

Studieretningskapitel

Hvad er matematik?

1

Grundbog

Kapitel 12

Matematik og Kemi

Keld Nielsen
Birgit Andresen

Kapitel 12 – Matematik og Kemi

Indholdsfortegnelse

12. Fagligt samarbejde matematik og kemi	2
12.1 Variabelsammenhænge, modeller og regression i kemi	4
Linearisering: Arrhenius ligningen	7
Opstilling og anvendelse af lineære modeller i kemi	8
Eksempel: Bestemmelse af nitritindhold med spektrofotometri.....	10
12.1.2 Projekt: Gid jeg havde et mol kroner – om mængdeberegninger i kemi.....	13
12.1.3 Projekt: Variabelsammenhænge. Om mængder, masser og stofmængdekonzentration	14
12.1.4 Projekt: Spektrofotometrisk bestemmelse af indholdet af farvestof i en sodavand	16
12.1.5 Projekt: Idealgasligningen	18
12.2 Anvendelse af statistik.....	25
12.3 Potensmodeller	27
12.4 Anvendelse af logaritmer	31
12.4.1 Delforsøg (kemi): Måling af pH ved fortynding af en syre henholdsvis en base	33
12.4.2 Delopgave (matematik): Undersøgelse af pH-skalaen	35
12.4.3 Delforsøg (kemi): Måling af pH i opløsninger med samme koncentration med forskellige syrer	37
12.4.4 Delopgave (matematik): Syrestyrkekonstanten K_s og syrestyrkeeksponenten pK_s	38
12.5 Projekt: Titreringskurver.....	42
12.5.1 Forsøg (kemi): Kolorimetrisk titrering af 0,100 M saltsyre	44
12.5.2 Forsøg (kemi): Potentiometrisk titrering af 0,100 M saltsyre	45
12.5.3 Forsøg (matematik): Den teoretiske titreringskurve for potentiometrisk titrering af 0,100 M saltsyre	46
12.5.4 Forsøg (kemi): Kolorimetrisk titrering af 0,100 M ethansyre	49
12.5.5 Forsøg (kemi): Potentiometrisk titrering af 0,100 M ethansyre	50
12.5.6 Forsøg (matematik): Den teoretiske titreringskurve for potentiometrisk titrering af 0,100 M ethansyre.....	51

12. Fagligt samarbejde matematik og kemi

Kemi har brug for matematik

Nutidens naturvidenskaber er utænkelige uden en meget tæt tilknytning til matematik. Her er kemi ingen undtagelse. Forskning inden for kemi og kemisk relaterede områder og anvendelsen af kemisk viden i hverdagen er i dag utænkelig uden brug af matematik. Det sker fx ved opstilling af matematiske modeller for kemiske systemer, analyse af resultater fra kemiske eksperimenter, kalibrering af eksperimentelt udstyr, udvikling af kemisk teori mm. Kort sagt: Kemi gør udpræget brug af matematik, især når kvantitative aspekter af kemiske problemstillinger skal undersøges. Dette smitter også af på gymnasiets kemiundervisning. Men kemiundervisningen kan også spille tilbage til matematikundervisningen i gymnasiet. Fx kan kemi levere data, som kan benyttes til at konkretisere de matematiske begreber og metoder. Herved kan opnås mulighed for en mere levende matematikundervisning.

I gymnasiet findes kemi på tre niveauer, A, B og C. I hvilken grad matematik er nødvendig for kemiundervisningen afhænger af det kemifaglige niveau. På alle tre niveauer er det dog vigtigt, at både kvalitative og kvantitative aspekter af kemi kommer i spil. På kemi C niveau står forståelsen af begreber som uafhængige og afhængige variable, brug af symboler i ligninger, løsning af simple ligninger og en generel talforståelse centralt. Men man kan langt hen ad vejen klare de kvantitative aspekter på kemi C med en god forståelse for "købmandsregning". Groft sagt skal man kunne manipulere med udtrykkene, som sammenknytter begreberne masse, molarmasse, stofmængde og stofmængdekonzentration.

På kemi C skal man typisk kunne løse opgaver som: *Beregn massen af carbondioxid, der kan dannes, når 1000 kg metan forbrændes.* Den konkrete kemiundervisning på C niveau åbner dog mulighed for at arbejde med temaer i kemi, som befordrer mere omfattende brug af matematik, end der forventes ud fra kernestoffet i kemi.

Behovet for matematik er langt mere grundlæggende for kemi på B og A niveauerne. Disse niveauers matematikkompetencer omfatter selvfølgelig også forståelse for forskellige variablsammenhænge, ligningsløsning, forståelse for grafiske afbildninger osv., men i kemiundervisningen benyttes matematik også ved løsning af mere komplicerede kvantitative kemiske problemstillinger. De matematiske værktøjsprogrammer, som er kendt fra matematikundervisningen, er nyttige redskaber ved bestemmelse af kemisk relevante løsninger. Et eksempel er løsning af opgaver, hvor pH skal beregnes i en vandig opløsning af en svag syre.

I det eksperimentelle arbejde gør kemi i udpræget grad brug af matematiske modeller. Dette kan også gælde på C-niveau, hvor eksempelvis lineære modeller kan anvendes ved kalibrering af eksperimentelt udstyr eller ved brug af et spektrofotometer til bestemmelse af koncentrationen af et stof med en karakteristisk farve. Lineære modeller benyttes også ofte til at nå frem til konklusioner på kemiske problemstillinger ved analyse af eksperimentelle resultater. Et eksempel på dette er et Arrhenius-plot til bestemmelse af en reaktions aktiveringsenergi. Endelig kan den beskrivende statistik levere metoder til en bedre udnyttelse af de indsamlede data.

Hvad er matematik? 1

ISBN 9788770668279

Studieretningskapitel 12: Fagligt samarbejde – matematik og kemi
Af Keld Nielsen og Birgit Andresen

Materialet i dette kapitel er bygget op om ideer til projekter, som kan benyttes i et samspil mellem gymnasiets matematik- og kemiundervisning. Der er lagt vægt på, at projekterne primært skal have et eksperimentelt indhold, som naturligt vil afvikles i forbindelse med kemiundervisningen. Materialerne er ikke tænkt som en systematisk gennemgang af emneområder, hverken i matematik eller kemi, men kan forhåbentligt give mulighed for og inspiration til samarbejder mellem de to fag, fx i klasser hvor fagene indgår i studieretninger.

Flere steder refereres til eksperimentelt arbejde, hvor der kræves en eller anden form for vejledning til eleverne. Her kan benyttes det foreliggende materiale, hvor der er tilknyttet vejledninger, men man kan lige så godt bruge egne vejledninger. Egne materialer kan lægges ind, så eleverne tilgår det fra i-bogen.

De faglige områder i kapitlet rækker typisk ud over kernestoffet på C-niveau, og vil således være en del af det supplerende stof. Dele af materialet er skrevet til kemi på B-niveau, da kemi B ikke forudsætter mere end matematik C. Det matematikfaglige indhold ligger i det væsentlige inden for rammerne af matematik på C-niveau. Den sidste del af projektet *Titreringskurver* er dog mere krævende og egner sig bedst til hold, der har matematik på mindst B niveau. B og A udgaverne af *Hvad er matematik?* vil indeholde materiale, der sætter samspillet mellem matematik og kemi på B/A niveau i spil.

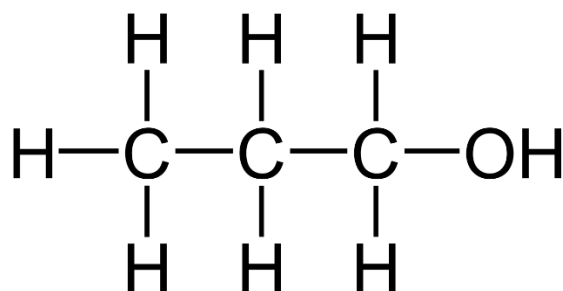
12.1 Variabelsammenhænge, modeller og regression i kemi

En ofte benyttet model i gymnasiets kemiundervisning er den lineære model, hvor der antages en sammenhæng imellem en uafhængig variabel, her x , og en afhængig variabel, her y , som kan skrives på følgende måde: $y=a \cdot x+b$. I visse eksperimentelle sammenhænge kan modellen yderligere forenkles ved at antage proportionalitet mellem de to variable, dvs. at størrelsen b er lig med nul; $y=a \cdot x$.

Et eksempel i kemi, hvor en lineær sammenhæng er i spil, er en eksperimentel bestemmelse af sammenhørende værdier mellem en væskes volumen og masse. I praksis vil volumen af væsken afmåles i fx et måleglas, og størrelsen b vil da svare til massen af dette måleglas. Et andet eksempel, hvor der optræder en lineær model, er sammenhængen mellem udvalgte alcoholors molarmasse og deres kogepunkter, se eksemplet neden for. Som opvarmning kan man først lege med den følgende øvelse:

Øvelse 12.1

I tabellen har vi angivet molekylformler og molarmasser (g/mol) for en række uforgrenede alkoholer med en enkelt OH-gruppe i enden (primære alkoholer). De er altså typisk opbygget på følgende måde (strukturformlen for propan-1-ol):



Navn	Molekylformel	Antal C-atomer	Molarmasse $\frac{g}{mol}$
Methanol	CH_4O	1	32,04
Ethanol	C_2H_6O	2	46,07
Propan-1-ol	C_3H_8O	3	60,10
Butan-1-ol	$C_4H_{10}O$	4	74,12
Pentan-1-ol	$C_5H_{12}O$	5	88,15
Hexan-1-ol	$C_6H_{14}O$	6	102,18

Tabellen kan hentes som excelark [her](#).

- 1) Afbild i dit værktøjsprogram molarmassen som funktion af antal C-atomer
- 2) Hvilken sammenhæng er der tale om?
- 3) Hvilken betydning har parametrene i denne sammenhæng?

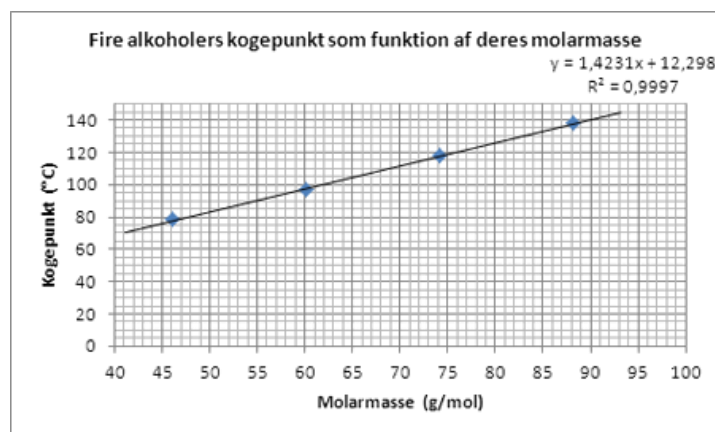
Eksempel: Sammenhængen mellem fire alcohologers molarmasse og deres kogepunkter

I en tabel finder vi følgende oplysninger:

	Molarmasse ($\frac{g}{mol}$)	Kogepunkt ($^{\circ}C$)
Ethanol	46,07	78,29
Propan-1-ol	60,10	97,2
Butan-1-ol	74,12	117,73
Pentan-1-ol	88,15	137,98

Tabellen kan hentes som excelark [her](#).

En grafisk fremstilling af sammenhængen mellem molarmasse og kogepunkt kan se således ud:



Sammenhæng mellem fire alcohologers kogepunkter og deres molarmasse

Værktøjsprogrammet giver samtidig formelen for den lineære model, der beskriver sammenhængen:

$$y = 1,42 \cdot x + 12,30$$

Øvelse 12.2

- 1) Udfør den ovenstående regression i dit værktøjsprogram. Tabellen kan hentes som Excelark [her](#).
- 2) Frembring et residualplot, og kommenter den lineære model ud fra residualplottet.
- 3) Methanol har kogepunktet 64,6 $^{\circ}C$ og hexan-1-ol 157,6 $^{\circ}C$. Hvordan passer modellen fra eksemplet ovenfor på disse to alkoholer? Hvad kan være forklaringen på eventuelle afvigelser.

Proportionalitet: Lambert-Beers lov

Et eksempel på en proportionalitet kan findes i Lambert-Beers lov om *sammenhængen mellem koncentrationen af et stof, S , og absorbansen, A* , (udtrykker hvor meget lys der optages, når der sendes lys igennem en opløsning på en bestemt bølgelængde):

$$A = \varepsilon_{\lambda} \cdot I \cdot S$$

ε_{λ} kaldes den molare absorptionskoefficient og afhænger af bølgelængden af det lys, som sendes igennem et stof samt af stoffet (typisk enhed er $\text{M}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$). l er lysvejen, som typisk måles i cm.

Linearisering: Arrhenius ligningen

I kemi støder man ofte på sammenhænge, som ikke umiddelbart kan beskrives ved en lineær model (eller proportionalitet), men hvor enkle omskrivninger kan føre frem til en lineær sammenhæng mellem to variable. Et eksempel er Arrhenius ligningen, som udtrykker sammenhængen mellem temperaturen T og en reaktions hastighedskonstant k :

$$k(T) = k_0 \cdot e^{\frac{-E_a}{R \cdot T}}$$

T er den absolutte temperatur, R er gaskonstanten, E_a er aktiveringsenergien og k_0 er en konstant, som kaldes den præeksponentielle faktor.

Sammenhængen kan ved brug af logaritmeregnereglerne omskrives til en lineær model:

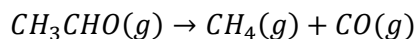
$$\ln(k(T)) = -\frac{E_a}{R} \cdot \frac{1}{T} + \ln(k_0)$$

Øvelse 12.3

- Vis ved brug af logaritmeregnereglerne, at den første ligning kan omskrives til den anden ligning.
- Sæt $x = \frac{1}{T}$ og $\ln(k(T))$ og opskriv den anden ligning som et lineært udtryk: $y=ax+b$.

Øvelse 12.4

I gasfase omdannes ethanal til metan og carbonmonoxid



I et eksperiment er følgende sammenhørende værdier af den absolutte temperatur T og hastighedskonstanten k blevet bestemt:

T (K)	703	733	759	791	811	836	865
$k (M^{-1}s^{-1})$	0,0110	0,0352	0,105	0,343	0,79	2,14	4,95

- Tabellen kan hentes som excelark [her](#). Overfør tabellen til dit værktøjsprogram. Udregn også søjler for den reciproke temperatur $1/T$ og for logaritmen til hastighedskonstanten $\ln(k)$.
- Undersøg, om der er en lineær sammenhæng mellem den reciproke temperatur og den naturlige logaritme til hastighedskonstanten.
- Bestem i bekræftende fald såvel aktiveringsenergien E_a som den præeksponentielle faktor k_0

Opstilling og anvendelse af lineære modeller i kemi

Opstilling og anvendelse af lineære modeller i kemi

Når man i kemi arbejder med fx lineære modeller i forbindelse med behandling af eksperimentelle data, indgår ofte tre led:

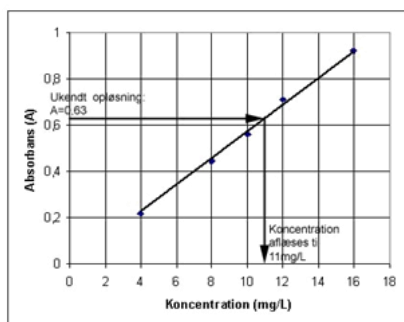
- 1) Opstilling af modellen – herunder argumentation for at en bestemt modeltype, fx lineær model eller proportionalitet, skal benyttes.
- 2) Vurdering af modellen i forhold til de målte størrelser. Kort sagt, er der tale om en acceptabel model eller ej.
- 3) Brug af modellen. Typisk skal man bruge modellen til at bestemme værdien af en variabel. Fx koncentrationen af et gult farvestof i en sodavand, indholdet af nitrit i en vandprøve eller indholdet af ethanol i en rødvin.

Argumenterne for at benytte en bestemt modeltype, fx en lineær model, vil typisk komme fra kemien selv og fra de eksperimentelle metoder, som tages i brug. Hvis man fx ønsker at bestemme indholdet af et gult farvestof i en sodavand, kan man vælge at benytte *spektrofotometri*. Dette er en eksperimentel metode. Kort fortalt går denne metode ud på at sende lys igennem en farvet opløsning på en bestemt bølgelængde. Hvis der er i opløsningen er meget af et bestemt farvet stof, optages meget af lyset. Hvis der ikke er noget stof, der optager lyset på den pågældende bølgelængde, passerer lyset uhindret igennem. Hvor meget lys, der optages, udtrykkes i en størrelse kaldet absorbansen, A .

Metoden kan gøres kvantitativ. Dette gøres ved at fremstille en række opløsninger med kendte koncentrationer af stoffet, der skal undersøges. Derefter måles hvor meget lys, der optages (dvs. størrelsen af absorbansen måles). Hvis koncentrationerne er valgt fornuftigt, bør modellen følge Lambert-Beers lov, se formel (1) ovenfor.

Det er vigtigt at bestemme modellens parametre og vurdere modellens kvalitet, inden modellen benyttes i videre beregninger. Principielt skal modellen følge Lambert-Beers lov, dvs. der skal være tale om en proportionalitet mellem absorbansen og koncentrationen af stoffet i de kendte blandinger. I praksis får man ofte en lineær model, dvs. konstantleddet b ikke bliver lig med 0. Den grafiske afbildning af

sammenhængen mellem koncentrationen og absorbansen kaldes *en standardkurve*. Et eksempel ses på figuren.



Standardkurve. Eksempel på sammenhæng mellem koncentration og absorbans.

Til at opstille modellen og til at bestemme modellens parametre benyttes et matematisk værktøjsprogram, der kan lave regression, tegne tilhørende grafer og bestemme regneforskrifterne. Ud fra regneforskriften kan man bestemme modellens parametre. Samtidig giver de som regel også andre vigtige redskaber til vurderingen af modellen, fx forklaringsgraden, r^2 . Nogle værktøjsprogrammer giver også mulighed for at "tvinge" modellen til at gå gennem $(0, 0)$, dvs. sikre at modellen udtrykker proportionalitet.

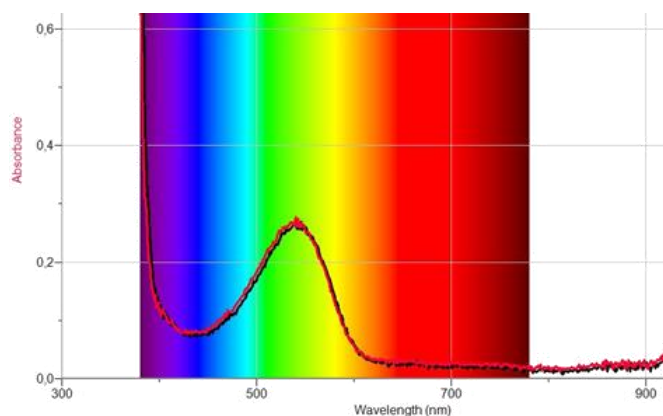
Forklaringsgraden i sig selv er ikke tilstrækkelig til at vurdere modellens kvalitet. Der bør altid være et grafisk billede af regressionsmodellen sammen med et plot af de eksperimentelt fundne data. Men det kan være svært at vurdere om datapunkternes afvigelser fra grafen er systematiske eller forekommer tilfældige. Dette kan bedst afgøres med et residualplot, hvor forskellen mellem modellens forudsigelse og de målte data afbildes som funktion af den uafhængige variabel. Derved kan systematiske afvigelser ved modellen nemt iagttages.

Når modellen er opstillet og vurderet, kan man endelig benytte den til at bestemme koncentrationen af stoffet i den ukendte opløsning – det var jo det egentlige formål. Dette gøres ved at måle absorbansen i den ukendte prøve, dernæst "gå-baglæns" og bestemme koncentrationen – se grafen med standardkurven.

Eksempel: Bestemmelse af nitritindhold med spektrofotometri

I forbindelse med undersøgelse af en vandprøve vil man undersøge indholdet af nitrit. Nitrit omdannes normalt hurtigt videre til nitrat i vand. Hvis man finder nitrit i en vandprøve, er det ofte tegn på, at der ikke er dioxygen nok i vandet. Nitrit er et giftstof for dyr, der lever i vand. I fiskevand med gydning må indholdet af nitrit ikke overstige $0,1 \text{ mg } \frac{\text{NO}_2^-}{\text{L}}$ og i laksevand må nitrit ikke overstige $0,03 \text{ mg } \frac{\text{NO}_2^-}{\text{L}}$.

Nitrit kan ved en kemisk reaktion danne et rødt farvestof, og derfor vælges at benytte spektrofotometri som kemisk metode. Absorptionsspektret for dette røde farvestof ses på figuren. Læg mærke til at det er komplementærfarven til rødt, der absorberes kraftigst! Netop fordi rødt lys stort set slipper uhindret igennem ser opløsningen rød ud.



Absorptionsspektrum for rødt farvestof dannet ud fra nitrit.

Standardkurven vælges at laves ved 543 nm (svarende til komplementærfarven grøn, hvor absorptionen topper). I tabellen kan ses de målte værdier for sammenhængen mellem absorbans og indholdet af nitrit (i mg/L) i standardprøverne.

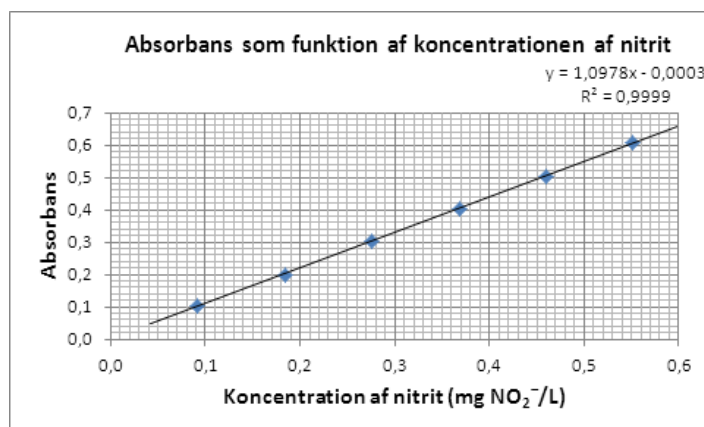
Koncentration af nitrit ($\text{mg } \frac{\text{NO}_2^-}{\text{L}}$)	0,092	0,184	0,276	0,368	0,460	0,552
Absorbans	0,103	0,198	0,304	0,404	0,503	0,607

Tabellen kan hentes som excelark [her](#).

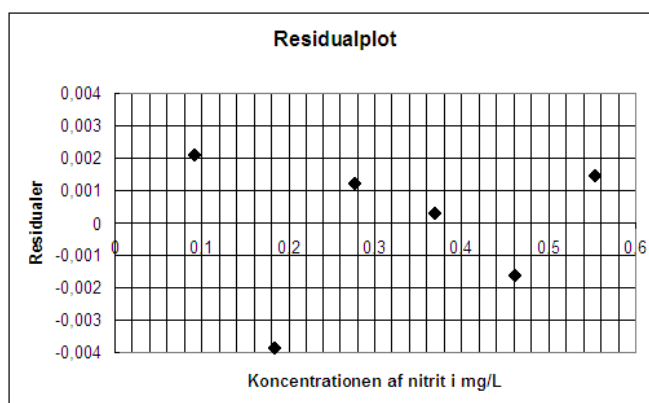
Modellen bør følge Lambert-Beers lov, og derfor skal det undersøges om der er proportionalitet mellem koncentration af nitrit og absorbansen.

Data lægges ind i et regneark, og der laves et plot af punkterne. Den bedste rette linje, som går gennem (0, 0), bestemmes.

Den grafiske afbildning ses på figuren. Samtidig er modellens parameter, a og forklaringsgraden r^2 bestemt.



Den grafiske afbildning tyder på, at modellen passer fint med data, da der kun ser ud til at være meget små afvigelser mellem modellen (den rette linje) og de målte datapunkter. Dette understøttes yderligere af, at forklaringsgraden er meget tæt på 1. For at undersøge om konklusionen holder, beregnes residualerne, og der laves et residualplot.



Som det kan ses af residualplottet er afvigelserne dels små i forhold til modellens forudsigelser, og dels ligger afvigelserne spredt uden at vise nogle systematiske afvigelser.

Konklusion: Modellen $y=1,097 \cdot x$ er en acceptabel model for forsøget.

En vandprøve udtages fra en å, og prøven behandles på samme måde, som opløsningerne der dannede udgangspunkt for standardkurven. I denne vandprøve måles absorbansen til at være 0,059.

Koncentrationen af nitrit i mg/L kan nu bestemmes ud fra modellen:

$$0,059 = 1,097 \cdot x \Leftrightarrow x = \frac{0,059}{1,097} = 0,05378$$

Der er således et indhold af nitrit på 0,054 mg/L i åen. Dvs. at vandprøven tyder på, at åen ikke er velegnet til laks, men andre fisk vil kunne gyde i vandet.

Øvelse 12.5

Phosphater et vigtigt næringssalt for planter. Er der for små mængder af fosfat vil det hæmme vandplanters og algers vækstmuligheder, mens for store mængder fosfat i fx en sø eller et vandløb kan udgøre et alvorligt forureningsproblem. Derfor renses spildevand for fosfat, inden det rensede vand sendes tilbage til naturen. Indholdet af fosfat i en vandprøve kan kvantitativt bestemmes ved spektrofotometri, idet fosfat kan danne et blå farvestof ved reaktion med ammoniummolybdat. Man opdeler søerne i følgende typer: Næringsfattige, næringsrige og meget næringsrige.

I en næringsfattig sø er fosfatindholdet 0-0,03 mg $\frac{PO_4^{3-}}{L}$, i næringsrig sø er indholdet 0,015-0,3 mg $\frac{PO_4^{3-}}{L}$ og i meget næringsrig sø er der mere end 0,3 mg $\frac{PO_4^{3-}}{L}$

En vandprøve fra en sø undersøges. I standardopløsninger måles absorbansen ved en bølgelængde på 660 nm, og resultaterne ses i nedenstående tabel. En vandprøve fra søen behandles på samme måde som standardopløsningerne, og der måles en absorbans på 0,113.

Koncentration af fosfat (mg $\frac{PO_4^{3-}}{L}$)	0,5	1	2	3	5
Absorbans	0,07	0,18	0,35	0,51	0,84

Tabellen kan hentes som excelark [her](#).

- Forklar, hvorfor man måler på en bølgelængde på 660 nm, når opløsningen er blå.
- Frembring standardkurven. Er der den forventede proportionalitet?
- Vurdér modellen, idet der også inddrages et residualplot i undersøgelsen.
- Vurdér, hvilken type sø vandprøven stammer fra.

12.1.2 Projekt: Gid jeg havde et mol kroner – om mængdeberegninger i kemi

Fagligt indhold:

Kemi: Mængdeberegninger, hvad er *et mol*.

Matematik: Skalering - mellem ét atom og ét mol atomer, og mellem en unit og et gram

Projektets mål

Projektets mål er at få en forståelse for, hvorfor man netop har valgt at anvende antallet et mol til kemiske mængdeberegninger.

Kort om formlen der til benyttes ved kemiske mængdeberegninger $m=n \cdot M$.

Massen af et mol stof betegnes stoffets molarmasse. Den molare masse angiver massen (i g) pr. mol af stoffet og har derfor enheden $\frac{g}{mol}$.

Sammenhængen mellem stofmængde (antal mol (n)), masse (m) og molarmasse (M) kan beskrives ved følgende formel: $m=n \cdot M$.

- Hvor stort et antal er et mol?
- Man vinder et mol kroner i LOTTO, og ønsker derfor at bygge en terningformet pengetank. Man får et mol kroner udbetalt i 1000 kr. sedler, så de fylder mindst muligt. Hver seddel måler 7,0 cm · 16.5 cm og er 1 mm tyk. Hvor stor skal pengetankens kantlængde være? Hint. Start med at beregne rumfanget af én pengeseddel i m^3 .
- Hvad er din konklusion på ovenstående opgave?
- Forklar, hvorfor man i kemien har indført en så stor størrelsesenhed som et mol.
- Find sammenhængen mellem enheden unit og enheden gram. 1 u = ?
- Hvad vejer ét CO_2 -molekyle i enheden unit?
- Hvad vejer ét mol CO_2 -molekyler i enheden unit?
- Hvad vejer ét mol CO_2 -molekyler i enheden gram?
- Forklar nu, hvorfor man har valgt det "mystiske antal" et mol, når man skal udføre mængdeberegninger i kemi.

12.1.3 Projekt: Variabelsammenhænge. Om mængder, masser og stofmængdekonzentration

Fagligt indhold

Kemi: Mængdeberegninger.

Matematik: Variabelsammenhænge.

Projektets mål

Projektets mål er at koble variabelsammenhænge og mængdeberegninger.

Kort om formlerne til mængdeberegninger: $m=n \cdot M$ og $n=c \cdot V$

Massen af et mol stof betegnes stoffets molarmasse. Den molare masse angiver massen (i g) pr. mol af stoffet og har derfor enheden $\frac{g}{mol}$.

Sammenhængen mellem stofmængde (antal mol (n)), masse (m) og molarmasse (M) kan beskrives ved følgende formel: $m=n \cdot M$.

Stofmængdekonzentrationen af et stof udtrykker, hvor mange mol af stoffet der er pr. liter opløsning. Stofmængdekonzentrationen har derfor enheden $\frac{mol}{L}$ eller som forkortelse M .

Sammenhængen mellem stofmængdekonzentration (c), volumen (V) og stofmængde (n) kan beskrives ved følgende sammenhæng: $n=c \cdot V$.

- a) Hvad angiver et mol?

Tag i de næste 6 spørgsmål udgangspunkt i ionforbindelsen KCl

- b) Beregn kaliumchlorids molarmasse. Husk enhed.
- c) Molarmasse M er i dette eksempel nu en konstant. I formelen $m=n \cdot M$ er de to variable m og n ligeværdige, og kan derfor begge optræde som afhængige eller uafhængige variable.
- d) Opskriv formelen, så n er den uafhængige variabel, og m er den afhængige variabel. Altså $m(n)=$
- e) Beskriv sammenhængen $m(n)$ ved brug af tabel, graf og til slut med ord.
- f) Opskriv formelen, så m er den uafhængige variabel, og n er den afhængige variabel. Altså $n(m)=$
- g) Beskriv sammenhængen $n(m)$ ved brug af tabel, graf og til slut med ord.

To forskellige selvvalgte ionforbindelser sammenholdes

- h) Vælg to forskellige ionforbindelser og beregn de to tilhørende molarmasser.
- i) Indtegn i samme koordinatsystem $m(n)$ for de to valgte ionforbindelser.
- j) De to grafer sammenholdes. Hvad beskriver hældningskoefficienten?
- k) Forklar, hvordan man ved aflæsning på grafen for $m(n)$ samt ved beregning kan bestemme massen, når stofmængden er givet. Tag udgangspunkt i et af de to ovenstående selvvalgte eksempler
- l) Forklar, hvordan man ved aflæsning på grafen for $m(n)$ samt ved beregning (solve) kan bestemme stofmængden, når massen er givet. Tag udgangspunkt i et af de to ovenstående selvvalgte eksempler

Tag udgangspunkt i ionforbindelsen KCl med stofmængdekonzentrationen $c=0,100 \frac{\text{mol}}{\text{L}}$

Stofmængdekonzentrationen c er i dette eksempel nu en konstant. I formelen $n=c \cdot V$ er de to variable n og V ligeværdige, og de kan derfor begge optræde som afhængige eller uafhængige variable.

- a) Opskriv formelen, så n er den uafhængige variabel, og V er den afhængige variabel. Altså $V(n)=$
- b) Beskriv sammenhængen $V(n)$ ved brug af tabel, graf og til slut med ord.
- c) Opskriv formelen, så V er den uafhængige variabel, og n er den afhængige variabel. Altså $n(V)=$
- d) Beskriv sammenhængen $n(V)$ ved brug af tabel, graf og til slut med ord.

Sammenkobling af formlerne til stofmængdeberegninger $m=n \cdot M$ og $n=c \cdot V$

- e) Der skal fremstille 250 mL af en opløsning KCl, hvis stofmængdekonzentrationen er $0.4 \frac{\text{mol}}{\text{L}}$.
- f) Hvor stor en masse KCl skal der anvendes?
- g) Ved at sammenkoble de to formler til stofmængdeberegninger, skal der opskrives én formel, hvor massen direkte kan beregnes, når molarmasse M , volumen V , og stofmængdekonzentrationen c er kendt.

12.1.4 Projekt: Spektrofotometrisk bestemmelse af indholdet af farvestof i en sodavand

Fagligt indhold

Kemi: Mængdeberegninger, spektrofotometri.

Matematik: Variabelsammenhænge, funktioner og modellering (regression og residualplot).

Projektets mål

Projektets mål er at arbejde med modelbegrebet. Arbejdet omfatter: modelafgrænsning, opstille og udføre forsøg, modellere (analysere forsøg), tolke forsøgsresultater.

Gennemførelse af projektet

I kemiundervisningen gennemføres journalforsøget "Sodavand med ét farvestof". Dvs. absorptionsspektrum bestemmes for farvestoffet Quinolingul (E104) (hvis der er tilsat et andet farvestof, undersøges dette), der laves en standardkurve og der måles på sodavand. I matematik behandles data. Ofte vil data bedst kunne tilpasses med en lineær model. Men Lambert-Beers lov udtrykker proportionalitet mellem absorbansen og koncentrationen af farvestoffet. Hvis værktøjsprogrammet giver en lineær model, som den bedste tilpasning til data, prøves begge modeltyper i projektet.

- Argumenter for valget af bølgelængde, hvorved der måles.
- Benyt dit værktøjsprogram til at opstille modellen.
- Hvis modellen viser sig at være en lineær model, bestemmes modellens parametre a og b.
- Lav en grafisk afbildning af standardkurven, og bestem forklaringsgraden r^2 .
- Vurder modellen på baggrund af punkt d).
- Lav et residualplot og giv en samlet vurdering af den lineære model i forhold til de målte data.
- Bestem på baggrund af den lineære model koncentrationen af Quinolingul i sodavand.
- Hvis dit værktøjsprogram giver mulighed for at "tvinge" grafen gennem (0, 0), gøres dette. Herved opnås proportionalitet mellem koncentrationen af farvestoffet og absorbansen. Bestem modellens parameter a.

- i) Lav en grafisk afbildning af standardkurven, og bestem forklaringsgraden r^2 .
- j) Vurder modellen i h) på baggrund af punkt i).
- k) Lav et residualplot og giv en samlet vurdering af modellen i h) i forhold til de målte data.
- l) Bestem på baggrund af modellen i h) koncentrationen af Quinolingul i sodavand.
- m) Sammenlign bestemmelsen af farvestoffets koncentration bestemt ud fra den lineære model og ud fra modellen, som udtrykker proportionalitet.
- n) Ifølge den nuværende lovgivning må der højst tilsættes en bestemt mængde af et farvestof som fx Quinolingul/L drikkevare. Dette er opført i den såkaldte Positivliste. Find ved brug af nettet hvor meget der maksimalt må tilsættes af farvestoffet til en drikkevare, og vurder om den undersøgte sodavand overholder lovgivningen.

12.1.5 Projekt: Idealgasligningen

Fagligt indhold

Kemi: Mængdeberegninger, gassernes tilstandsligning.

Matematik: Variabelsammenhænge, funktioner og modellering af potensmodeller (regression og residualplot).

Projektets mål

Projektets mål er at arbejde med modelbegrebet. Arbejdet omfatter: modelafgrænsning, opstille og udføre forsøg, modellere (analysere forsøg), tolke forsøgsresultater, eventuelt opstilling en ny model.

Kort om idealgasligningen

En ideal gas kan beskrives ved følgende sammenhæng:

$$p \cdot V = n \cdot R \cdot T$$

hvor n er et mål for stofmængden. Denne matematiske model kaldes idealgasligningen. Der indgår 4 variable. Kender man de 3 af de 4 variable, kan man altid beregne den sidste.

Øvelse 12.6

- I gasfase er der relativ stor afstand mellem molekylerne, og de påvirker hinanden i langt mindre grad end stof, der findes på væskeform eller fast form. Undersøg hvilke forudsætninger, der opstilles, for at en gas kan betragtes som en ideal gas. Forklar hvad der menes med begrebet model.
- Beskriv de indgående størrelser i idealgasligningen (husk enheder).
- Angiv for hver af de 4 størrelser, om der er tale om en variabel eller en konstant.
- Vis med brug af dit værktøjsprogram, hvorledes man ud fra kendskab til tre af de variable kan bestemme den fjerde.

Hvis man holder stofmængden n konstant, kan man opskrive 3 specialtilfælde af idealgasligningen.

Boyle-Mariottes lov: Temperaturen T holdes konstant. Det vil sige:

$$p \cdot V = \text{konstant}$$

Gay-Lussacs lov: Volumen V holdes konstant. Det vil sige:

$$p = \textit{konstant} \cdot T$$

Charles lov: Trykket p holdes konstant. Det vil sige: Altså:

$$V = \textit{konstant} \cdot T$$

Øvelse 12.7

- Beskriv hvad det betyder, at størrelsen n holdes konstant i de tre specialtilfælde.
- Beskriv hvad det eksperimentelt betyder, at henholdsvis T , p og V holdes konstant, samtidig med at stofmængden er den samme i de tre tilfælde.
- Angiv hvilken type proportionalitet, der er mellem variablene i de tre love.
- Bestem konstanten i de tre tilfælde ud fra idealgasligningen.



Boyle-Mariottes lov har fået navn efter den irsk-engelsk kemiker og fysiker Robert Boyle (1627-91), og den franske fysiker Edmé Mariotte (ca. 1620-84), som i begyndelsen af 1660'erne begge formulerede sammenhængen.



Gay-Lussacs lov har fået navn efter den franske kemiker og fysiker Joseph Louis Gay-Lussac (1778 – 1850), som 1809 fremsatte loven om sammenhængen mellem en gas tryk og temperatur.



Charles lov er opkaldt efter den franske fysiker Jacques A. C. Charles (1746-1823). Loven blev ganske vist endeligt formuleret af Joseph L. Gay-Lussac i 1802, men han krediterede Jacques A. C. Charles for at fundet sammenhængen i 1787. Du kan læse Gay-Lussacs egen fremstilling [her](#).

Boyle-Marioettes lov

Sammenhængen kan skrives på følgende måder (a er lig med konstanten):

$$p \cdot V = a, V = \frac{a}{p} \text{ eller } p = \frac{a}{V}.$$

Først skal Boyle-Mariottes lov eftervises. Der udføres en række forsøg med atmosfærisk luft som idealgas. En sprøjte med en mængde atmosfærisk luft benyttes. I sprøjten vil der være en bestemt mængde gas partikler. Temperaturen holdes konstant, og der måles sammenhørende værdier af volumen og tryk. Til forsøget skal bruges en tryksensor med ventil, en sprøjte med stempel, et stykke plastslange til at forbinde sprøjten med tryksensoren samt dataopsamlingsudstyr.

Alternativ

Hvis man ikke ønsker selv at lave forsøget kan man anvende nedenstående data. Her blev sprøjten nulstillet ved $V = 20\text{cm}^3$. Resultaterne fra forsøget blev:

V (cm^3)	6	8	10	12	14	16	18	20
P (bar)	2,41	2,11	1,71	1,51	1,33	1,21	1,09	1,00

Tabellen kan hentes som Excelark [her](#).

I de følgende øvelser arbejdes enten med jeres egne resultater eller med dem i tabellen.

Øvelse 12.8

- Opstil en hypotese om sammenhængen mellem de målte tal ud fra Boyle-Mariottes lov.
- Udregn produktet af sammenhørende værdier for V og p .
- Hvad forventes om disse 8 produkter? Bliver hypotesen bekræftet?
- Er afvigelserne tilfældige eller systematiske?

Øvelse 12.9

Undersøgelse af Boyle-Mariottes lov på formen $V = \frac{a}{p}$ eller $V = a \cdot p^{-1}$

- Plot data som (p, V) og lav potensregression $y = b \cdot x^a$.
- Hvad forventes om eksponenten? Bliver hypotesen bekræftet?
- Lav et residualplot. Hvad viser dette?

Øvelse 12.10

Undersøgelse af Boyle-Mariottes lov ved hjælp af linearisering

- Udregn tabelværdier for $p^{-1} = \frac{1}{p}$.
- Plot sammenhørende værdier af p^{-1}, V .
- Lav lineær regression ($y=a \cdot x+b$).

- d) Hvad forventes om konstantleddet b ? Bliver hypotesen bekræftet?
- e) Lav et residualplot. Sammenhold resultaterne med resultaterne i punkt c) i øvelse 12.9

Da forsøget blev udført, var der en ukendt mængde af gas i gummislangen og tryksensoren. Dette volumen kaldes V_0 .

Øvelse 12.11

- a) Opstil på baggrund af denne information en ny model. V_0 skal indgå i den nye model.
- b) Isolér V i den nye model.
- c) Kan man nu forklare hvorfor den lineære regression fra øvelse 12.10 ikke går gennem punktet $(0,0)$?
- d) Kan man ud fra den lineære regression i øvelse 12.10 bestemme V_0 ?
- e) Korrigér de målte volumener i tabellen ved at lægge V_0 til. Plot derefter sammenhørende værdier af $(V + V_0, p)$ og lav potensregression.
- f) Passer denne model bedre med Boyle-Mariottes lov? Forklar!

Øvelse 12.12

Ny hypotese: Undersøgelse af Boyle-Mariottes lov på formen $p \cdot (V + V_0) = a$:

- a) Udregn produktet af sammenhørende værdier for $(V + V_0)$ og p .
- b) Bliver hypotesen fra øvelse 12.11 nu bekræftet?
- c) Er afvigelserne tilfældige eller systematiske?

Gay-Lussacs lov

Sammenhængen kan skrives på følgende måder (a er lig med konstanten):

$$p = a \cdot T \text{ eller } \frac{p}{T} = a$$

Først skal Gay-Lussacs lov eftervises. Samtidig skal det absolutte nulpunkt bestemmes. Dertil måles sammenhørende værdier af tryk og temperatur

Overvej, hvordan man kunne lave en række forsøg, med det formål at eftervise denne lov?

Til forsøget skal bruges en tryksensor med ventil og slanger, en speciel flaske med tynd bøjet hals, isterninger, dyppekoger, vandbad samt dataopsamlingsudstyr.

Alternativ

Hvis man ikke ønsker selv at lave forsøget, kan man anvende nedenstående data. Her blev flasken nulstillet ved $t = 40 \text{ }^\circ\text{C}$. Resultaterne fra forsøget blev:

t ($^\circ\text{C}$)	10,1	20,2	30,1	40,0	49,7	59,8	59,9	80,2
P (bar)	0,904	0,936	0,962	1,002	1,032	1,064	1,096	1,128

Tabellen kan hentes som Excelark [her](#).

I det følgende arbejdes enten med jeres egne resultater eller med dem i tabellen.

Øvelse 12.13

- Plot sammenhørende værdier (t, p).
- Lav lineær regression samt residualplot.

Hvad er matematik? 1

ISBN 9788770668279

Studieretningskapitel 12: Fagligt samarbejde – matematik og kemi

Af Keld Nielsen og Birgit Andresen

- c) Bekræfter modellen Gay-Lussacs lov? Forklar!

- d) Bestem ud fra modellen det absolutte nulpunkt og kommenter resultatet.

12.2 Anvendelse af statistik

2.1 Projekt: Molarmassen af lighergas

Fagligt indhold

Kemi: Mængdeberegninger, gassernes tilstandsligning, eventuelt organisk kemi (carbonhydrider).

Matematik: Middeltal, hyppighed, frekvens, boksplot, kvartilsæt.

Projektets mål

Målet med projektet er at bestemme molarmassen af lighergas og behandle klassens samlede resultater ved beskrivende statistik

Gennemførelse af projektet

Klassen deles i hold fx med to i hver gruppe-. Hvert hold laver en bestemmelse af molarmassen af lighergas. Benyt eventuelt en øvelsesvejledning til fra en kemilærebog, eller den der ligger her. Når alle grupper har beregnet molarmassen af lighergas i deres eget forsøg, samles alle holdenes resultater. Der gennemføres en statistisk behandling af klassens resultater svarende til den, som er beskrevet under "Alternativ". Eventuelt sammenlignes med en anden classes resultater.

Alternativ

Hvis man ikke selv ønsker at lave forsøget, kan man anvende nedenstående data.

I kemi blev 1.x inddelt i 10 grupper. Hver gruppe bestemte molarmassen af lighergas. De 10 grupper fik følgende resultater:

Gruppe	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$M \left(\frac{g}{mol} \right)$	57,0	57,8	57,6	58,5	57,6	56,8	58,7	58,0	59,0	55,3

Du finder tabellen [her](#) som et excelark.

1.a lavede samme forsøg. Her var der 9 grupper, og de fik følgende resultater:

Gruppe	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$M \left(\frac{g}{mol} \right)$	58,0	57,9	58,2	57,6	58,2	57,8	57,7	57,0	57,6

Du finder tabellen [her](#) som et excelark.

I den følgende øvelse gennemfører vi en statistisk efterbehandling af datamaterialet. Du kan anvende de relevante afsnit i kapitel 2 om Beskrivende statistik i grundbogen, specielt afsnittene om sammenligningen af to boksplot.

Øvelse 12.14

- a) Lav i samme koordinatsystem boksplot af de to datasæt.
- b) Sammenlign de 2 boksplot og kommenter.
Eleverne får oplyst, at molarmassen for lighter gas er 57,9 g/mol, og at lighter gas er en blanding af gasserne propan og butan.
- c) Hvad er den procentvise fordeling af de 2 gasser i lighter gas?
- d) Bestem middelværdien for de 2 datasæt, og sammenhold det med den oplyste molarmasse for lighter gas.
- e) Aflæs medianen for de 2 datasæt.
- f) Forklar med egne ord, hvilke informationer middelværdien giver om de 2 datasæt.
- g) Forklar med egne ord, hvilke informationer medianen giver om de 2 datasæt.

12.3 Potensmodeller

3.1 Projekt: Kemisk reaktionshastighed

Fagligt indhold

Kemi: Reaktionshastighed, mængdeberegninger.

Matematik: Variabelsammenhænge, funktioner og modellering, særligt fokus på potens regression og residualplot.

Projektets mål

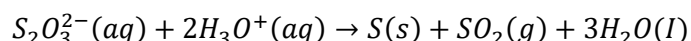
Målet med projektet er at undersøge, ved brug af regression og residualplot, hvorledes en kemisk reaktions hastighed afhænger af reaktanternes koncentrationer.

Gennemførelse af projektet

I kemi gennemføres øvelsen ”Reaktionen mellem thiosulfat og saltsyre”, mens resultatbehandling kan foregå i matematik. Benyt eventuelt en øvelsesvejledning til din kemi lærebog, hvis en sådan findes, eller den der ligger her. Fokus i efterbehandling skal være på argumentation for, hvorledes reaktionshastigheden afhænger af reaktanternes koncentrationer.

I al korthed går øvelsen ud på følgende (se vejledningen for en uddybning):

Thiosulfat reagerer med syre efter reaktionsskemaet:



Det dannede svovl, $S(s)$, gør opløsningen uklar. Man måler derfor tidsrummet, Δt , der går før opløsningen er så uklar, at man ikke kan se igennem den. Det antages, at reaktionshastigheden er omvendt proportional med Δt :

$$v = a \cdot \frac{1}{\Delta t}$$

Argumentet for dette er, at jo kortere tid, der går inden opløsningen er uigennemsigtig, jo hurtigere forløber reaktionen.

Der udføres 7 forsøg med kendte koncentrationer af $S_2O_3^{2-}$ og H_3O^+ og hastigheden v bestemmes.

Hvis man ikke ønsker selv at lave forsøget kan man anvende nedenstående data.

	1	2	3	4	5	6	7
$[S_2O_3^{2-}]$ (M)	0,20	0,15	0,10	0,050	0,20	0,20	0,20
$[H_3O^+]$ (M)	0,20	0,20	0,20	0,20	0,15	0,10	0,050
$\ln([S_2O_3^{2-}])$							
$\ln([H_3O^+])$							
Δt (s)	18,2	24,0	36,9	73,5	19,7	18,3	18,5
v (s^{-1})							
$\ln(v)$							

Tabellen kan hentes i form af et excel-ark [her](#).

Fra kemi ved vi, at sammenhængen mellem reaktionshastigheden og reaktanternes koncentration kan beskrives således:

$$v = k \cdot [S_2O_3^{2-}]^m \cdot [H_3O^+]^n \quad (1)$$

Konstanten k er hastighedskonstanten, mens m og n angiver reaktionsorden med hensyn til reaktanterne.

Fra matematik ved vi, at regneforskriften for en potensfunktion kan skrives således:

$$y = b \cdot x^a \quad (2)$$

Øvelse 12.15

- Hvis vi holder $[H_3O^+]$ konstant, hvad er så sammenhængen mellem (1) og (2) ?
- Hvis vi holder $[S_2O_3^{2-}]$ konstant, hvad er så sammenhængen mellem (1) og (2) ?

Øvelse 12.16

- c) Argumenter for, hvilke forsøg der skal sammenlignes for at bestemme m.
- d) Plot ($[S_2O_3^{2-}], v$).
- e) Udfør en potens regression på forsøgsresultaterne.
- f) Bestem størrelserne a, b og forklaringsgraden r^2 .
- g) Lav residualplot.
- h) Vurder om potensmodellen kan benyttes som beskrivelse af datamaterialet.
- i) Giv en fortolkning af størrelserne a og b i forhold til forsøgsresultaterne?
- j) Bestem størrelsen af m.

Øvelse 12.17

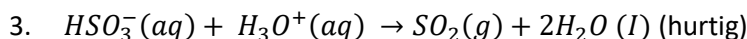
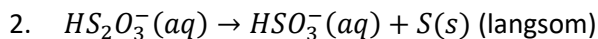
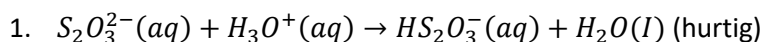
- a) Argumenter for, hvilke forsøg der skal sammenlignes for at bestemme n.
- b) Plot ($[H_3O^+], v$).
- c) Udfør en potens regression på forsøgsresultaterne.
- d) Bestem størrelserne a, b og forklaringsgraden r^2 .
- e) Lav residualplot.
- f) Vurder om den potens model kan benyttes som beskrivelse af datamaterialet.
- g) Giv en fortolkning af størrelserne a og b i forhold til forsøgsresultaterne?
- h) Bestem størrelsen af n.

Øvelse 12.18

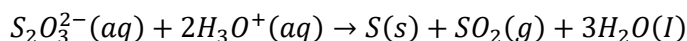
- Diskuter, hvorledes hastighedskonstanten k kan bestemmes, og angiv dets værdi (husk enhed).
- Omskriv ved brug af den naturlige logaritme (1) til en lineær sammenhæng.
- Diskuter, hvordan et plot af $(\ln([S_2O_3^{2-}]), \ln(v))$ kan benyttes til bestemmelse af m .
Bestem m og sammenlign med resultatet i øvelse 12.16.
- Diskuter hvordan et plot af $(\ln([H_3O^+]), \ln(v))$ kan benyttes til bestemmelse af n .
Bestem n og sammenligning med resultatet i øvelse 12.17.

Øvelse 12.19

Bruttoreaktionen kan tænkes sammensat af følgende 3 elementarreaktioner:



- Vis at de 3 elementarreaktioner tilsammen beskriver bruttoreaktionen:



- Stemmer den foreslåede reaktionsmekanisme overens med værdierne for m og n , som blev bestemt i øvelse 12.16 og 12.17?
- Opskriv et hastighedsudtryk for reaktionen.

12.4 Anvendelse af logaritmer

4.1 Projekt pH

Fagligt indhold:

Kemi: pH-skala, pH-beregninger, syrer og baser, pK_s

Matematik: Logaritmefunktionen log med grundtallet 10 både på tabelform, grafisk form og som funktion.

Logaritmeregneregler.

Projektets mål

I kemi optræder 10-tals logaritmen log i flere sammenhæng. Bedst kendt er i forbindelse med størrelsen pH, der udtrykker en opløsnings surhedsgrad, men også i flere andre definitioner inden for syre-basekemi benyttes 10-tals logaritmen:

$$\text{Definition af pH: } pH = -\log\left(\frac{[H_3O^+]}{M}\right) \quad (1)$$

$$\text{Definition af pOH: } pOH = -\log\left(\frac{[OH^-]}{M}\right) \quad (2)$$

$$\text{Definition af } pK_v: pK_v = -\log\left(\frac{K_v}{M^2}\right) \quad (3)$$

$$\text{Definition af } pK_s: pK_s = -\log\left(\frac{K_s}{M}\right) \quad (4)$$

I dette projekt skal undersøges, hvorfor man ofte benytter 10-tals logaritmen i forbindelse med kemi, især kendt inden for syre-basekemi.

Gennemførelse af projektet

I kemi laves de to delforsøg:

- Måling af pH ved fortynding af en syre henholdsvis en base
- Måling af pH i opløsninger med samme koncentration med forskellige syrer.

I matematik arbejdes videre med målinger fra eksperimenterne, og en række spørgsmål besvares undervejs i arbejdet med to delopgaver:

- En undersøgelse af selve pH skalaen
- En undersøgelse af syrestyrkekonstanten K_s og syrestyrkeeksponenten pK_s .

Øvelse 12.20: Før eksperimenterne udføres

- a) Hvordan beregnes pH i en opløsning af en stærk syre?
- b) Hvordan beregnes pH i en opløsning af en stærk base?

I definitionen af pH (og de andre størrelser opskrevet overfor) divideres størrelserne med henholdsvis M og M^2

- c) Diskuter hvorfor der divideres med enhederne M og M^2 i diverse udtryk.

12.4.1 Delforsøg (kemi): Måling af pH ved fortynding af en syre henholdsvis en base

Apparatur

pH-meter, små plastbægre, 10 mL pipette, 5 stk. 100 mL målekolbe.

Kemikalier

1,00 M HCl, 1,00 M NaOH, pufferopløsning med pH = 7,00.

Fremgangsmåde

Vigtigt: Der skal arbejdes meget omhyggeligt og renligt!

pH-metret tændes og kalibreres med pufferopløsningen. Kontroller også temperaturindstillingen på pH-metret.

Når pH skal måles for opløsningerne skylles det lille plastbæger og elektroden først med demineraliseret vand. Hæld noget af opløsningen op, dyp elektroden, rør forsigtigt rundt og hæld derefter opløsningen ud igen. Hæld en ny portion op, dyp elektroden og aflæs pH.

Mål først pH i den udleverede saltsyreopløsning på 1,00 M. Mål derefter pH for opløsninger af syren med $C_s = 0,10 M$, $C_s = 0,010 M$, $C_s = 0,0010 M$, $C_s = 0,00010 M$ og $C_s = 0,000010 M$. Disse opløsninger laves ved fortynding af den udleverede saltsyreopløsning på 1,00 M opløsning ved hjælp af en 10 mL pipette og en 100 mL målekolbe. Beskriv kort fremgangsmåden til fremstilling af de 5 opløsninger og få fremgangsmåden godkendt.

Det samme gøres for den udleverede NaOH-opløsning på 1,00 M.

Hvad er matematik? 1

ISBN 9788770668279

Studieretningskapitel 12: Fagligt samarbejde – matematik og kemi
Af Keld Nielsen og Birgit Andresen

Opløsning	Målt pH	Beregnet pH
1,00 M HCl		
0,10 M HCl		
0,010 M HCl		
0,0010 M HCl		
0,00010 M HCl		
0,000010 M HCl		
1,00 M NaOH		
0,10 M NaOH		
0,010 M NaOH		
0,0010 M NaOH		
0,00010 M NaOH		
0,000010 M NaOH		

Tabellen kan hentes i form af et excel-ark [her](#).

Øvelse 12.21

I forlængelse af målingerne skal du besvare følgende:

- Hvordan stemmer de målte og beregnede værdier overens?
- Hvis der er afvigelser, hvad kan forklaringen så være?

12.4.2 Delopgave (matematik): Undersøgelse af pH-skalaen

Øvelse 12.22

- Lav en tabel $(x, \log(x))$, med x -værdierne:
0,00001; 0,0001; 0,001; 0,01; 0,1; 1; 10; 100; 1000; 10000.
- Tegn grafen for funktionen $\log(x)$ i et koordinatsystem og beskriv med ord grafens forløb.

Nu skal det undersøges, hvorfor man har valgt den ”mystiske” definition af pH, se formel (1).

Øvelse 12.23

- Lav en tabel $(x, \log(x))$, med x -værdierne
 10^{-14} ; 10^{-13} ; 10^{-12} ; ... ; 0,001; 0,01; 0,1; 1.
- Lav en tabel $([H_3O^+], pH)$ med $[H_3O^+]$ -værdierne
 10^{-14} M; 10^{-13} M; 10^{-12} M; ... ; 0,001 M; 0,01 M; 0,1 M; 1 M.
- Afbild pH-skalaen således, at man kan aflæse sammenhørende værdier for pH og $[H_3O^+]$.
- Sammenhold det grafiske billede af pH-skalen med de målte og beregnede værdier for de 5 HCl-opløsninger i den indledende øvelse. Kommenter.
- Forklar ud fra figuren, hvorfor definitionen af pH og dermed pH-skalaen giver et meget mere overskueligt billede af en vandig opløsnings surhedsgrad
Hvorfor har man valgt $-\log$ og ikke \log i forbindelse med definition af pH?

I rent vand ved 25°C er:

$$[H_3O^+] = [OH^-] = 1,0 \cdot 10^{-7} M^2$$

I rent vand og fortyndede vandige opløsninger ved 25°C gælder:

$$K_v = [H_3O^+] \cdot [OH^-] = 1,0 \cdot 10^{-14} M^2$$

Produktet K_v kaldes vands ionprodukt. Størrelsen af K_v ændres kun, hvis man forandrer temperaturen. Det vil sige, vands ionprodukt har samme værdi, så længe temperaturen er konstant. Ud fra vands ionprodukt defineres størrelsen pK_v se formel (3) ovenfor.

Øvelse 12.24

- Vis med brug af logaritmeregnereglen $\log(a \cdot b) = \log(a) + \log(b)$, at vands ionprodukt kan omskrives til følgende formel: $pK_v = pH + pOH$
- Lav en grafisk fremstilling af pH-skalaen, hvor man kan aflæse sammenhørende værdier for pH, pOH, $[H_3O^+]$ og $[OH^-]$.
- Sammenhold figuren af pH-skalaen med de målte og beregnede værdier for de 6 HCl-opløsninger og de 6 NaOH-opløsninger i det første delforsøg. Kommenter.
- Beregn pH, når $[H_3O^+] = 0,020 M$.
- Beregn pH, når $[OH^-] = 0,020 M$. (Brug resultatet fra punkt a).
- Udled formlen til bestemmelse af $[H_3O^+]$ når man kender pH (udgangspunktet tages i definitionen på pH (formel (1)))
- Gør det samme for pOH.
- Beregn $[H_3O^+]$ når pH = 2,3.
Beregn $[H_3O^+]$, når pOH = 2,3.

12.4.3 Delforsøg (kemi): Måling af pH i opløsninger med samme koncentration med forskellige syrer

Apparatur

pH-meter, små plastbægre.

Kemikalier

0,10 M HCl, 0,10 M HNO_3 , 0,10 M $NaHSO_4$, 0,10 M CH_3COOH , pufferopløsning med pH = 7,00.

Fremgangsmåde

Vigtigt: Der skal arbejdes meget omhyggeligt og renligt!

pH-metret tændes og kalibreres med pufferopløsningen. Kontroller også temperaturindstillingen på pH-metret.

Når pH skal måles for opløsningerne skylles det lille plastbæger og elektroden først med demineraliseret vand. Hæld noget af opløsningen op, dyp elektroden, rør forsigtigt rundt og hæld derefter opløsningen ud igen. Hæld en ny portion op, dyp elektroden og aflæs pH.

Mål pH i de udleverede opløsninger på 0,10 M.

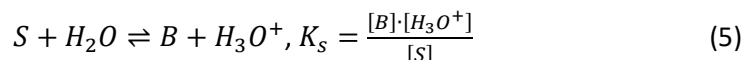
Øvelse 12.25

I forlængelse af målingerne skal du besvare følgende:

- Måles den samme pH værdi for de 4 syrer?
- Diskuter ud fra de to delforsøgs resultater, hvilke faktorer som er bestemmende for en opløsnings surhedsgrad.
- Diskuter ud fra resultaterne i de to forsøg følgende udsagn: "En stærk syre giver en lav pH værdi i en vandigopløsning af syren, mens en svag syre i en vandig opløsning giver en pH værdi tæt ved 7".

12.4.4 Delopgave (matematik): Syrestyrkekonstanten K_S og syrestyrkeeksponenten pK_S

En syres styrkekonstant K_S er defineret ud fra den kemiske ligevægt:

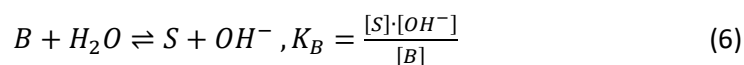


Syrens styrkekonstant bestemmes eksperimentelt for den enkelte syre.

En syres styrkeeksponent, pK_S defineres ud fra syrens styrkekonstant. Dette gjorde vi matematisk i formel nr. (4):

$$pK_S = -\log\left(\frac{K_S}{M}\right) \quad (4)$$

Tilsvarende defineres for en base K_B og pK_B :



$$pK_B = -\log\left(\frac{K_B}{M}\right) \quad (7)$$

Syrer inddeles efter deres styrke ud fra følgende intervaller:

Stærke syrer:

$$1M < K_S$$

Middelstærke syrer:

$$1 \cdot 10^{-4}M < K_S < 1M$$

Svage syrer:

$$1 \cdot 10^{-10}M < K_S < 1 \cdot 10^{-4}M$$

Meget svage syrer:

$$1 \cdot 10^{-14}M < K_S < 1 \cdot 10^{-10}M$$

Uhyre svage syrer:

$$K_S < 1 \cdot 10^{-14} M$$

Øvelse 12.26

Bestem de tilsvarende intervaller gældende for syrernes styrkeeksponenter pK_S .

Øvelse 12.27

Beskriv i ord sammenhængen mellem syres styrke og syres styrkekonstant

Det samme gøres for sammenhængen mellem syres styrke og syres styrkeeksponent.

Øvelse 12.28

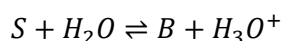
a) Vis, at for et korresponderende syre-base par (fx S og B i (5) og (6)) gælder sammenhængen:

$$K_S \cdot K_B = 1 \cdot 10^{-14} M^2 \text{ (ved } 25^\circ C)$$

b) Vis ved brug resultatet i punkt a) og logaritmeregnereglen $\log(a \cdot b) = \log(a) + \log(b)$, at

$$pK_S + pK_B = 14,0 \text{ (ved } 25^\circ C)$$

For ikke-stærke syrer gælder ligevægten:



Start	C_S	0M	$\approx 0M$
Ændring	-x	X	X
Ved ligevægt	$C_S - x$	X	x

hvor x svarer til koncentrationen af oxonium og korresponderende base B.

Øvelse 12.29

- a) Benyt ovenstående ligevægtsbetragtninger og opskrivningen af K_s i (5) til at vise, at følgende ligning gælder for ikke-stærke syrer:

$$K_s = \frac{x^2}{C_s - x}$$

- b) Diskuter, hvordan pH beregnes hvis K_s og C_s kendes.
- c) Overvej, hvad der afgør størrelsen af K_s , henholdsvis C_s .
- d) Diskuter, hvordan ligningen i punkt a) kan løses ved brug af matematiske værktøjsprogrammer.

For svage syrer kan man udlede et enklere formel til beregning af pH. Det skyldes, at for svage syrer vil ligevægten i (5) ligge langt mod venstre, således at tilnærmelsen $C_s - x \approx C_s$ er acceptabel

Øvelse 12.30

- a) Opstil et udtryk for K_s hvor tilnærmelsen indføres.
- b) Vis, med brug af logaritmeregnerreglerne $\log(a \cdot b) = \log(a) + \log(b)$ og $\log(a^x) = x \cdot \log(a)$ samt resultatet i punkt a), at når pH beregnes i en opløsning af en svag syre kan følgende formel benyttes:

$$pH = \frac{1}{2} \cdot (pK_s - \log(C_s)) \quad (8)$$

- c) Diskuter forudsætningen for udledningen, det vil sige hvornår kan tilnærmelsen accepteres.

På samme måde udledes følgende udtryk til beregning af koncentrationen af hydroxid (x) i en opløsning af en ikke-stærk base (ved brug af formel nr. (6)):

$$K_B = \frac{x^2}{C_B - x}$$

Specielt for en svag base gælder den reducerede formel:

$$pOH = \frac{1}{2} \cdot (pK_B - \log(C_B)) \quad (9)$$

Øvelse 12.31

- Udled formlen ovenfor til beregning af x ($[OH^-]$) for en ikke-stærk base.
- Udled den reducerede formel til beregning af pOH (og derved pH) i en svag base.

Øvelse 12.32

Vis ved anvendelse af logaritmeregnereglerne, at ligevægten i (5):

$$K_s = \frac{[B] \cdot [H_3O^+]}{[S]}$$

kan omskrives til pufferligningen:

$$pH = pK_s + \log\left(\frac{[B]}{[S]}\right) \quad (10)$$

Pufferligningen udtrykker, at en svag syre S og dens korresponderende svage base B er i stand til at "puffe" eller dæmpe pH-ændringer som følge af tilsætning af mindre mængder stærk syre eller stærk base.

Øvelse 12.33

- Lav en oversigt over alle formlerne, der benyttes ved beregning af en opløsnings surhedsgrad, pH.
- Notér i tilknytning til formlerne under hvilke betingelser de enkelte formler kan benyttes.

12.5 Projekt: Titreringskurver

Fagligt indhold

Kemi: Titrering af stærk syre med stærk base. Titrering af svag syre med stærk base.

Matematik: Logaritmfunktionen \log med grundtallet 10 både på tabelform, grafisk form og som funktion. Logaritmeregneregler. Teoretisk modellering af titreringskurver samt anvendelse af værktøjsprogrammer.

Projektets mål

Målet er at undersøge titreringskurver ud fra en kemisk og en matematisk synsvinkel.

Projektet kan også indgå i en studieretningsopgave i 2.g.

Syre-base titrering

En syre-basetitrering benyttes til at bestemme koncentrationen af en syre (eller en base) i en opløsning. Denne opløsning kaldes titranden. Koncentrationen af titranden bestemmes ved at tilsætte en såkaldt titrator. Titratoren tildryppes normalt fra en burette (ved mikroskala-forsøg anvendes eventuelt en sprøjte). Titratoren er en stærk base (en stærk syre) med en kendt koncentration.

Når mængden af syre ækvivalerer med mængden af base, svarende til f.eks. at det antal mol base, der er tilsat fra buretten (titratoren), er lig med det antal mol syre, som fra starten var i titranden, er det såkaldte ækvivalenspunkt nået.

Ækvivalenspunktet kan bestemmes ved hjælp af forskellige metoder. I dette forløb anvendes to metoder.

- Kolorimetrisk titrering
- Potentiometrisk titrering.

Kolorimetrisk titrering

Titreringen er kolorimetrisk, dvs. at man benytter en syre-baseindikator, som har den egenskab, at dens farve afhænger af opløsningens pH-værdi. Der vælges en indikator, der giver farve-omslag i ækvivalenspunktet. En smule indikator tilsættes titranden og tildrypningen af titratoren stoppes, når farveskiftet indtræffer.

Vigtigt: Der laves altid dobbeltbestemmelse.

Potentiometrisk titrering

Titrationen følges med et pH-meter. Titrationen udføres ved at tilsætte en bestemt mængde stærk base (stærk syre) og dernæst måle opløsningens pH-værdi. Dette gentages indtil titrationen er afsluttet.

I et koordinatsystem afsættes på 1.aksen antal mL tilsat titrator og på 2.aksen de tilhørende målte pH-værdier. Herved fås den såkaldte titrationskurve. På titrationskurven kan ses, at i begyndelsen stiger pH-værdien kun lidt for hver tilsat mængde base. Kort før ækvivalenspunktet stiger pH-værdien kraftigt, hvorefter den igen flader ud. Ækvivalenspunktet findes midt på stykket med den kraftige stigning i pH-værdierne.

Vigtigt: I nærheden af ækvivalenspunktet aflæses pH for hver dråbe tilsat titrator.

Afslut først titrationen, når volumen af tilsat titrator svarer til to gange volumen af titrator i ækvivalenspunktet.

12.5.1 Forsøg (kemi): Kolorimetrisk titrering af 0,100 M saltsyre

Forsøg 1 (kemi): Kolorimetrisk titrering af 0,100 M saltsyre

Forsøgsbeskrivelse

10,0 mL 0,100 M saltsyre udtages med pipette og overføres til en 100 mL konisk kolbe. Der tilsættes ca. 30 mL demineraliseret vand og 2-3 dråber methylrødt. Opløsningen titreres under magnetomrøring med 0,100 M NaOH, indtil der på 1 dråbe kommer et blivende farveskift. Noter forbruget af base.

Udfør dobbeltbestemmelse.

Øvelse 12.34: Efterbehandling af forsøg 1

- Opskriv titreringsreaktionen.
- Hvorfor vælges methylrødt som indikator?
- Beregn den stofmængde NaOH, der er tilsat ved ækvivalenspunktet.
- I hvilket forhold reagerer HCl og NaOH?
- Beregn koncentrationen af HCl og sammenlign med de 0,100 M HCl, som bør opnås.

12.5.2 Forsøg (kemi): Potentiometrisk titrering af 0,100 M saltsyre

Forsøgsbeskrivelse

10,0 mL 0,100 M saltsyre udtages med pipette og overføres til et 50 mL bægerglas. Opløsningen titreres under magnetomrøring med 0,100 M NaOH. pH-meteret kalibreres med en pufferopløsning, så det viser pufferens pH (husk også at indstille pH-meterets temperatur-knap, da pH er temperaturafhængig).

pH-elektroden skylles forsigtigt med demineraliseret vand og tørres forsigtigt med lidt køkkenrulle. Den lille tyndvæggede glaskugle forneden på elektroden er den følsomme del - den tåler ikke at blive berørt!

Elektroden sættes ned i bægerglasset uden at berøre glasset. Anbring den sådan, at magneten ved omrøring ikke berører elektroden. Fyld om nødvendigt efter med demineraliseret vand, så elektrodens følsomme del er dækket. Tænd magnetom-røreren, og aflæs pH-meteret, når dets visning er konstant.

0,100 M NaOH dryppes nu ned i bægerglasset. I et skema anføres sammenhørende værdier for tilsat basemængde og pH. I starten foretages aflæsning for hver tilsætning af max. 1 mL base (nøjagtig aflæsning på buretten). I nærheden af ækvivalenspunktet (altså ved stor pH-variation) aflæses for hver dråbe tilsat base. Dvs. så snart pH-værdien begynder at stige mere end "normalt" tilsættes basen dråbevis. Titreringen fortsættes, indtil volumen af tilsat titrator svarer til to gange volumen af titrator i ækvivalenspunktet.

Øvelse 12.35: Efterbehandling af forsøg 2

- Opskriv den kemiske reaktion, der foregår ved titreringen.
- Hvad er en puffer?
- Tegn titreringskurven, idet tilsat volumen NaOH afsættes ud af 1.aksen og pH afsættes ud af 2.aksen.
- Ud fra titreringskurven bestemmes ækvivalenspunktet, og tilsat volumen NaOH i ækvivalens-punktet aflæses.
- Beregn den stofmængde NaOH, der er tilsat ved ækvivalenspunktet
- Hvilken pH-værdi nærmer opløsningen sig efterhånden som volumen af tilsat NaOH vokser?
- Beregn HCl-koncentrationen.
- Forklar pH-værdien i ækvivalenspunktet.
- Diskuter mulige valg af indikatorer ved udførelse af en kolorimetrisk titrering.

- j) Sammenlign til slut de to titreringsmetoder. Diskuter fordele/ulemper ved de to metoder.

12.5.3 Forsøg (matematik): Den teoretiske titreringskurve for potentiometrisk titrering af 0.100 M saltsyre

Formålet er at opskrive et matematisk udtryk for titrering af 10,0 mL 0,100 M HCl med 0,100 M NaOH. Ved at plote sammenhørende værdier for $(x, [H_3O^+])$ og derefter sammenhørende værdier for (x, pH) , vil man forstå, hvorfor pH-skalaen er nødvendig, hvis man ønsker at aflæse ækvivalenspunktet, og dermed beregne koncentrationen af titranden.

x betegner antal mL NaOH, $f(x)$ betegner $[H_3O^+]$ som funktion af x , og $\text{pH}(x)$ betegner –

$$\log\left(\frac{[H_3O^+]}{M}\right)$$

som funktion af x .

Først beskrives $[H_3O^+]$ som funktion af $V(\text{NaOH})$ samt pH som funktion af $V(\text{NaOH})$.

Det er nødvendigt at beskrive funktionen som en stykvis funktion opdelt i intervallerne $(0 \leq x < 10)$ og $(x > 10)$. Først giver vi omskrivningerne af $[H_3O^+]$, dernæst af pH, og i den efterfølgende øvelse diskuteres omskrivningerne:

$$f(x) = [H_3O^+] = \begin{cases} \frac{10,0 \text{ mL} \cdot 0,100 \text{ M} - x \text{ mL} \cdot 0,100 \text{ M}}{(10,0 + x) \text{ mL}} & \text{for } 0 \leq x < 10,0 \\ \frac{1 \cdot 10^{-14} \text{ M}^2}{[OH^-]} & \text{for } 10,0 < x \end{cases}$$

$$= \begin{cases} \frac{1,00 - x \cdot 0,100}{(10,0 + x)} \text{ M} & \text{for } 0 \leq x < 10,0 \\ \frac{1 \cdot 10^{-14} \text{ M}^2}{\left(\frac{x \text{ mL} \cdot 0,100 \text{ M} - 10,0 \text{ mL} \cdot 0,100 \text{ M}}{(10,0 + x) \text{ mL}}\right)} & \text{for } 10,0 < x \end{cases}$$

$$= \begin{cases} \frac{1,00 - x \cdot 0,100}{(10,0 + x)} \text{ M} & \text{for } 0 \leq x < 10,0 \\ \frac{1 \cdot 10^{-14}}{\left(\frac{x \cdot 0,100 - 1,00}{10,0 + x}\right)} \text{ M} & \text{for } 10,0 < x \end{cases}$$

Øvelse 12.36

Hvad er matematik? 1

ISBN 9788770668279

Studieretningskapitel 12: Fagligt samarbejde – matematik og kemi
Af Keld Nielsen og Birgit Andresen

Tegn grafen for $f(x)$.

Omskrivning af udtrykket for pH:

$$\text{pH}(x) = -\log\left(\frac{[\text{H}_3\text{O}^+]}{M}\right)$$
$$= \begin{cases} -\log\left(\frac{1,00 - x \cdot 0,100}{10,0 + x}\right) & \text{for } 0 \leq x < 10,0 \\ -\log\left(\frac{1 \cdot 10^{-14}}{\left(\frac{x \cdot 0,100 - 1,00}{10,0 + x}\right)}\right) & \text{for } 10,0 < x \end{cases}$$

Øvelse 12.37

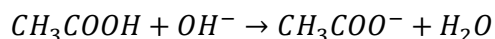
Tegn grafen for $\text{pH}(x)$.

Øvelse 12.38: Efterbehandling af forsøg 3

- a) Forklar med ord ovenstående formler.
- b) Hvorfor kan ovenstående formler ikke anvendes ved $x = 10$?
- c) Hvad forventes $f(10)$ og $\text{pH}(10)$ at blive?
- d) Sammenlign graferne for $f(x)$ og $\text{pH}(x)$.
- e) $\text{pH}(x) = -\log(f(x))$. Forklar forskellen på de to grafers udseende.
- f) Hvor mange mL NaOH skal der bruges, hvis man ønsker en stigning i pH fra 1 til 2, og hvor meget ændrer $[\text{H}_3\text{O}^+]$ sig i dette pH-interval?
- g) Hvor mange mL NaOH skal der bruges, hvis man ønsker en stigning i pH fra 2 til 3, og hvor meget ændrer $[\text{H}_3\text{O}^+]$ sig i dette pH-interval?
- h) Hvorfor kræves der kun en enkelt dråbe NaOH hvis man ønsker en stigning i pH fra 4 til 10? Som hjælp til besvarelse af dette spørgsmål kan man beregne følgende:
 - a. Beregn $n([\text{H}_3\text{O}^+])$ i en 20 mL opløsning med $\text{pH} = 4$.
 - b. Beregn $n([\text{H}_3\text{O}^+])$ i en 20 mL opløsning med $\text{pH} = 10$.
 - c. Beregn $n([\text{H}_3\text{O}^+])$ i én dråbe 0,100M NaOH. Den typiske størrelse på en dråbe er 0,05 mL.
- i) Indtegn den teoretiske titreringskurve og de eksperimentelle data fra forsøg 2 i samme koordinatsystem.
- j) Diskuter forskellen mellem de eksperimentelle resultater og den teoretiske kurve.

12.5.4 Forsøg (kemi): Kolorimetrisk titrering af 0,100 M ethansyre

Ethansyre (eddikesyre) CH_3COOH er en svag organisk syre, der her skal titreres med den stærke base NaOH. Reaktionen kan beskrives ved følgende reaktionskema:



Ved reaktionen dannes ethanoat, som er en svag base. Man skal derfor vælge en indikator, der skifter farve ved pH 8-10.

Forsøgsbeskrivelse

10,0 mL 0,100 M ethansyre udtages med pipette og overføres til en 100 mL konisk kolbe. Der tilsættes ca. 30 mL demineraliseret vand og 2-3 dråber phenolphthalein. Opløsningen titreres under magnetomrøring med 0,100 M NaOH, indtil der på 1 dråbe kommer et blivende farveskift. Noter forbruget af base.

Vigtigt: Udfør dobbeltbestemmelse.

Øvelse 12.39: Efterbehandling af forsøg 4

- Opskriv de to sæt af korresponderende syre-base par, som indgår i titreringsreaktionen.
- Hvad gælder om styrken af de indgående syrer og baser?
- Hvorfor vælges phenolphthalein som indikator?
- Beregn den stofmængde NaOH, der er tilsat ved ækvivalenspunktet.
- I hvilket forhold reagerer ethansyre og NaOH?
- Beregn koncentrationen af ethansyre.
- Hvilken pH-værdi nærmer opløsningen sig efterhånden som $V(\text{NaOH})$ vokser?

12.5.5 Forsøg (kemi): Potentiometrisk titrering af 0,100 M ethansyre

Forsøgsbeskrivelse

10,0 mL 0,100 M ethansyre udtages med pipette og overføres til en 50 mL bægerglas. Opløsningen titreres under magnetomrøring med 0,100 M NaOH. pH-metret kalibreres med en pufferopløsning, så det viser pufferens pH (husk også at indstille pH-metrets temperaturknap, da pH er temperaturafhængig).

pH-elektroden skylles forsigtigt med demineraliseret vand og tørres forsigtigt med lidt køkkenrulle. Den lille tyndvægede glaskugle forneden på elektroden er den følsomme del - den tåler ikke at blive berørt!

Elektroden sættes ned i bægerglasset uden at berøre glasset. Anbring den sådan, at magneten ved omrøring ikke berører elektroden. Fyld om nødvendigt efter med demineraliseret vand, så elektrodens følsomme del er dækket. Tænd magnetom-røreren, og aflæs pH-meteret, når dets visning er konstant.

0,100 M NaOH dryppes nu ned i bægerglasset. I et skema anføres sammenhørende værdier for tilsat mængde base og pH. I starten foretages aflæsning for hver tilsætning af max. 1 mL base (nøjagtig aflæsning på buretten). I nærheden af ækvivalenspunktet (altså ved stor pH-variation) aflæses for hver dråbe tilsat base. Dvs. så snart pH-værdien begynder at stige mere end "normalt" tilsættes basen dråbevis. Titreringen fortsættes, indtil volumen af tilsat titrator svarer til to gange volumen af titrator i ækvivalenspunktet.

Øvelse 12.40: Efterbehandling af forsøg 5

- Tegn titreringskurven, idet tilsat volumen NaOH afsættes ud af 1.aksen og pH afsættes ud af 2.aksen.
- Ud fra titreringskurven bestemmes ækvivalenspunktet, og tilsat volumen NaOH i ækvivalenspunktet aflæses.
- Beregn den stofmængde NaOH, der er tilsat ved ækvivalenspunktet
- I hvilket forhold reagerer ethansyre og NaOH?
- Beregn koncentrationen af ethansyre.
- Forklar pH-værdien i ækvivalenspunktet.
- Diskuter mulige valg af indikatorer ved udførelse af en kolorimetrisk titrering.
- Ethansyres styrkeeksponent pK_s kan bestemmes ved at aflæse pH ved $\frac{1}{2} \cdot V(\text{NaOH})$ (i ækvivalenspunktet). Bestem pK_s og sammenlign med tabelopslag.

12.5.6 Forsøg (matematik): Den teoretiske titreringskurve for potentiometrisk titrering af 0,100 M ethansyre

Formålet er at opskrive et matematisk udtryk for titrering af 10,0 mL 0,100 ethansyre med 0,100 M NaOH og dermed tegne en titreringskurve.

x betegner antal mL NaOH og $\text{pH}(x)$ betegner $-\log\left(\frac{[\text{H}_3\text{O}^+]}{M}\right)$ som funktion af x .

Det vil sige pH kan beskrives som funktion af $V(\text{NaOH})$.

I det følgende tages udgangspunkt i pufferligningen, se nedenfor. Grunden er, at når titreringen forløber, er opløsningen en blanding af en svag syre (ethansyre) og dets korresponderende base (ethanoat). Det vil sige, man kan betragte blandingen som pufferopløsning, hvor pufferligningen skal benyttes til beregning af pH :

$$\text{pH} = \text{p}K_s - \log\left(\frac{[\text{CH}_3\text{COO}^-]}{[\text{CH}_3\text{COOH}]}\right) = \text{p}K_s + \log\left(\frac{n_B}{n_s}\right)$$

hvor n_s er stofmængden af den svage syre (ethansyre) og n_B er stofmængden af den korresponderende base (ethanoat).

For ethansyre er $\text{p}K_s$ lig med 4,76 ved 25 °C.

Det er nødvendigt at beskrive funktionen som en stykvis funktion opdelt i intervallerne ($0 < x < 10$) og ($x > 10$). Faktisk skulle man inddrage to ekstra beregningsformler for pH , hvis billedet skal fuldendes. Før titreringen begynder ($x=0$), svarer opløsningen til en vandig opløsning af den svage syre. Man kan derfor i $x=0$ benytte den reducerede formel til beregning af pH :

$$\text{pH} = \frac{1}{2} \cdot (\text{p}K_s - \log(C_s))$$

Og tilsvarende for $x=10,0$ (ækvivalenspunktet). Her er der tale om en opløsning af en svag base, nemlig den korresponderende base til ethansyre.

$$\text{pOH} = \frac{1}{2} \cdot (\text{p}K_B - \log(C_B))$$

Dette udelades dog i nedenstående betragtninger.

$$\text{pH}(x) = \begin{cases} 4,76 + \log\left(\frac{n_B}{n_S}\right) & \text{for } 0 < x < 10,0 \\ -\log\left(\frac{1 \cdot 10^{-14} \text{ M}^2 \cdot 1}{[\text{OH}^-] \cdot \text{M}}\right) & \text{for } 10,0 < x \end{cases}$$

$$= \begin{cases} 4,76 + \log\left(\frac{x \text{ mL} \cdot 0,100 \text{ M}}{10,0 \text{ mL} \cdot 0,100 \text{ M} - x \text{ mL} \cdot 0,100 \text{ M}}\right) & \text{for } 0 < x < 10,0 \\ -\log\left(\frac{1 \cdot 10^{-14} \text{ M}^2}{\left(\frac{x \text{ mL} \cdot 0,100 \text{ M} - 10,0 \text{ mL} \cdot 0,100 \text{ M}}{(10,0 + x) \text{ mL}}\right) \cdot \frac{1}{\text{M}}}\right) & \text{for } 10,0 < x \end{cases}$$

$$= \begin{cases} 4,76 + \log\left(\frac{x \cdot 0,100}{1,00 - x \cdot 0,100}\right) & \text{for } 0 < x < 10,0 \\ -\log\left(\frac{1 \cdot 10^{-14}}{\left(\frac{x \cdot 0,100 - 1,00}{(10,0 + x)}\right) \cdot \frac{1}{\text{M}}}\right) & \text{for } 10,0 < x \end{cases}$$

Øvelse 12.41

Tegn grafen for pH(x).

Øvelse 12.41: Efterbehandling af forsøg 6

- Forklar med ord ovenstående formler.
- Hvorfor kan ovenstående formler ikke anvendes ved $x = 0$ og $x = 10$?
- Indtegn den teoretiske titreringskurve og de eksperimentelle data fra forsøg 5 i samme koordinatsystem.
- Diskuter forskellen mellem de eksperimentelle resultater og den teoretiske kurve.
- Ethansyres styrkeeksponent pK_s kan bestemmes ved at aflæse pH ved $\frac{1}{2} \cdot V(\text{NaOH})$ (i ækvivalenspunktet). Forklar dette ud fra pufferligningen.
- Bestem pK_s og sammenlign med tabelopslag.

Udvidelse

Hvad er matematik? 1

ISBN 9788770668279

Studieretningskapitel 12: Fagligt samarbejde – matematik og kemi

Af Keld Nielsen og Birgit Andresen


Uddannelse
EGMONT

Hvis der er elever, som ønsker at udvide projektet, kan man arbejde med andre svage syrer, overveje betydningen af at skifte fra en svag til en middelstærk syre eller ændre på syrens koncentration.