

**ĐẠI HỌC THÁI NGUYÊN
TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM**

Tạ Văn Thành

**NGHIÊN CỨU ỨNG DỤNG
PHẦN MỀM MATLAB ĐỂ TÍNH PH
CỦA CÁC HỆ AXIT – BAZƠ PHỨC TẠP**

Chuyên ngành: Hóa phân tích

Mã số: 60440118

LUẬN VĂN THẠC SĨ HÓA PHÂN TÍCH

**NGƯỜI HƯỚNG DẪN KHOA HỌC
PGS. TS. TẠ THỊ THẢO**

Thái Nguyên, năm 2013

MỤC LỤC

MỤC LỤC	i
DANH MỤC BẢNG	v
Lời cảm ơn	v
MỞ ĐẦU	1
PHẦN I: TỔNG QUAN	3
1.1. Phương pháp xác định nồng độ các cấu tử trong dung dịch.....	3
1.2. Khái niệm axit – bazơ.....	3
1.2.1. Thuyết axit – bazơ của Bronsted.....	3
1.2.2. Thuyết axit – bazơ của Lewis:	4
1.3. Tích số ion của nước.....	4
1.4. Cường độ của axit và bazơ. Hằng số axit K_a và hằng số bazơ K_b.....	4
1.5. Quan hệ giữa hằng số axit và hằng số bazơ của một cặp axit-bazơ liên hợp. 5	5
1.6. Thang pH và pOH:	6
1.7. Vấn đề chung về chất điện li trong dung dịch	6
1.7.1. Chất điện li và sự điện li.....	6
1.7.2. Độ điện li và hằng số điện li.	6
1.8. Những định luật cơ bản để tính toán pH trong dung dịch axit- bazơ	7
1.8.1. Định luật bảo toàn nồng độ.....	7
1.8.2. Định luật bảo toàn điện tích	7
1.8.3. Định luật tác dụng khối lượng	7
1.8.4. Định luật bảo toàn proton (điều kiện proton).....	7
1.9. Phương pháp phân tích thể tích.....	8
1.9.1. Phương pháp điều chế các dung dịch	8
1.9.2. Nguyên tắc của phương pháp phân tích thể tích	9

1.9.3. Phản ứng dùng trong phân tích thể tích	10
1.9.4. Các phương pháp chuẩn độ	10
1.10. Sơ lược về phần mềm MATLAB.....	11
PHẦN II: THỰC NGHIỆM.....	16
2.1. Nội dung và phương pháp nghiên cứu.....	16
2.2. Hóa chất và dụng cụ.....	16
2.3. Tiến hành thực nghiệm.....	17
2.3.1. Pha chế dung dịch	17
2.3.2. Chuẩn độ thể tích xác định nồng độ các dung dịch.....	18
2.3.3. Pha loãng các dung dịch và pha chế hỗn hợp các axit, bazơ. Đo pH	20
PHẦN III: KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN	28
3.1. Xây dựng thuật toán tính pH của một số hệ axit – bazơ.....	28
3.1.1. Dung dịch các đơn axit – bazơ.....	29
3.1.2. Dung dịch của các hỗn hợp axit – bazơ.....	37
3.1.3. Dung dịch các đa axit – bazơ.....	43
3.2. Đánh giá sai khác giữa giá trị tính toán và thực nghiệm	46
3.2.1. Sự sai khác giá trị pH tính toán và thực nghiệm với dung dịch axit mạnh HCl	46
3.2.2. Sự sai khác giá trị pH tính toán và thực nghiệm với dung dịch axit mạnh NaOH.....	47
3.2.3. Sự sai khác giá trị pH tính toán và thực nghiệm với dung dịch axit yếu CH ₃ COOH.....	47
3.2.4. Sự sai khác giá trị pH tính toán và thực nghiệm với dung dịch bazơ yếu NH ₃ có nồng độ khác nhau.	48
3.2.5. Sự sai khác giá trị pH tính toán và thực nghiệm với dung dịch đa axit H ₃ PO ₄	48

3.2.6. Kết quả tính pH từ chương trình tính Matlab và kết quả đo pH từ thực nghiệm đối với dung dịch hỗn hợp đơn axit mạnh HCl và đơn axit yếu CH ₃ COOH có nồng độ khác nhau.....	49
3.2.7. Kết quả tính pH từ chương trình tính Matlab và kết quả đo pH từ thực nghiệm đối với dung dịch hỗn hợp đơn bazơ mạnh NaOH và đơn bazơ yếu CH ₃ COONa có nồng độ khác nhau.....	50
3.2.8. Kết quả tính pH từ chương trình tính Matlab và kết quả đo pH từ thực nghiệm đối với dung dịch hỗn hợp đệm axetat CH ₃ COOH và CH ₃ COONa có nồng độ khác nhau.....	50
3.2.8. Kết quả tính pH từ chương trình tính Matlab và kết quả đo pH từ thực nghiệm đối với dung dịch hỗn hợp đệm amoni NH ₄ Cl và NH ₄ OH có nồng độ khác nhau.	51
KẾT LUẬN.....	51

DANH MỤC BẢNG

Bảng 1: Kết quả xác định nồng độ dung dịch: NaOH; HCl; CH ₃ COOH và NH ₄ OH bằng phương pháp chuẩn độ thể tích	20
Bảng 2: Kết quả đo pH của các dung dịch đơn axit mạnh HCl có nồng độ khác nhau.	21
Bảng 3: Kết quả đo pH của các dung dịch đơn bazơ mạnh NaOH có nồng độ khác nhau:	21
Bảng 4: Kết quả đo pH của các dung dịch đơn axit yếu CH ₃ COOH có nồng độ khác nhau:	22
Bảng 5: Kết quả đo pH của các dung dịch đơn bazơ yếu NH ₃ có nồng độ khác nhau:	22
Bảng 6: Kết quả đo pH của các dung dịch đa axit yếu H ₃ PO ₄ có nồng độ khác nhau:	23
Bảng 7: Kết quả đo pH của dung dịch các hỗn hợp đơn axit mạnh HCl và đơn axit yếu CH ₃ COOH có nồng độ khác nhau.....	23
Bảng 8: Kết quả đo pH của dung dịch các hỗn hợp đơn bazơ mạnh NaOH và đơn bazơ yếu CH ₃ COONa có nồng độ khác nhau.	25
Bảng 9: Kết quả đo pH của dung dịch các hỗn hợp đệm axit CH ₃ COOH và đơn bazơ yếu CH ₃ COONa có nồng độ khác nhau.....	26
Bảng 10: Kết quả đo pH của dung dịch các hỗn hợp đệm amoni NH ₄ Cl và NH ₄ OH có nồng độ khác nhau.	27
Bảng 11: So sánh kết quả xác định pH của dung dịch HCl có nồng độ khác nhau bằng thực nghiệm và tính toán theo lý thuyết	46
Bảng 12: So sánh kết quả xác định pH của dung dịch NaOH có nồng độ khác nhau bằng thực nghiệm và tính toán theo lý thuyết.....	47

Bảng 13: So sánh kết quả xác định pH của dung dịch axit yếu CH_3COOH có nồng độ khác nhau bằng thực nghiệm và tính toán theo lý thuyết.....	47
Bảng 14: So sánh kết quả xác định pH của dung dịch bazơ yếu NH_3 có nồng độ khác nhau bằng thực nghiệm và tính toán theo lý thuyết.....	48
Bảng 15: So sánh kết quả xác định pH của dung dịch đa axit H_3PO_4 có nồng độ khác nhau bằng thực nghiệm và tính toán theo lý thuyết.....	48
Bảng 16: So sánh kết quả xác định pH của dung dịch đơn axit mạnh HCl và đơn axit yếu CH_3COOH có nồng độ khác nhau bằng thực nghiệm và tính toán theo lý thuyết.....	49
Bảng 17: So sánh kết quả xác định pH của dung dịch đơn bazơ mạnh NaOH và đơn bazơ yếu CH_3COONa có nồng độ khác nhau bằng thực nghiệm và tính toán theo lý thuyết	50
Bảng 18: So sánh kết quả xác định pH của dung dịch đệm axetat CH_3COOH và CH_3COONa có nồng độ khác nhau bằng thực nghiệm và tính toán theo lý thuyết.....	50
Bảng 19: So sánh kết quả xác định pH của dung dịch đệm amoni NH_4Cl và NH_4OH có nồng độ khác nhau bằng thực nghiệm và tính toán theo lý thuyết	51

Lời cảm ơn

Với lòng kính trọng và biết ơn sâu sắc, em xin chân thành cảm ơn TS. Tạ Thị Thảo đã giao đề tài và tận tình hướng dẫn em trong suốt thời gian thực hiện đề tài.

Em xin chân thành cảm ơn các thầy, cô trong bộ môn phân tích, trong khoa đã tạo điều kiện và giúp đỡ em thực hiện đề tài này.

Tôi cũng xin cảm ơn các anh chị, các bạn sinh viên phòng thí nghiệm hoá phân tích đã động viên, trao đổi và giúp đỡ tôi trong suốt thời gian thực hiện đề tài này.

Thái Nguyên, ngày 28 tháng 03 năm 2013

Học viên

Tạ Văn Thành

LỜI CAM ĐOAN

Tôi xin cam đoan: Đề tài: “*Nghiên cứu ứng dụng phần mềm Matlab để tính pH của các hệ axit – bazơ phức tạp*” là do bản thân tôi thực hiện. Các số liệu, kết quả trong đề tài là trung thực. Nếu sai sự thật tôi xin chịu trách nhiệm.

Thái Nguyên, tháng 05 năm 2013

Tác giả luận văn

Tạ Văn Thành

**Xác nhận của
chủ tịch hội đồng
bảo vệ**

**Xác nhận của
khoa chuyên môn**

**Xác nhận của
giáo viên hướng dẫn**

MỞ ĐẦU

Phản ứng axit – bazơ là phản ứng rất quan trọng cả về mặt nghiên cứu lý thuyết và mặt ứng dụng hóa học vào thực tiễn.

Phần lớn các phản ứng hóa học đều được diễn ra trong dung dịch nước, đối với dung dịch nước do trong thành phần dung dịch luôn có sự hiện diện của ion H^+ và OH^- . Sự có mặt thường xuyên của hai ion này trong thành phần dung dịch đã gây ra những ảnh hưởng trực tiếp hoặc gián tiếp đến các cân bằng khác trong dung dịch.

Tính axit hay bazơ của dung dịch có ảnh hưởng rất lớn đến các quá trình xảy ra trong dung dịch như khả năng tạo phức của ion kim loại, phản ứng oxi hóa – khử, khả năng bị thủy phân của các ion kim loại ...

Do đó, việc tính toán giá trị trong dung dịch axit – bazơ giữ vai trò quan trọng không chỉ đối với hóa phân tích mà cả với hóa học nói chung. Tuy nhiên việc tính toán giá trị pH trong dung dịch axit – bazơ là khá phức tạp.

Trước đây, để xác định giá trị pH của hệ axit – bazơ phức tạp, chúng ta phải xây dựng phương trình phức tạp nhưng rất khó khăn để tìm ra nghiệm nên phải đưa ra điều kiện để phương trình phức tạp trở thành một phương trình rút gọn hơn.

Để giải quyết vấn đề này, ở Việt Nam trong nhiều năm gần đây đã có một số công trình nghiên cứu lý thuyết kết hợp với ứng dụng công nghệ thông tin vào hóa phân tích để lập các chương trình tính pH của các dung dịch axit – bazơ nhưng dùng phần mềm Pascal để lập trình tính toán. Phần mềm này đòi hỏi người sử dụng phải rất am hiểu về toán học mới có thể lập trình, đồng thời cũng mất rất nhiều thời gian để sử dụng. Thay vào đó, phần mềm Matlab là phần mềm rất mạnh về các phép tính được sử dụng trong tất cả các ngành

khoa học nghiên cứu về xã hội, tự nhiên cũng như ứng dụng thực tế. Trong lĩnh vực điện tử viễn thông, xây dựng, kinh tế,... nhiều công trình nghiên cứu đã sử dụng phần mềm Matlab. Tuy nhiên chưa có công trình nào tính toán pH của các hệ axit bazơ phức tạp sử dụng phần mềm Matlab.

Trên cơ sở đó, chúng tôi đã chọn đề tài: **“Nghiên cứu ứng dụng phần mềm MATLAB để tính pH của các hệ axit- bazơ phức tạp”**. Việc sử dụng phần mềm Matlab kết hợp với các kỹ thuật tính toán, thống kê mở ra khả năng phân tích nhanh, rẻ tiền.

Trong khuôn khổ của một luận văn, chúng tôi đặt ra các nhiệm vụ như sau:

- Nghiên cứu lý thuyết về pH của các dung dịch axit – bazơ để đưa ra các thuật toán, công thức tính pH của một số hệ axit – bazơ phức tạp.

- Pha dãy dung dịch chuẩn của các dung dịch chứa đồng thời các chất cần phân tích. Chuẩn độ để xác định nồng độ chính xác của các dung dịch đã pha chế.

- Đo pH của dãy các dung dịch đã pha chế để kiểm tra tính chính xác của chương trình tính toán pH của các dung dịch axit-bazơ dựa trên phần mềm matlab.

- Sử dụng phần mềm Matlab để lập chương trình tính pH của các hệ axit – bazơ phức tạp.

- Kiểm tra lại kết quả tính toán trên chương trình Matlab so với kết quả thực nghiệm.