielsweise auf mehrprotonige Säuren/Basen anwendbar ist. Eine zusätzliche Erweiterung wäre beispielsweise noch, die Temperaturabhängigkeit des pH-Werts in die Berechnung miteinzubeziehen oder bei Ampholyten die beiden ablaufenden Protolysereaktionen gleichzeitig zu berücksichtigen.

## 10. Fazit

Die zu erwartende Abweichung in den Resultaten einer pH-Wert Berechnung ohne Berücksichtigung und einer unter Berücksichtigung der Autoprotolyse des Wassers konnte durch die Anwendung der grossen pH-Formel erfolgreich bestätigt werden. Des Weiteren ist zu erwähnen, dass für den alltäglichen Gebrauch niemals eine derart genaue Bestimmung des pH-Werts von Nöten ist. In der Industrie jedoch ist man oft auf genaue pH-Werte angewiesen, da gewisse chemische Reaktionen bei bestimmten pH-Werten bevorzugt ablaufen. In der Nahrungsmittelindustrie zum Beispiel muss der pH-Wert streng überwacht werden, um das Wachstum krankheitserregender Mikroorganismen zu verhindern. Hierbei wird die Bestimmung des pH-Werts jedoch nicht durch Berechnungen, sondern durch hochpräzise pH-Messgeräte durchgeführt.<sup>27</sup> Die genaue Formel zur Berechnung des pH-Werts wässriger Lösungen unter Berücksichtigung der Autoprotolyse des Wassers ist somit vor allem in der Theorie von Bedeutung.

---

<sup>27</sup> News-medical.net, Relevanz des pH-Werts in der Industrie:  
<https://www.news-medical.net/life-sciences/Importance-of-Measuring-pH-in-Industry.aspx> (12.11.2023)

## 11. Quellenverzeichnis

### 11.1. Internetquellenverzeichnis

Ethz.ch, Tabelle pK<sub>A</sub>-Werte

[https://ethz.ch/content/dam/ethz/special-interest/dual/educeth-dam/documents/Unterrichtsmaterialien/chemie/Leitf%C3%A4higkeit/saeure\\_base\\_reihe2\\_20060706.pdf](https://ethz.ch/content/dam/ethz/special-interest/dual/educeth-dam/documents/Unterrichtsmaterialien/chemie/Leitf%C3%A4higkeit/saeure_base_reihe2_20060706.pdf) (11.11.2023)

Studyflix.de, Säure/Base-Reaktion

<https://studyflix.de/chemie/korrespondierende-saeure-base-paare-7071> (8.11.2023)

Chemie.de, Säurestärke

<https://www.chemie.de/lexikon/Säurekonstante.html> (8.11.2023)

Studyflix.de, Zusammenhang pH- und pOH-Wert:

<https://studyflix.de/chemie/autoprotolyse-6168> (8.11.2023)

Explain-it-arium.de, Die grosse pH-Formel:

<http://www.explain-it-arium.de/ph-wert-berechnung-6-herleitung-der-grossen-ph-formel-ein-protonige-saeuren-343> (19.10.2023)

Abiweb.de, Mehrprotonige Säuren

<https://www.abiweb.de/anorganische-chemie/donator-akzeptor-prinzip/saeure-base-chemie/mehrprotonige-saeuren.html> (8.11.2023)

Chemie.de, pH-Wert Definition

<https://www.chemie.de/lexikon/PH-Wert.html> (18.10.2023)

Learnattack.de, Funktionsgraphen

<https://learnattack.de/schuelerlexikon/mathematik/nullstellen> (26.11.2023)

Explain-it-arium.de, pH-Wert-Berechnung

<http://www.explain-it-arium.de/ph-wert-berechnung-2-formelsammlung-331> (19.10.2023)

Storyofmathematics.com, Newtonverfahren

<https://www.storyofmathematics.com/newtons-method/> (10.11.2023)

Math.libretexts.org, Newton's Method:

[https://math.libretexts.org/Bookshelves/Calculus/Calculus\\_\(OpenStax\)/04%3A\\_Applications\\_of\\_Derivatives/4.09%3A\\_Newtons\\_Method](https://math.libretexts.org/Bookshelves/Calculus/Calculus_(OpenStax)/04%3A_Applications_of_Derivatives/4.09%3A_Newtons_Method) (10.11.2023)

News-medical.net, Relevanz in der Industrie:

<https://www.news-medical.net/life-sciences/Importance-of-Measuring-pH-in-Industry.aspx> (12.11.2023)

## 11.2. Literaturverzeichnis

Stieger, Markus, Elemente: Grundlagen der Chemie für Schweizer Maturitätsschulen, Stuttgart, 2. Auflage, Klett und Balmer Verlag, 2018

Lötscher, Didier, Skript Grundlagen der Chemie – GF 3. Jahr, Version 1.0 2021/22, 2021

Werner, Durandi, Formeln, Tabellen, Begriffe: Mathematik – Physik – Chemie, Zürich, 7. Auflage, Orell Füssli Verlag, 2019

## 11.3. Abbildungsverzeichnis

Abb. 1: Temperaturabhängigkeit des Ionenprodukts des Wassers.....8  
Stieger, M. (2018). Elemente: Grundlagen der Chemie für Schweizer Maturitätsschulen, S.238

Abb. 2: pH-Skala.....9  
<https://www.ebbecke-verfahrenstechnik.de/wp-content/uploads/ebbecke-ph-wert-d-1030x303.jpg> (3.11.2023)

Abb. 3: Newtonverfahren.....18  
<https://www.storyofmathematics.com/wp-content/uploads/2021/03/visualization-of-how-newtons-method-works.png> (3.11.2023)

Abb. 4: Newtonverfahren Iteration.....18  
<https://www.storyofmathematics.com/wp-content/uploads/2021/03/iterated-newtons-method.png> (3.11.2023)

Abb. 5: Eingabefelder des Excel-Programms.....21  
Ritz, Natanael (12.11.2023)

Abb. 6: Auswertung des Excel-Programms.....21  
Ritz, Natanael (12.11.2023)

Abb. 7: pH-Wert Berechnung einer starken Säure mithilfe des Excel-Programms.....22  
Ritz, Natanael (12.11.2023)

Abb. 8: pH-Wert Berechnung einer schwachen Base mithilfe des Excel-Programms.....22  
Ritz, Natanael (12.11.2023)

Tab. 1: Sachverhalt der Konzentrationsänderung bei schwachen Säuren/Basen.....11  
Ritz, Natanael (5.11.2023)

Alle Strukturformeln wurden von mir selbst mithilfe der Software ChemSketch erstellt.....

## 12. Anhang

### User Interface des Excel-Programms

# Tool zur pH-Wert Berechnung

Das vorliegende Tool dient der Berechnung des pH-Werts wässriger Lösungen unter Berücksichtigung der Autoprotolyse des Wassers. Es wird unter der Annahme betrieben, dass sämtliche Säure/Base-Reaktionen bei einer Temperatur von 25°C erfolgen und die Berechnungen ausschliesslich für einprotonige Säuren und Basen gelten. Bei Berechnungen von Ampholyten werden diese entweder als Säure oder als Base betrachtet.

**Berechnung für Säuren**

Eingabefelder:	
Säurenliste mit $pK_a$	Perchlorsäure -10
Anfangskonzentration in mol/L	0.0000001
Auswertung:	
pH-Wert unter Berücksichtigung der Autoprotolyse des Wassers	6.79101235975002
pH-Wert OHNE Berücksichtigung der Autoprotolyse des Wassers	7
Abweichung	0.20898764024998

**Berechnung für Basen**

Eingabefelder:	
Basenliste mit $pK_b$	Hydrid -26
Anfangskonzentration in mol/L	0.0000001
Auswertung:	
pH-Wert unter Berücksichtigung der Autoprotolyse des Wassers	7.20898764024998
pH-Wert OHNE Berücksichtigung der Autoprotolyse des Wassers	7
Abweichung	0.20898764024998

**Berechnung mit manueller  $pK_a$  /  $pK_b$  Eingabe**

Eingabefelder:	
Säure oder Base?	Säure
$pK_a/pK_b$	-10
Anfangskonzentration in mol/L	0.0000001
Auswertung:	
pH-Wert unter Berücksichtigung der Autoprotolyse des Wassers	6.79101235975002
pH-Wert OHNE Berücksichtigung der Autoprotolyse des Wassers	7
Abweichung	0.20898764024998



Säure/Base-Liste mit  $pK_A$ -/ $pK_B$ -Werten

K		L	M	N		O
Säuren		$pK_A$		Basen		$pK_B$
Perchlorsäure	-9	-9		Perchlorat	23	23
Chlorwasserstoff	-6	-6		Chlorid	20	20
Schwefelsäure	-3	-3		Hydrogensulfat	17	17
Hydroxonium	-1.74	-1.74		Wasser	15.74	15.74
Salpetersäure	-1.32	-1.32		Nitrat	15.32	15.32
Oxalsäure	1.46	1.46		Hydrogenoxalat	12.54	12.54
Hydrogensulfat	1.92	1.92		Sulfat	12.08	12.08
Phosphorsäure	1.96	1.96		Dihydrogenphosphat	12.04	12.04
Fluorwasserstoff	3.14	3.14		Fluorid	10.86	10.86
Ameisensäure	3.70	3.7		Formiat	10.30	10.3
Benzoessäure	4.22	4.22		Benzoat	9.78	9.78
Hydrogenethandioat	4.40	4.4		Oxalat	9.60	9.6
Essigsäure	4.76	4.76		Acetat	9.24	9.24
Kohlensäure	6.46	6.46		Hydrogencarbonat	7.54	7.54
Dihydrogenphosphat	7.21	7.21		Hydrogenphosphat	6.79	6.79
Ammonium	9.21	9.21		Ammoniak	4.79	4.79
Hydrogencarbonat	10.40	10.4		Carbonat	3.60	3.6
Hydrogenphosphat	12.32	12.32		Phosphat	1.68	1.68
Wasser	15.74	15.74		Hydroxid	-1.74	-1.74
Ammoniak	23	23		Dihydrogennitrid	-9	-9
Methan	34	34		Trihydrogencarbid	-20	-20

### **13. Authentizitätserklärung**

Ich bezeuge mit meiner Unterschrift, dass ich diese Arbeit selbstständig verfasst und erlaubte Hilfen von Drittpersonen korrekt veranschaulicht habe. Informationen, die ich wörtlich oder sinngemäss von anderen Publikationen oder Quellen, unter anderem aus dem Internet oder mithilfe künstlicher Intelligenz (KI), verfasst habe, sind klar, wiederauffindbar zitiert und machen nur einen geringen Anteil der Arbeit aus. Die in meiner Arbeit benützten Hilfsmittel entsprechen der Wahrheit, sind vollständig aufgelistet und auf diese Weise noch nicht veröffentlicht worden. Mir ist bewusst, dass ich unter Umständen zu den von mir gebrauchten Hilfsmitteln Stellung nehmen muss.

Ort und Datum: .....

Unterschrift der Schülerin/des Schülers: .....