

## Základné vzorce pre výpočty protolytických rovnováh

	slabá kyselina HA	slabá zásada B
chemická rovnicu	$\text{HA(aq)} + \text{H}_2\text{O(l)} \rightleftharpoons \text{A}^-(\text{aq}) + \text{H}_3\text{O}^+(\text{aq})$	$\text{B(aq)} + \text{H}_2\text{O(l)} \rightleftharpoons \text{BH}^+(\text{aq}) + \text{OH}^-(\text{aq})$
názov chemickej reakcie	disociácia kyseliny ionizácia kyseliny	disociácia zásady ionizácia zásady
názov „rovnovážnej“ konštanty	<u>konštanta kyslosti kyseliny</u> disociačná konštanta kyseliny ionizačná konštanta kyseliny	<u>konštanta zásaditosti zásady</u> disociačná konštanta zásady ionizačná konštanta zásady
výraz pre „rovnovážnu“ konštantu	$K_k(\text{HA}) = \frac{[\text{A}^-][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{HA}]}$	$K_z(\text{B}) = \frac{[\text{BH}^+][\text{OH}^-]}{[\text{B}]}$
vzťah $K_k$ a $K_z$	$K_k(\text{HA}) K_z(\text{A}^-) = K_v$	$K_z(\text{B}) K_k(\text{BH}^+) = K_v$
	$c_r = \frac{(2[\text{H}_3\text{O}^+] + K_k)^2 - K_k^2}{4K_k} = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+]^2}{K_k} + [\text{H}_3\text{O}^+]$ $K_k = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+]^2}{c_r - [\text{H}_3\text{O}^+]}$ $[\text{H}_3\text{O}^+] = \frac{-K_k + \sqrt{K_k^2 + 4K_k c_r}}{2}$	$c_r = \frac{(2[\text{OH}^-] + K_z)^2 - K_z^2}{4K_z} = \frac{[\text{OH}^-]^2}{K_z} + [\text{OH}^-]$ $K_z = \frac{[\text{OH}^-]^2}{c_r - [\text{OH}^-]}$ $[\text{OH}^-] = \frac{-K_z + \sqrt{K_z^2 + 4K_z c_r}}{2}$
	$\alpha = \frac{K_k}{K_k + [\text{H}_3\text{O}^+]}$ $K_k = [\text{H}_3\text{O}^+] \frac{\alpha}{1 - \alpha}$ $[\text{H}_3\text{O}^+] = K_k \frac{1 - \alpha}{\alpha}$	$\alpha = \frac{K_z}{K_z + [\text{OH}^-]}$ $K_z = [\text{OH}^-] \frac{\alpha}{1 - \alpha}$ $[\text{OH}^-] = K_z \frac{1 - \alpha}{\alpha}$
	$\alpha = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+]}{c_r}$ $c_r = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+]}{\alpha}$ $[\text{H}_3\text{O}^+] = \alpha c_r$	$\alpha = \frac{[\text{OH}^-]}{c_r}$ $c_r = \frac{[\text{OH}^-]}{\alpha}$ $[\text{OH}^-] = \alpha c_r$
	$\alpha = \frac{-K_k + \sqrt{K_k^2 + 4K_k c_r}}{2c_r}$ $c_r = K_k \frac{1 - \alpha}{\alpha^2}$ $K_k = c_r \frac{\alpha^2}{1 - \alpha}$	$\alpha = \frac{-K_z + \sqrt{K_z^2 + 4K_z c_r}}{2c_r}$ $c_r = K_z \frac{1 - \alpha}{\alpha^2}$ $K_z = c_r \frac{\alpha^2}{1 - \alpha}$

V literatúre sa používa aj označenie  $K_a$  (a = angl. *acidity*) a  $K_b$  (b = angl. *basicity*).

Vo vzorcoch sa často kvôli zjednodušeniu používajú záписy  $K_k$ ,  $K_z$ ,  $c_r$  a  $\alpha$ , pritom by sa však mali dôsledne dodržiavať zápisu s uvedením častice o ktorú ide, napr.  $K_k(\text{HA})$ ,  $c_r(\text{B})$ , ...

Pre silné kyseliny platí:  $K_k \rightarrow \infty$ ,  $[\text{H}_3\text{O}^+] \rightarrow c_r$ ,  $\alpha \rightarrow 1$ . Pre silné zásady platí:  $K_z \rightarrow \infty$ ,  $[\text{OH}^-] \rightarrow c_r$ ,  $\alpha \rightarrow 1$ .

Ostwaldov zriedkovací zákon:  $c_r \rightarrow 0 \Rightarrow \alpha \rightarrow 1$ .

	slabá kyselina HA, ak $\frac{c_r}{K_k} > 1000$	slabá zásada B, ak $\frac{c_r}{K_z} > 1000$
	$c_r \approx \frac{[\text{H}_3\text{O}^+]^2}{K_k}$ $K_k \approx \frac{[\text{H}_3\text{O}^+]^2}{c_r}$ $[\text{H}_3\text{O}^+] \approx \sqrt{K_k c_r}$	$c_r \approx \frac{[\text{OH}^-]^2}{K_z}$ $K_z \approx \frac{[\text{OH}^-]^2}{c_r}$ $[\text{OH}^-] \approx \sqrt{K_z c_r}$
	$\alpha \approx \sqrt{\frac{K_k}{c_r}}$ $c_r \approx \frac{K_k}{\alpha^2}$ $K_k \approx \alpha^2 c_r$	$\alpha \approx \sqrt{\frac{K_z}{c_r}}$ $c_r \approx \frac{K_z}{\alpha^2}$ $K_z \approx \alpha^2 c_r$

	voda	iná amfiprotzná látka XH
názov chemickej reakcie	autoprotoľza vody autoionizácia vody	autoprotoľza látky XH autoionizácia látky XH
chemická rovnica	$\text{H}_2\text{O}(l) + \text{H}_2\text{O}(l) \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+(\text{aq}) + \text{OH}^-(\text{aq})$	$\text{XH}(l) + \text{XH}(l) \rightleftharpoons \text{XH}_2^+(\text{solv}) + \text{X}^-(\text{solv})$
názov „rovnovážnej“ konštanty	iónový súčin vody konštanta autoprotoľzy vody autoprotoľtická konštantá vody	iónový súčin látky XH konštanta autoprotoľzy látky XH autoprotoľtická konštantá látky XH
výraz pre „rovnovážnu“ konštantu	$K_{ap}(\text{H}_2\text{O}) \equiv K_v = [\text{H}_3\text{O}^+] [\text{OH}^-]$ $[\text{H}_3\text{O}^+] = [\text{OH}^-] = \sqrt{K_v}$ $K_v = 1,0 \cdot 10^{-14} \quad (24^\circ\text{C})$	$K_{ap}(\text{XH}) = [\text{XH}_2^+] [\text{X}^-]$ $[\text{XH}_2^+] = [\text{X}^-] = \sqrt{K_{aut}(\text{XH})}$
	$\text{pH} = -\log [\text{H}_3\text{O}^+] \Leftrightarrow [\text{H}_3\text{O}^+] = 10^{-\text{pH}}$ $\text{pOH} = -\log [\text{OH}^-] \Leftrightarrow [\text{OH}^-] = 10^{-\text{pOH}}$ $pK_{ap}(\text{H}_2\text{O}) \equiv pK_v = \text{pH} + \text{pOH} = 14 \quad (24^\circ\text{C})$	$\text{pH} = -\log [\text{XH}_2^+] \Leftrightarrow [\text{XH}_2^+] = 10^{-\text{pH}}$ $\text{pX} = -\log [\text{X}^-] \Leftrightarrow [\text{X}^-] = 10^{-\text{pX}}$ $pK_{ap}(\text{XH}) = \text{pH} + \text{pX}$

$\alpha$  – stupeň premeny látky. Všeobecne je definovaný ako podiel množstva zreagovanej látky k jej pôvodnému množstvu.

$c_r$  – relatívna celková (relatívna analytická) koncentrácia látky, tj. súčet relatívnych koncentrácií všetkých foriem ionizovanej kyseliny, resp. zásady. Pre slabú jednosýtnu kyselinu HA, resp. slabú jednosýtnu zásadu B platí, že  $c_r(\text{HA}) = [\text{HA}] + [\text{A}^-]$ , resp.  $c_r(\text{B}) = [\text{B}] + [\text{BH}^+]$ . Všeobecne je relatívna koncentrácia definovaná vztahom  $c_r = c / c^0$ . Pretože  $c^0 = 1 \text{ mol dm}^{-3}$ , relatívna koncentrácia  $c_r$  je bezrozmerná a čiselné sa rovná látkovej koncentrácií  $c$  vyjadrenej v jednotkách  $\text{mol dm}^{-3}$ .

**Poznámka:** Výraz  $c_r(\text{HA})$  vo všeobecnosti vyjadruje aktuálnu relatívnu koncentráciu HA, ktorej hodnota počas ionizácie postupne mení od počiatočnej hodnoty  $c_{r,0}(\text{HA})$  po rovnovážnu hodnotu  $c_{r,rovн}(\text{HA})$ . Korektné označenie relatívnej analytiknej koncentrácie by teda malo byť  $c_{r,0}(\text{HA})$ , ale keďže je to jediná nerovnovážna relatívna koncentrácia používaná v našich výpočtoch, nedôjde ku kolízii označovania. Kvôli zjednodušeniu zápisov sa preto tento prehrešok v označovaní bežne akceptuje.

[ ] – relatívna rovnovážna koncentrácia látky, tj. relatívna koncentrácia látky v stave rovnováhy. Mala by sa označovať  $c_{r,rovн}(L)$ , ale kvôli zjednodušeniu sa vžil zápis [L] v hranatých zátvorkách. Platí teda, že  $[L] \equiv c_{r,rovн}(L) = c_{rovн}(L) / c^0$ .

$\text{pX}$  – záporný dekadický logaritmus ľubovoľnej bezrozmernej veličiny X,  $\text{pX} = -\log X$  (napr.  $\text{p}K_k$ ,  $\text{pCl}$ , ...); lat. potentia = „mocnosť“ (tj. opačné číslo, na ktoré treba umocniť desiatku, aby sme dostali hodnotu veličiny X). Najpoužívanejšími sú veličiny  $\text{pH}$  a  $\text{pOH}$ , pričom (zjednodušene)  $\text{pH}$  je záporný dekadický logaritmus relatívnej koncentrácie oxóniových katiónov,  $\text{pH} = -\log c_r(\text{H}_3\text{O}^+)$ , resp.  $\text{pH} = -\log [\text{H}_3\text{O}^+]$ , a  $\text{pOH}$  je záporný dekadický logaritmus relatívnej koncentrácie hydroxidových aniónov,  $\text{pOH} = -\log c_r(\text{OH}^-)$ , resp.  $\text{pOH} = -\log [\text{OH}^-]$ . Hodnoty  $\text{pH}$  resp.  $\text{pOH}$  sú mierou kyslosti resp. zásaditosti roztoku. Často sú aj hodnoty  $K_k$  a  $K_z$  tabelované vo forme  $\text{p}K_k$  a  $\text{p}K_z$ . Používanie zápisu  $\text{pH}$  zaviedol v r. 1909 dánsky chemik Søren Sørensen.