

QUÍMICA ANALÍTICA I

Documento de apoyo (6): *Cálculo del pH de sistemas monodonadores conjugados nivelados y no-nivelados. Ecuación de Charlot y reducción polinomial con base a la Ley de dilución de Ostwald.*

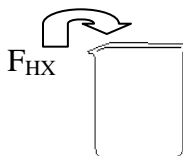
Dr. Alejandro Baeza. Semestre 2010-II.

Planteamiento del sistema en estudio

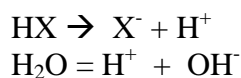
Sistemas nivelados:

Solvo ácidos:

Se mezclan el monodonador solvoácido monoprótico nivelado



La solución se forma según los procesos I y II:

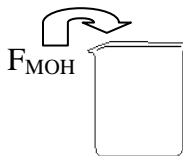


Al equilibrio se cumple el balance de masa, la K_w de disociación del agua y el balance de electroneutralidad:

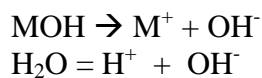
$$\begin{aligned}F_{HX} = C_0 &= [X^-] \\[H^+] &= [OH^-] + [X^-]\end{aligned}$$

Solvo bases:

Se mezclan el monodonador solvoácido monoprótico nivelado



La solución se forma según los procesos I y II:



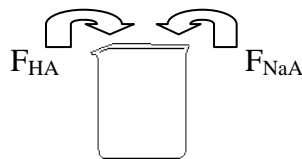
Al equilibrio se cumple el balance de masa, la K_w de disociación del agua y el balance de electroneutralidad:

$$F_{\text{MOH}} = C_o = [M^+]$$

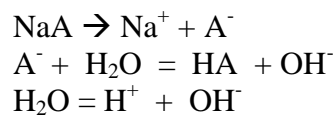
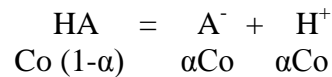
$$[M^+] + [H^+] = [OH^-]$$

Sistemas no-nivelados:

Se mezclan el monodador solvoácido monoprótico de un par y su no-solvobase conjugada:



La solución se forma según los procesos I y II:



Al equilibrio se cumple el balance de masa, la K_a de disociación y el balance de electroneutralidad:

$$F_{\text{HA}} + F_{\text{NaA}} = C_o = [\text{HA}] + [\text{A}^-]$$

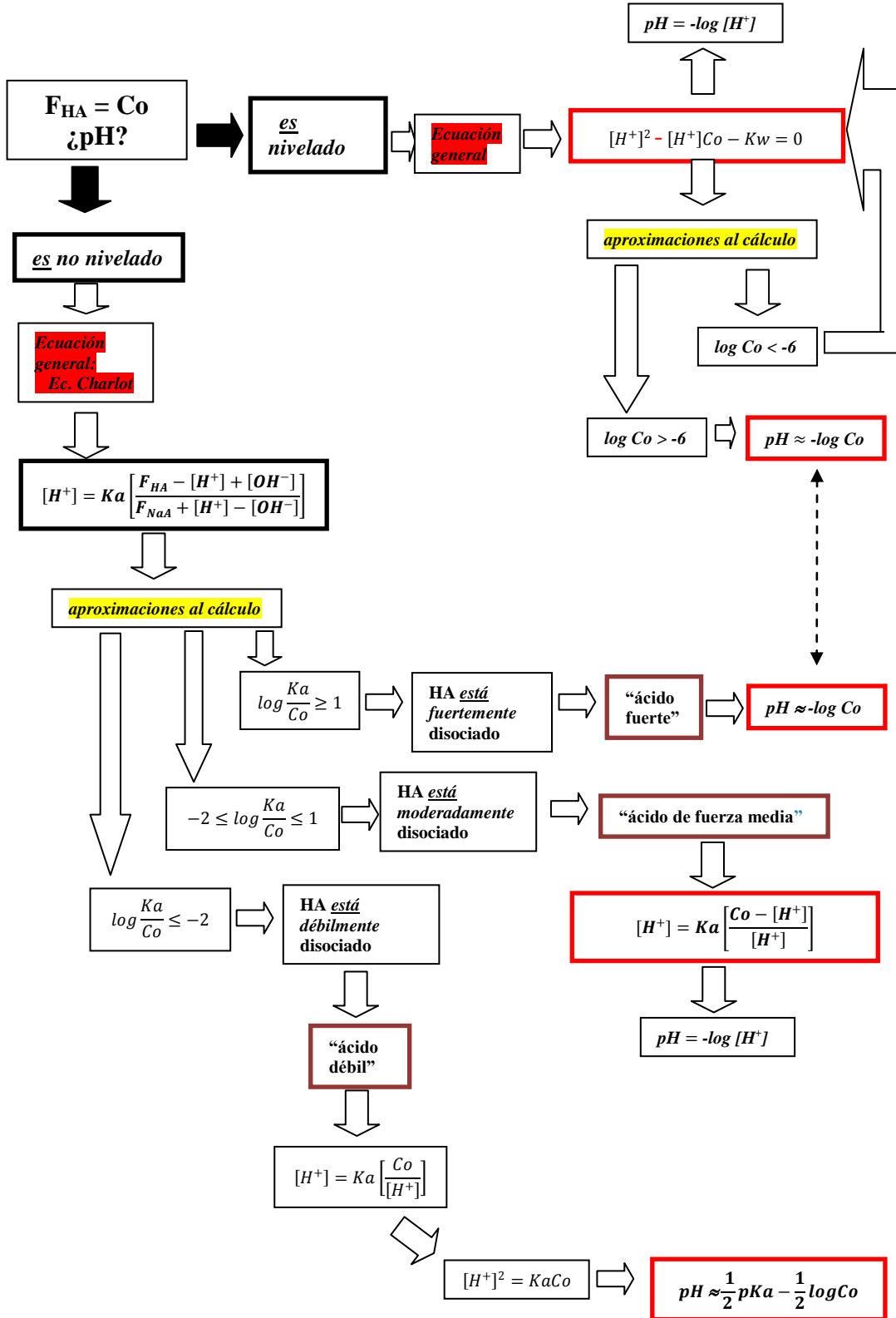
$$K_a = \frac{[\text{A}^-][\text{H}^+]}{[\text{HA}]}$$

$$[\text{Na}^+] + [\text{H}^+] = [\text{OH}^-] + [\text{A}^-]$$

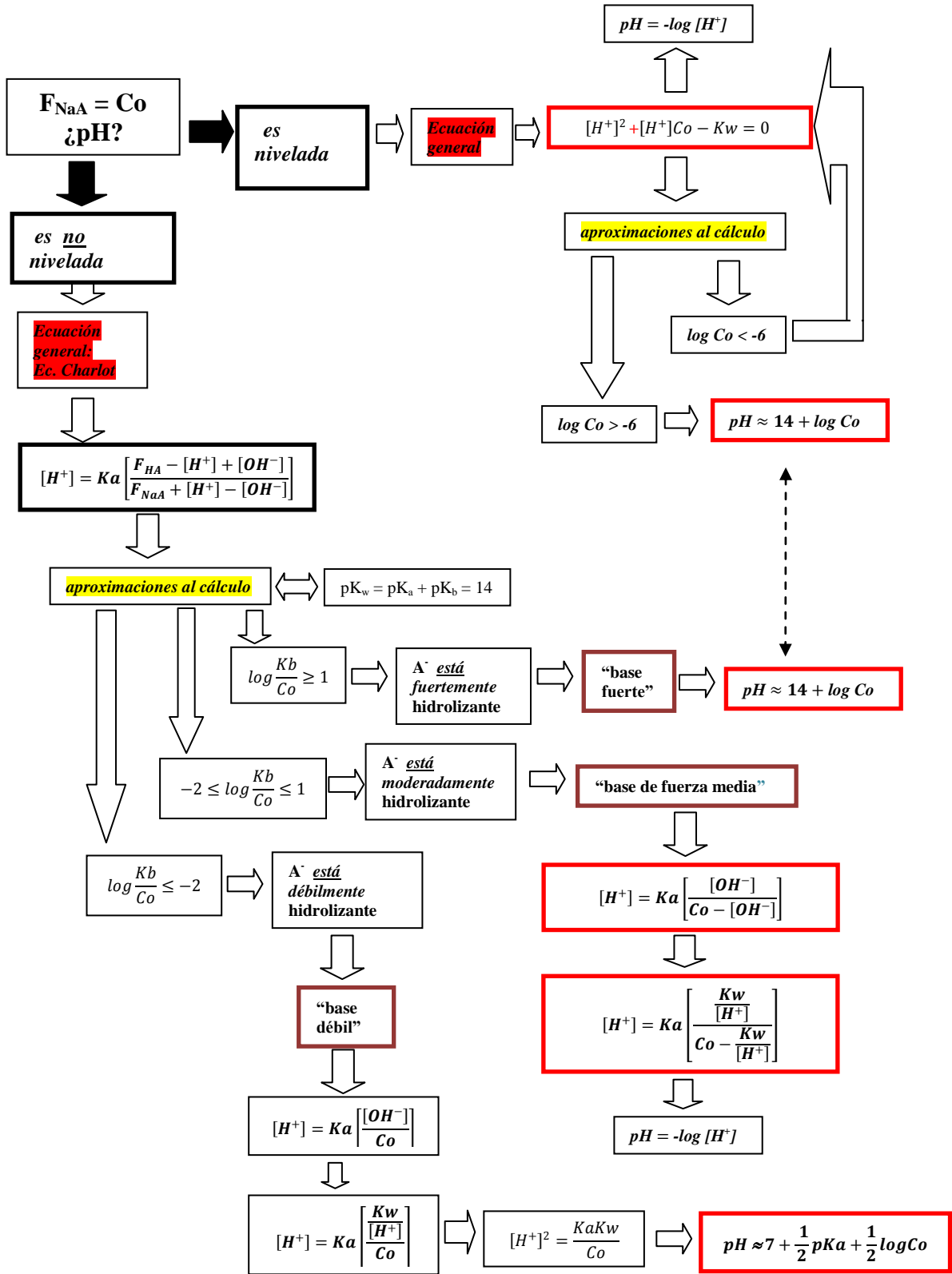
En la sección siguiente se muestran las ecuaciones generales derivadas de los balances de electroneutralidad, de masa, de las K_a , K_b y K_w , así como las condiciones de dilución (Ley de dilución de Ostwald*) que permiten reducir sendos polinomios para el cálculo del pH.

*** $\lim_{C_o \rightarrow 0} \alpha = 1$**

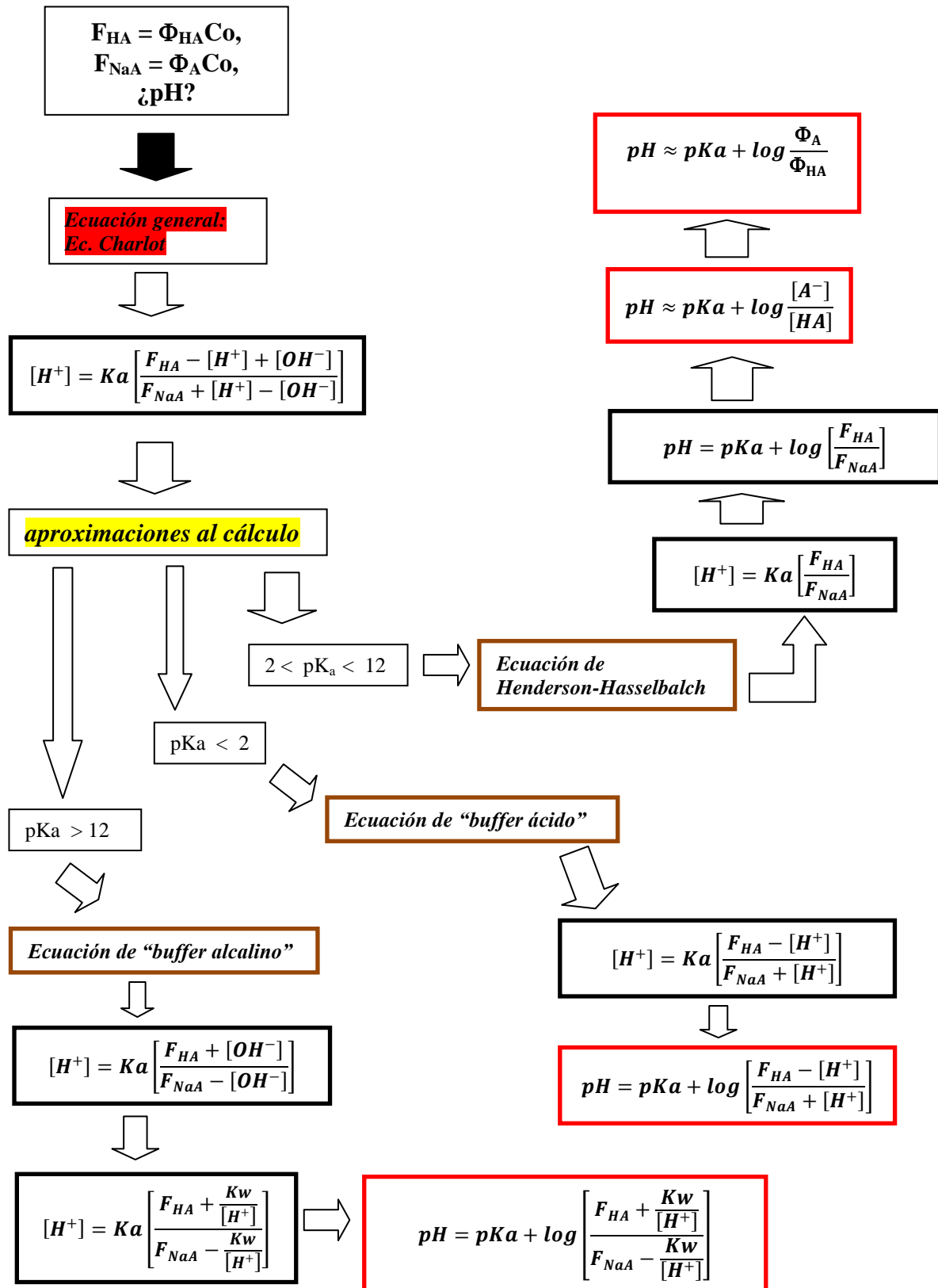
RESUMEN ácidos:



RESUMEN Bases:



RESUMEN par conjugado :



RESUMEN anfolito:

$$F_{\text{NaHA}} = \Phi_{\text{HA}} C_0, \\ \text{¿pH?}$$



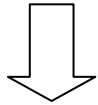
Ecuación general:
Ec. Charlot



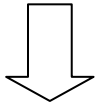
$$[H^+] = \sqrt{\frac{Ka_1 Ka_2 C_0 + Ka_2 K_w}{Ka_2 + C_0}}$$



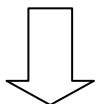
aproximaciones al cálculo



$$pKa_1 + pKa_2 + pC_0 > pKa_1 + pK_w \\ pKa_2 > pC_0$$



$$[H^+] = \sqrt{\frac{Ka_1 Ka_2 C_0}{C_0}}$$



$$pH = \frac{1}{2}(pKa_1 + pKa_2)$$

Bibliografía de apoyo:

- 1.0 J. N. Butler
“Solubility and pH Calculations”
Addison-Wesley Publishing Company, Inc.
1964.
 - 2.0 Richard W. Remette
“Equilibrio y Análisis Químico”
Fondo Educativo Interamericano.
1983.
 - 3.0 Alfred Martin
“Physical Pharmacy”
Fourth Edition
Lea & Febiger, Philadelphia, London.
1993.
 - 4.0 Alejandro Baeza
“Química Analítica. Expresión Gráfica de las Reacciones Químicas”
S. y G. Editores.
2006.
 - 5.0 Ma. del Pilar Cañizares, Georgina A. Duarte
“Fundamentos de Química Analítica”
Facultad de Química. UNAM.
2007.
-