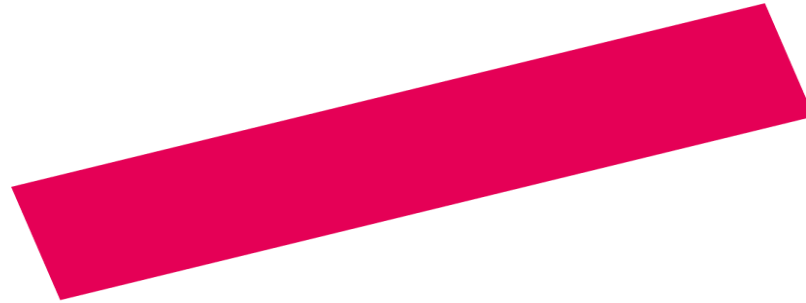


ATBC – Biomoleculen (BMBIO-T)

Biochemie

Week 2



Biochemie

Week 1: Chemische evenwichten, zwakke zuren en basen

Week 2: Buffers

Week 3: Moleculen in 2D: Lewis structuren

Week 4: Moleculen in 3D: VSEPR

Week 5: Polaire bindingen en elektronegativiteit

Week 6: Amino-zuren en eiwitten in zure / basische omgeving

Week 7: Scheidingsmethoden:

Size Exclusion Chromatografie en Ion Exchange Chromatografie

Leerdoelen week 2

Na deze week kan de student:

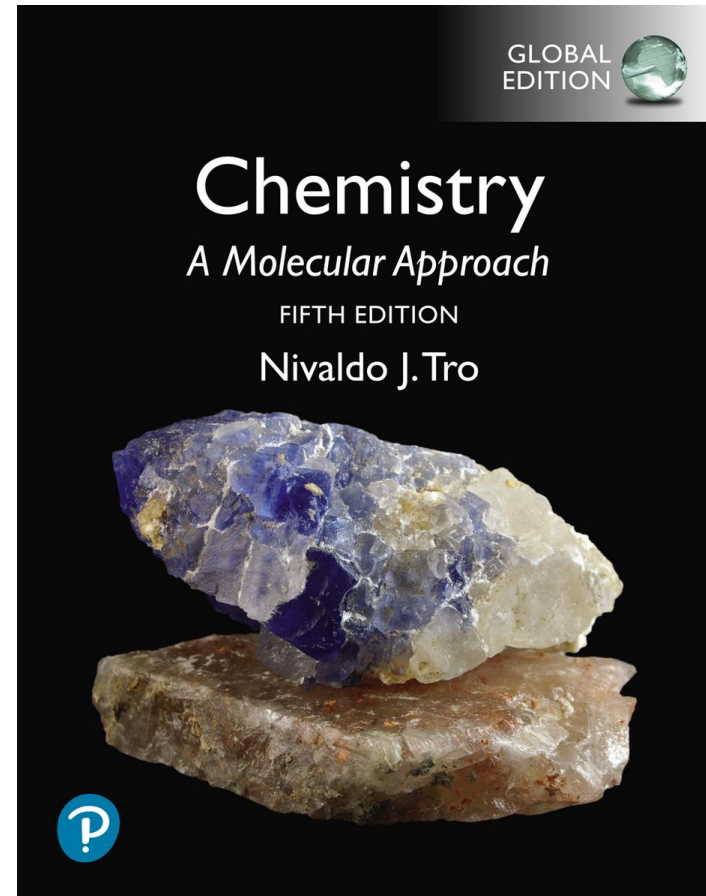
- De pH van een **bufferoplossing** berekenen
- De **pH verandering** in een bufferoplossing berekenen als zuur of base wordt toegevoegd
- Berekenen hoe je **buffers maakt** met een bepaalde pH
- Uitspraken doen over de **effectiviteit** en het **bereik** van een buffer
- De **ratio** berekenen van **zuur** en **geconjungeerde base** die aanwezig moet zijn in een buffer om een bepaalde pH te hebben.

Studiemateriaal

Chemistry, a molecular approach
Nivaldo J. Tro

5th edition (2021)

Pearson Education Inc
ISBN: 9781292349237



Wat is een buffer?

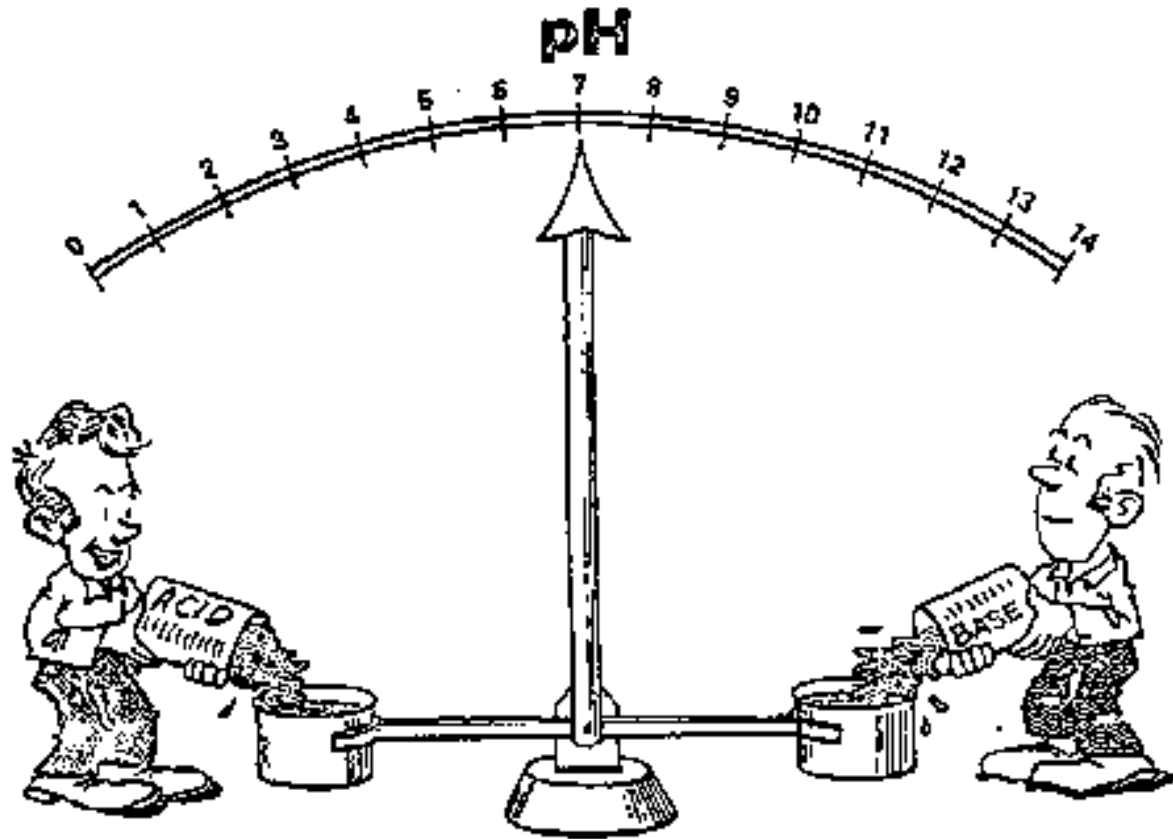


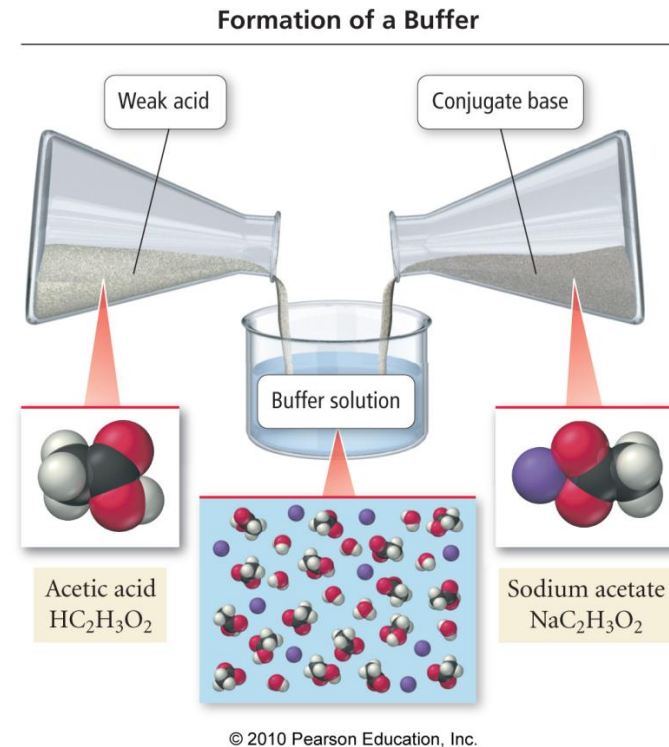
Figure retrieved from <https://chemkicksacid.weebly.com/buffers.html> on 10 July 2024

Buffers

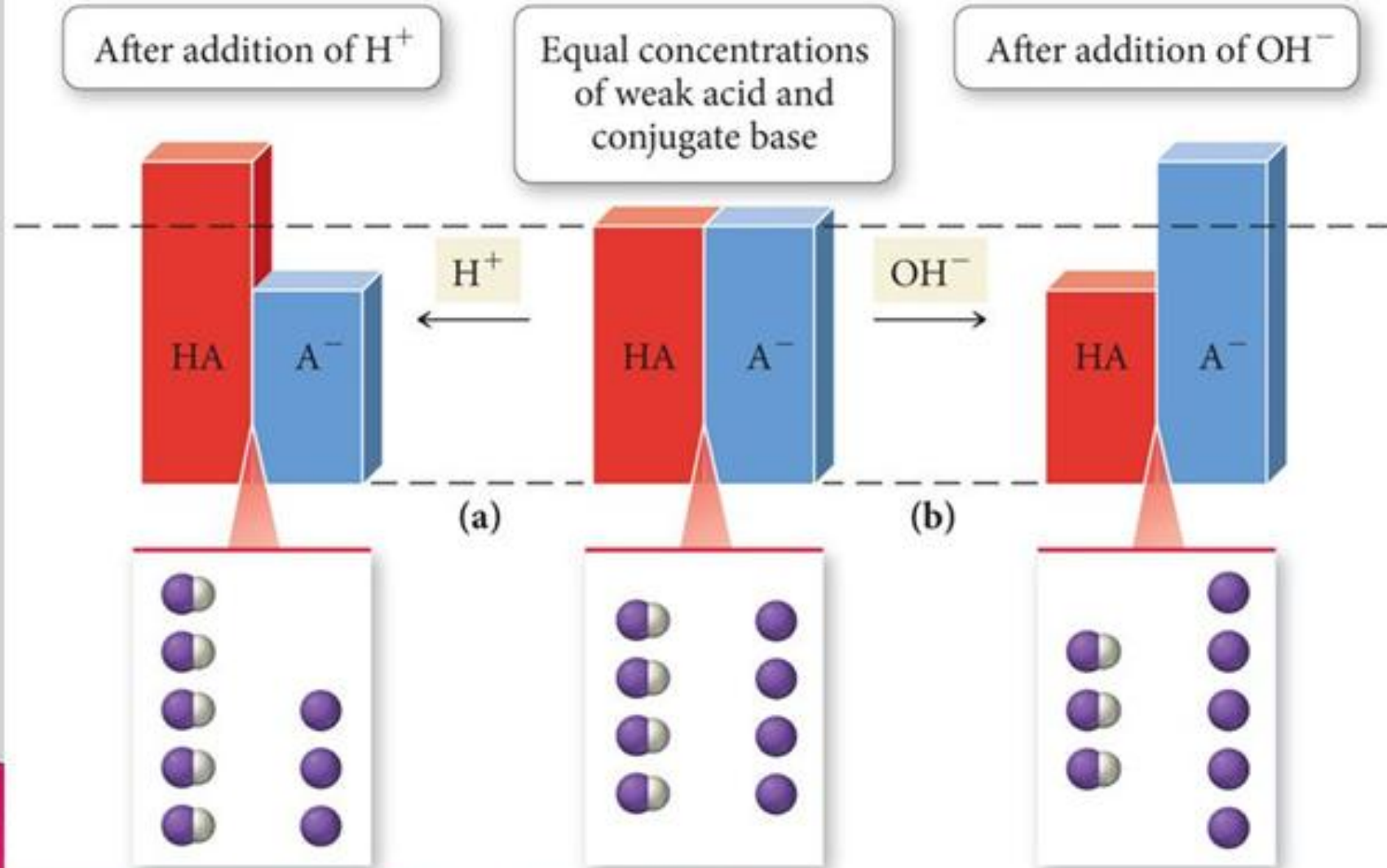
Oplossingen die **bestand** zijn **tegen veranderingen in pH** wanneer zuur of base wordt toegevoegd.

Ze neutraliseren het toegevoegde zuur of de toegevoegde base.

Bevatten significante hoeveelheden van **zwak zuur en** zijn geconjungeerde **base**.

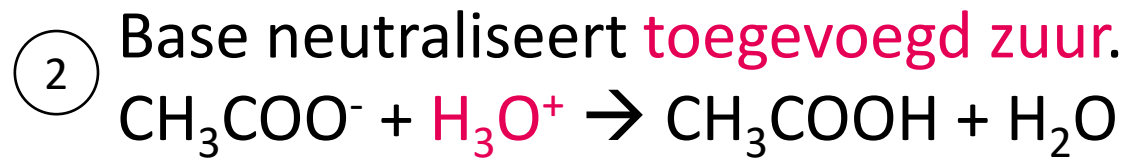
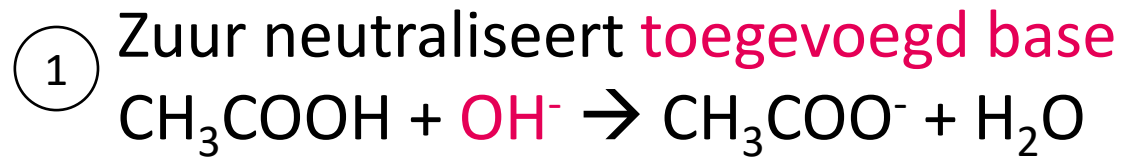


Action of a Buffer



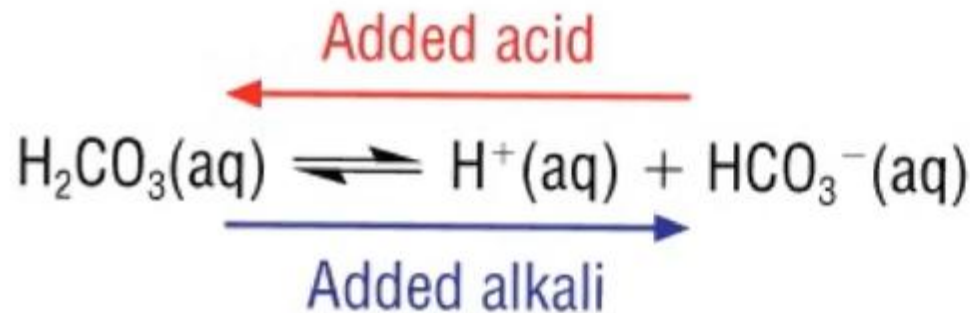
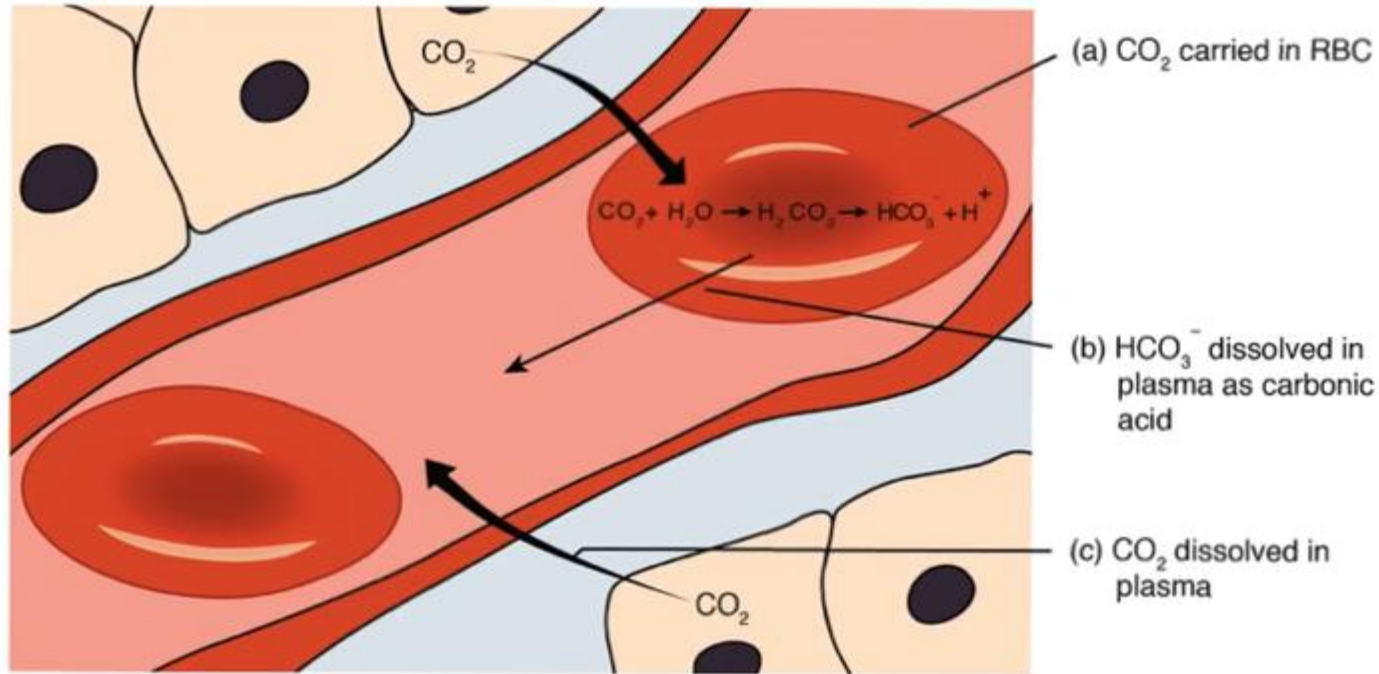
Buffer bevat zwak zuur en bijbehorende base

Bijvoorbeeld: buffer van azijnzuur en acetaat
 CH_3COOH CH_3COO^-



pH blijft nagenoeg gelijk.

Biologische buffer: carbonaat in bloed



Gezonde pH = 7.35 – 7.45

pH < 7.00 of > 7.80 → intensive care

Oefening

pH buffer berekenen

Bereken de pH van een buffer die 0,100 M CH_3COOH en 0,100 M NaCH_3COO bevat.

pH buffer berekenen (1/2)

Bereken de pH van een buffer die 0,100 M CH₃COOH en 0,100 M NaCH₃COO bevat.



	[HA]	[A ⁻]	[H ₃ O ⁺]
Begin	0,100	0,100	≈ 0
Omzetting	- x	+ x	+ x
Eind	0,100 - x	0,100 + x	x

$$1,7 \times 10^{-5} = \frac{[0,100 + x][x]}{[0,100 - x]}$$

pH buffer berekenen (2/2)

Bereken de pH van een buffer die 0,1 M CH_3COOH en 0,1 M NaCH_3COO bevat.

$$1,7 \times 10^{-5} = \frac{[0,1][x]}{[0,1]}$$

$$1,7 \times 10^{-5} = 0,1x$$

$$x = 1,7 \times 10^{-5} = [\text{H}_3\text{O}^+]$$

$$\text{pH} = -\log 1,7 \times 10^{-5} = 4,77$$

Check verwaarlozen:

$$\frac{1,7 \times 10^{-5}}{0,1} * 100\% < 5\%$$

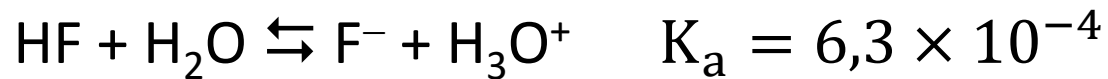
Conclusie: buffer met gelijke concentratie zwak zuur als geconjugeerde base geldt $K_a = [\text{H}_3\text{O}^+]$

Buffer berekenen

Bereken de pH van een buffer die 0,14 M HF en 0,071 M KF bevat.

Buffer berekenen

Bereken de pH van een buffer die 0,14 M HF en 0,071 M KF bevat.



$$6,3 \times 10^{-4} = \frac{[0,071 + x][x]}{[0,14 - x]}$$

$$6,3 \times 10^{-4} = \frac{[0,071][x]}{[0,14]}$$

$$8,8 \times 10^{-5} = 0,071x$$

$$x = 1,2 \times 10^{-3} = [\text{H}_3\text{O}^+]$$

$$\text{pH} = -\log(1,2 \times 10^{-3}) = 2,91$$

Check verwaarlozen:

$$\frac{1,2 \times 10^{-3}}{0,100} * 100\% < 5\%$$

Henderson–Hasselbalch vergelijking

alleen geldig wanneer x klein is (< 5%)

voorbeeld 18.2 and 18.3

$$-\log(K_a) = -\log\left(\frac{[A^-][H^+]}{[HA]}\right)$$

$$pK_a = pH - \log\left(\frac{[A^-]}{[HA]}\right)$$

$$pH = pK_a + \log\left(\frac{[A^-]}{[HA]}\right)$$

Buffer berekenen (nu met HH)

Bereken de pH van een buffer die 0,14 M HF en 0,071 M KF bevat.

$$pH = pK_a + \log \left(\frac{[A^-]}{[HA]} \right)$$

$$pH = 3,20 + \log \left(\frac{0,071}{0,14} \right)$$

$$pH = 2,91$$

Buffer effectiviteit

Effectiviteit is resistentie tegen pH veranderingen

Afhankelijk van:

- Relatieve hoeveelheden geconjugeerd zuur base → buffer pH bereik/range
- Absolute concentraties geconjugeerd zuur en base → buffer capaciteit

Buffer effectiviteit

- Een buffer is het meest effectief wanneer de concentraties [zuur] : [base] = 1 : 1
→ buffer pH bereik/range
- Een buffer is nog steeds effectief wanneer de verhouding tussen de concentraties [zuur] : [base] niet meer dan een factor 10 verschilt.
→ buffer pH bereik/range
- Een buffer is het meest effectief wanneer de concentratie zuur en geconjungeerde base hoog zijn → buffer capaciteit

Buffer bereik/range

Buffer met gelijke hoeveelheden geconjugeerd zuur en base is het meest effectief.

Uit de praktijk: $1 < [\text{base}]:[\text{zuur}] < 10$

$$\text{Henderson Hasselbalch: } pH = pK_a + \log\left(\frac{[A^-]}{[HA]}\right)$$

$$pH = pK_a + \log\left(\frac{1}{10}\right)$$

$$pH = pK_a + \log(0.10)$$

$$pH = pK_a - 1$$

$$pH = pK_a + \log\left(\frac{10}{1}\right)$$

$$pH = pK_a + \log(10)$$

$$pH = pK_a + 1$$

Het effectieve pH bereik van een buffer is $pK_a \pm 1$.

Oefening Buffer bereik

Welk zuur is het beste om een buffer met een pH van 4,25 te maken?

Chlorig zuur, HClO_2 $\text{pK}_a = 1,95$

Salpeterig zuur, HNO_2 $\text{pK}_a = 3,34$

Methaanzuur, HCHO_2 $\text{pK}_a = 3,74$

Hypochlorig zuur, HClO $\text{pK}_a = 7,54$

Antwoord Buffer bereik

Welk zuur is het beste om een buffer met een pH van 4,25 te maken?

Chlorig zuur, HClO_2 $\text{pK}_a = 1,95$

Salpeterig zuur, HNO_2 $\text{pK}_a = 3,34$

Methaanzuur, HCHO_2 $\text{pK}_a = 3,74$

Hypochlorig zuur, HClO $\text{pK}_a = 7,54$

pK_a van methaanzuur en salpeterigzuur liggen binnen bereik $\text{pK}_a \pm 1$

pK_a van methaanzuur het dichtst bij gewenste pK_a

Buffer capaciteit

De hoeveelheid van zuur of base die kan worden toegevoegd zonder de effectiviteit van de buffer te verliezen.

- De buffercapaciteit neemt toe bij **grotere absolute concentraties** van de buffercomponenten.
- De buffercapaciteit neemt toe wanneer **[base] : [zuur] dichtbij 1** ligt.
- Voor buffers die met name worden gebruikt om zuur te neutraliseren: $[base] > [zuur]$.
- Voor buffers die met name worden gebruikt om base te neutraliseren: $[zuur] > [base]$.

Effectiviteit buffer

Je hebt een buffer (1liter) van 0,175 M CH_3COOH en 0,110 M KCH_3COO . Je knoeit per ongeluk wat zuur in de buffer, 0,04 mol HCl .

1. Bereken de pH van de buffer **voor** toevoegen van HCl .
2. Bereken de pH van de buffer **na** toevoegen HCl .
3. Bereken de pH als HCl was geknoeid in water i.p.v. in buffer.

Neem aan dat het volume niet verandert.

Effectiviteit buffer (slide 1 van 3)

Je hebt een buffer (1liter) van 0,175 M CH_3COOH en 0,110 M KCH_3COO . Je knoeit per ongeluk wat zuur in de buffer, 0,04 mol HCl .

1. Bereken de pH van de buffer **voor** toevoegen van HCl .



$$\text{pH voor: } \text{pH} = \text{pK}_a + \log \frac{[\text{A}^-]}{[\text{HA}]}$$

$$\text{pH} = 4,76 + \log \frac{[0,110]}{[0,175]}$$

$$\text{pH} = 4,56$$

Meer zuur dan base in
buffer dus **pH < 4,76**

Effectiviteit buffer (slide 2 van 3)

Je hebt een buffer (1liter) van 0,175 M CH_3COOH en 0,110 M KCH_3COO . Je knoeit per ongeluk wat zuur in de buffer, 0,04 mol HCl .

2. Bereken de pH van de buffer na toevoegen HCl .



$$[\text{CH}_3\text{COO}^-]_{\text{na}} = 0,110 - 0,04 = 0,07 \text{ M}$$

$$[\text{CH}_3\text{COOH}]_{\text{na}} = 0,175 + 0,04 = 0,215 \text{ M}$$

$$\text{pH} = \text{pK}_a + \log \frac{[\text{A}^-]}{[\text{HA}]}$$

$$\text{pH} = 4,76 + \log \frac{[0,07]}{[0,215]}$$

$$\text{pH} = 4,27$$

pH voor: 4,56
pH na: 4,27

Effectiviteit buffer (slide 3 van 3)

Je hebt een buffer (1liter) van 0,175 M CH_3COOH en 0,110 M KCH_3COO . Je knoeit per ongeluk wat zuur in de buffer, 0,04 mol HCl .

3. Bereken de pH als HCl was geknoeid in water i.p.v. in buffer.

$$\text{pH} = -\log[\text{H}_3\text{O}^+]$$

$$\text{pH} = -\log 0,04$$

$$\text{pH} = 1,40$$



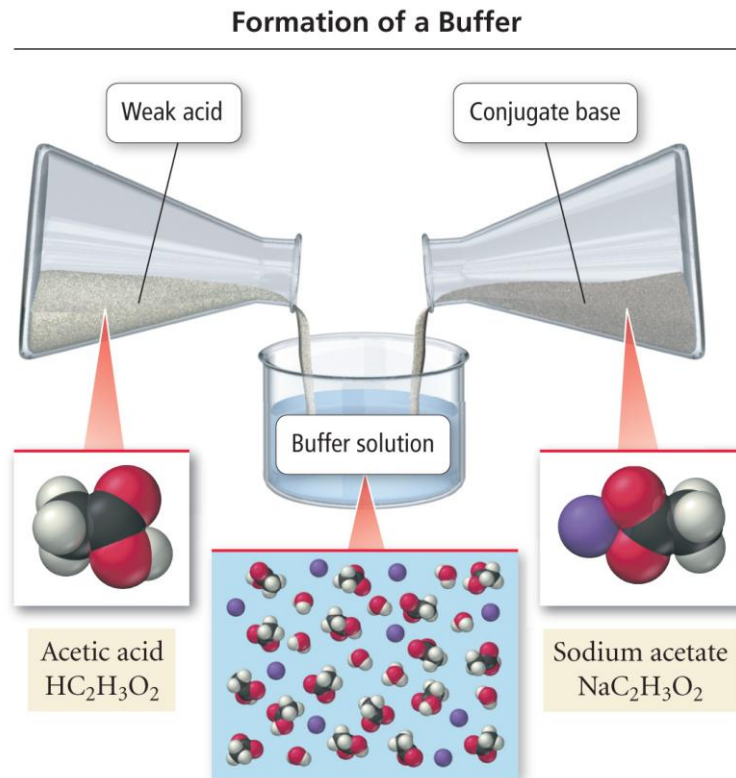
Met buffer:
pH voor 4,56
pH na 4,27

Buffer bereiden op het lab

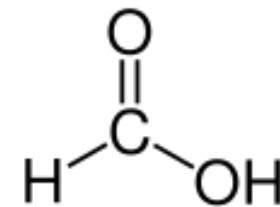
Hoe zou je dit aanpakken?

Zelf een buffer maken

Zwak zuur en geconjugeerde base bij elkaar voegen.



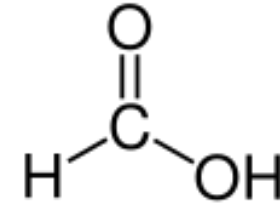
Buffer bereiden



Bereken de ratio $\text{NaHCOO} : \text{HCOOH}$ die nodig is om een buffer van methaanzuur met pH 4,25 te bereiden.

Schrijf op als ratio $\text{CHOO}^- : \text{HCOOH} = \dots : \dots$

Buffer bereiden



Bereken de ratio $\text{NaHCOO} : \text{HCOOH}$ die nodig is om een buffer van methaanzuur met pH 4,25 te bereiden.

Schrijf op als ratio $\text{CHOO}^- : \text{HCOOH} = \dots : \dots$

$$4,25 = 3,75 + \log \frac{[\text{CHOO}^-]}{[\text{HCOOH}]}$$

$$0,5 = \log \frac{[\text{CHOO}^-]}{[\text{HCOOH}]}$$

$$10^{0,5} = \frac{[\text{CHOO}^-]}{[\text{HCOOH}]}$$

$$3,16 = \frac{[\text{CHOO}^-]}{[\text{HCOOH}]} \quad \rightarrow \quad \text{CHOO}^- : \text{HCOOH} = 3,16 : 1$$

Een buffer bereiden met behulp van titratie

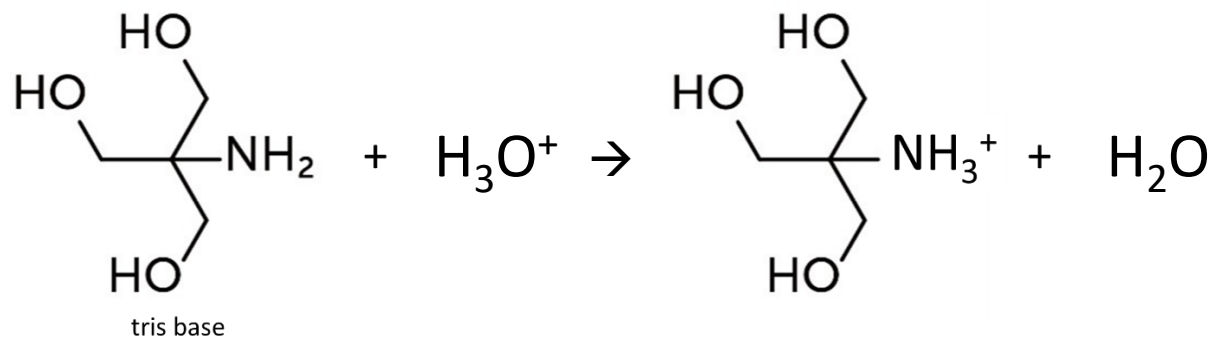
1. Weeg je hoeveelheid zuur of base
(vaak is maar 1 van de 2 aanwezig op het lab)
2. Voeg water toe
(net iets minder dan de gewenste hoeveelheid)
3. Voeg zuur of base toe tot de juiste ratio is bereikt
(m.b.v. een pH meter)
4. Vul aan met water tot het gewenste volume

Zelf buffer maken met een titratie

Tris-HCl buffer maken van pH 8,0.

Op lab aanwezig: Tris base ($pK_b = 5,9$)

Titreren met HCl (sterk zuur), gebruik pH meter.



Leerdoelen week 2

Na deze week kan de student:

- De pH van een **bufferoplossing** berekenen
- De **pH verandering** in een bufferoplossing berekenen als zuur of base wordt toegevoegd
- Berekenen hoe je **buffers maakt** met een bepaalde pH
- Uitspraken doen over de **effectiviteit** en het **bereik** van een buffer
- De **ratio** berekenen van **zuur** en **geconjungeerde base** die aanwezig moet zijn in een buffer om een bepaalde pH te hebben.

Zelfstudie

Oefenen:

Assignments week 2

Bestuderen:

Hoofdstuk 18.2 en 18.3 van Tro