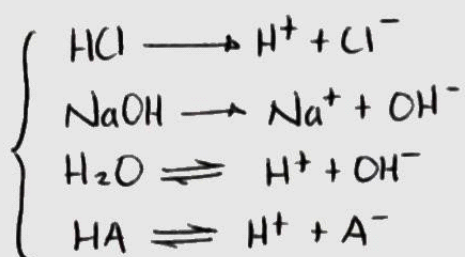


- Expresión matemática de β . (Ácido monoprótico y su base conjugada)

Considerar una disolución que contiene $C_a(\text{HCl})$, $C_b(\text{NaOH})$ y $C(\text{HA})$, donde HA es un ácido monoprótico.

Reacciones involucradas



Incógnitas:

$[\text{Cl}^-], [\text{Na}^+], [\text{H}^+], [\text{OH}^-],$
 $[\text{HA}]$ y $[\text{A}^-]$

i) Balance de electroneutralidad $\left\{ \begin{array}{l} [\text{H}^+] + [\text{Na}^+] = [\text{OH}^-] + [\text{Cl}^-] + [\text{A}^-] \end{array} \right.$

ii) Balances de materia $\left\{ \begin{array}{l} C_a = [\text{Cl}^-] \\ C_b = [\text{Na}^+] \end{array} \right. \quad \text{y} \quad C = [\text{HA}] + [\text{A}^-]$

iii) Condiciones de equilibrio $\left\{ \begin{array}{l} K_a = \frac{[\text{H}^+][\text{A}^-]}{[\text{HA}]} \quad \text{y} \quad K_w = [\text{H}^+][\text{OH}^-] \end{array} \right.$

- Se resolverá para C_b en términos de $[\text{H}^+]$.

- Para el sistema HA/A^- , de la K_a se despeja $[\text{A}^-]$:

$$[\text{A}^-] = \frac{K_a \cdot [\text{HA}]}{[\text{H}^+]} \quad \text{y del balance de materia para } C = [\text{HA}] + [\text{A}^-]$$

$$[\text{HA}] = C - [\text{A}^-]$$

$$[\text{A}^-] = \frac{K_a (C - [\text{A}^-])}{[\text{H}^+]} = \frac{K_a \cdot C - K_a \cdot [\text{A}^-]}{[\text{H}^+]} \Rightarrow [\text{H}^+][\text{A}^-] = K_a C - K_a [\text{A}^-]$$

$$[\text{H}^+][\text{A}^-] + K_a [\text{A}^-] = K_a C \Rightarrow [\text{A}^-]([\text{H}^+] + K_a) = K_a C \quad \therefore [\text{A}^-] = \frac{K_a \cdot C}{[\text{H}^+] + K_a}$$

- Sustituyendo en la ecuación del BEN:

$$[\text{H}^+] + C_b = \frac{K_w}{[\text{H}^+]} + C_a + \frac{K_a \cdot C}{[\text{H}^+] + K_a} \quad \therefore C_b = C_a - [\text{H}^+] + \frac{K_w}{[\text{H}^+]} + \frac{K_a \cdot C}{[\text{H}^+] + K_a}$$

- Considerando el caso donde sólo se adiciona una base fuerte C_b , i.e. $C_a = 0$.

$$C_b = \frac{K_w}{[H^+]} - [H^+] + \frac{K_a C}{[H^+] + K_a}$$

- Para obtener la expresión para β , utilizamos la "regla de la cadena":

$$\frac{dC_b}{d\text{pH}} = \left(\frac{dC_b}{d[H^+]} \right) \times \left(\frac{d[H^+]}{d\text{pH}} \right)$$

- Sabemos que, $\text{pH} = -\log[H^+] \therefore [H^+] = 10^{-\text{pH}}$ y para una función exponencial se conoce lo siguiente: $f(x) = a^u \Rightarrow f'(x) = u' \cdot a^u \cdot \ln a$, entonces:

$$\frac{d[H^+]}{d\text{pH}} = \frac{d(10^{-\text{pH}})}{d\text{pH}} = \frac{d(-\text{pH})}{d\text{pH}} \cdot 10^{-\text{pH}} \cdot \ln(10) = -2.303 \cdot 10^{-\text{pH}} = -2.303 [H^+]$$

- Ahora diferenciamos C_b en función de $[H^+]$:

$$\frac{dC_b}{d[H^+]} = \frac{d \left\{ \frac{K_w}{[H^+]} - [H^+] + \frac{K_a C}{[H^+] + K_a} \right\}}{d[H^+]} = - \frac{K_w}{[H^+]^2} - 1 + K_a C \left\{ \frac{d \frac{1}{[H^+] + K_a}}{d[H^+]} \right\}$$

$$= - \frac{K_w}{[H^+]^2} - 1 - \frac{K_a C}{(K_a + [H^+])^2}$$

- Por lo tanto, la capacidad amortiguadora obtenida es:

$$\frac{dC_b}{d\text{pH}} = (-2.303 \cdot [H^+]) \left\{ - \frac{K_w}{[H^+]^2} - 1 - \frac{K_a \cdot C}{(K_a + [H^+])^2} \right\}$$

$$\beta = 2.303 \left\{ \underbrace{\frac{K_w}{[H^+]}}_{\text{OH}^-} + \underbrace{[H^+] + \frac{K_a \cdot C}{(K_a + [H^+])^2}}_{\text{H}^+ \text{ HA/A}^-} \right\}$$

- $\beta = \beta_{\text{OH}^-} + \beta_{\text{H}^+} + \beta_{\text{HA/A}^-}$ o de una manera más general:

$$\beta = \beta_w + \sum_i \beta_i \text{ (otros ácidos y bases).}$$