Die Thematik rund um die Berechnung von pH-Werten mit Hilfe von Konzentrationsangaben und den entsprechenden K_S- bzw. K_B-Werten ist bei Schülerinnen und Schülern nicht immer beliebt. Natürlich gehören Kompetenzen in diesem Bereich aber auch zum „Chemie-Handwerk“, die eingeübt und verstanden sein müssen. In den gängigen Schulbüchern werden die entsprechenden Formeln plausibel hergeleitet und bieten daher einen praktikablen roten Faden für den Unterricht. Als Lehrkraft sollte man sich allerdings darüber im Klaren sein, dass mit diesen Formeln nur die in der Praxis wichtigsten Fälle erfasst werden und Spezialfälle damit nicht zu lösen sind. Selbst die Unterscheidung zwischen sehr starken, starken, mittelstarken, schwachen und sehr schwachen Säuren bzw. Basen hilft in speziellen Konstellationen (z. B. extrem starken Verdünnungen) nicht alleine weiter, da der Protolysegrad einer Säure auch von der Konzentration abhängt und u. U.auch die Autoprotolyse des Wassers in die Berechnungen mit einbezogen werden muss. Verlässt man den Schulwissen-Sektor, werden die Verhältnisse daher schnell etwas komplexer. Bei der Wahl der Unterrichtsbeispiele sollte man daher - wenn die Vorgehensweise in sich schlüssig sein soll - sich auf diesen Schulwissen-Bereich konzentrieren.

Zwei Anmerkungen zur Vermeidung von Verwirrung auf Schülerseite:

1

Eine wichtige Vereinfachung, die in den Formeln der Schulbücher zur Berechnung des pH-Werts durchgehend vorgenommen wird ohne sie zu erwähnen, ist die Vernachlässigung der Autoprotolyse des Wassers.
Auch diese Reaktion produziert H_3O^+-Ionen, allerdings in den gängigen Praxisbeispielen viel weniger als die Dissoziation der betrachteten Säuremoleküle.

$$H_2O + H_2O \rightleftharpoons H_3O^+ + OH^-$$ (Gleichgewicht liegt extrem weit auf der Eduktseite)

$$HA + H_2O \rightleftharpoons H_3O^+ + A^-$$

Wegen der in den gängigen Praxisbeispielen extrem unterschiedlichen Gleichgewichtslagen wird das obere Gleichgewicht als H_3O^+-Ionen-Quelle vernachlässigt.

Für die Lernenden kann die vorgenommene Vereinfachung an einem einfachen Beispiel legitimiert werden: Einer bestimmten Menge Wasser wird Essigsäure zugesetzt, der pH-Wert sinkt dabei von 7 auf 4.

Gleichgewichtsreaktion vor der Zugabe von Essigsäure:

$$2\ H_2O \rightleftharpoons H_3O^+ + OH^-$$

Gleichgewichtsreaktion nach der Zugabe von Essigsäure:

$$2\ H_2O + H_3CCOOH + H_2O \rightleftharpoons H_3O^+ + OH^- + H_3CCOO^- + H_3O^+$$

Es gibt also zwei Quellen für H_3O^+-Ionen:
1. Autoprotolyse des Wassers
2. Protolysereaktion der Essigsäure

Frage: Wieviel steuert die Autoprotolyse-Reaktion zu den H_3O^+-Ionen bei?
Ein pH-Wert von 4 bedeutet auch: ein pOH-Wert von 10. Die OH^--Ionen-Konzentration beträgt also 10^{-10} mol/L. Diese OH^--Ionen können nur aus der Autoprotolyse stammen, bei der gleichzeitig eine H_3O^+-Ionen-Konz. von 10^{-10} mol/L erzeugt wird. Der Anteil an der H_3O^+-Ionen-Konzentration von 10^{-4} mol/L in der Essigsäure-Lösung ist also tatsächlich verschwindend klein und kann vernachlässigt werden. Damit kann näherungsweise auch die H_3O^+-Ionen-Konzentration mit der Acetationen-Konzentration gleichgesetzt werden (ganz exakt entspricht die H_3O^+-Ionen-Konzentration der Summe von Acetationen-Konzentration und OH^--Ionen-Konzentration).

Fazit: Es ist legitim, den Beitrag der Autoprotolyse zum pH-Wert zu ignorieren, so lange er mengenmäßig keine Rolle spielt. Dies ändert sich allerdings bei extrem schwachen Säuren oder extrem geringen Konzentrationen von auch starken Säuren. Bei einer 10^{-8}-molaren HCl-Lösung kann man die Autoprotolyse eben nicht mehr vernachlässigen, sie liefert selbst mehr H_3O^+-Ionen als die zugegebene Säure.

2 **Wenn die Formeln zur Berechnung des pH-Wertes bzw. zur Berechnung der H_3O^+-Ionen-Konzentration hergeleitet wurden, stellt sich den Schülern noch die Frage: Wann soll welche Formel benutzt werden?**

Als Alternative zur üblichen Vorgehensweise, in der die Lehrkraft festlegt, wann welche Formel einzusetzen ist, bietet sich die Möglichkeit, die Lernenden die Tauglichkeit der Formeln für die verschiedenen Bedingungen selbst ermitteln zu lassen. Um zeitökonomisch arbeiten zu können, wurden die Formeln in eine Excel-Tabelle eingegeben. Nun können verschiedene pKS-Werte und verschiedenen Säurekonzentrationen eingegeben werden und es kann auf einen Blick beurteilt werden, wie „vertrauenswürdig“ die Berechnungen sind.

	Annahme: vollständige Protolyse		„keine Vereinfachung“ („PQ-Formel“)		Annahme: fast gar keine Protolyse	
	$c_{H_3O^+} = c_{0\ Säure}$		$c_{H_3O^+} = -\frac{K_S}{2} + \sqrt{\left(\frac{K_S}{2}\right)^2 + K_S \cdot c_{0\ Säure}}$		$c_{H_3O^+} = \sqrt{K_S \cdot c_{0\ Säure}}$	
c_0 (Säure)	$c(H_3O^+)$ in mol/L	pH	$c(H_3O^+)$ in mol/L	pH	$c(H_3O^+)$ in mol/L	pH
0,01	0,01	2,0000000	0,0007719	3,1124437	0,0008035	3,0950000
0,1	0,1	1,0000000	0,0025089	2,6005175	0,0025410	2,5950000
0,2	0,2	0,6989700	0,0035613	2,4483865	0,0035935	2,4444850
0,5	0,5	0,3010300	0,0056496	2,2479826	0,0056818	2,2455150
1	1	0,0000000	0,0080030	2,0967448	0,0080353	2,0950000
1,5	1,5	-0,1760913	0,0098089	2,0083790	0,0098411	2,0069544
2	2	-0,3010300	0,0113313	1,9457188	0,0113636	1,9444850
	pKs	**4,19**				

Konzentrationen frei wählbar

pK_S-Wert frei wählbar

3 **Links:** Wer sich auf für Spezialfälle interessiert, sei z. B. auf den Internet-Auftritt von Dr. Jakob Hättig verwiesen:

http://www.explain-it-arium.de/Themen/chemie/ac/ph_rechnungen