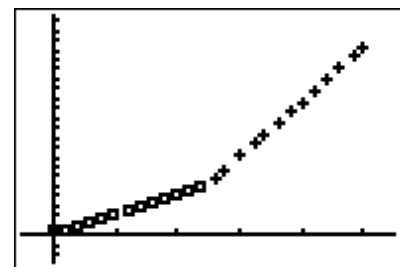
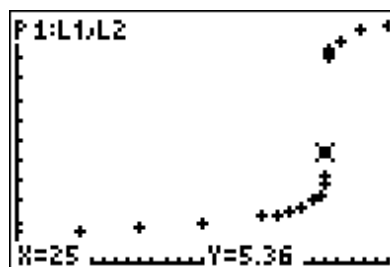
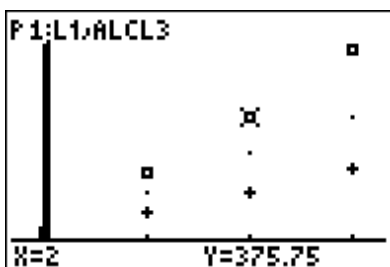


T³ VLAANDEREN

De TI-84 Plus gebruiken in de lessen chemie

Werken met data en sensoren

Olivier Douvere
Guido Herweyers
Luc Scherpereel



Inleiding

De grafische rekenmachine TI-84plus biedt niet alleen de wiskunde- maar ook de chemieleraar zeer veel mogelijkheden. Naast het ‘normale’ gebruik als rekentoestel kan je met een TI-84 plus redoxreactievergelijking balanceren, chemiesensoren aansturen (pH, geleidbaarheid, temperatuur ...), meetresultaten statistisch verwerken, grafieken uittekenen en nog veel meer.

In het eerste hoofdstuk wordt dieper ingegaan op de meer ingewikkelde handelingen met de TI-84plus zoals het uitbalanceren van redoxreactievergelijkingen en verwerking van meetgegevens.

In het tweede hoofdstuk wordt aan de hand van concreet uitgewerkte experimenten de mogelijkheid besproken om sensoren te koppelen aan het grafisch rekentoestel. Hierbij wordt gebruik gemaakt van de EasyLink interface. Deze interface kan direct aangesloten worden op de USB-poort van een TI-84plus. Na het aansluiten van de interface wordt automatisch de vooraf geïnstalleerde applicatie Vernier EasyData geladen op het rekentoestel.

Dit cahier kwam tot stand naar aanleiding van de “Dag van chemie 2010” georganiseerd door de stuurgroep chemie van Eekhoutcentrum in samenwerking met T3-Vlaanderen.

1 De TI-84 Plus gebruiken in de lessen chemie

1.1 Eerste kennismaking met de TI-84 Plus

Raadpleeg het document “De TI-84 Plus in de klas”, dat men kan downloaden op de website www.t3vlaanderen.be onder “publicaties”.

Installeer TI-Connect op uw computer, ter beschikking via www.education.ti.com onder “downloads” → “Apps, Software and Updates”, “computersoftware” → “Connectivity software”.

Met TI-Connect kan men via de knop “Updates” automatisch het nieuwe operating system 2.53 MP (MathPrint) voor de TI-84 Plus downloaden en installeren op een rekentoestel TI-84 Plus dat is aangesloten op de computer.

Informatie over TI-Connect vindt men via www.t3vlaanderen.be onder “Symposia” en “2009” in de “Syllabus 2009” vanaf pagina 121.

1.2 Elementaire berekeningen met de TI-84 Plus

1.2.1 Algemene Strategie voor het oplossen van oefeningen chemie

In de theoretische vorming worden formules opgesteld of afgeleid die het verband tussen verschillende grootheden weergeven. Bij de oefeningen gebruiken we die formules:

- voor het maken van berekeningen vertrekken we van een formule,
- hieruit wordt eventueel een andere formule afgeleid,
- daarna worden de gegevens ingevuld en de berekening gemaakt,
- het eindresultaat wordt geformuleerd, rekening houdend met de nauwkeurigheid van de gegevens.

1.2.2 concentratievormen

Een verdunde oplossing van zwavelzuur met een molaire concentratie van 2,25 mol/L heeft een relatieve dichtheid van 1,135. Bereken de concentratie in m%.

Oplossing:

- zwavelzuur = waterstofsulfaat = H_2SO_4
- molaire concentratie: symbool c , eenheid mol/L
- massaprocent : symbool m% (Formules 2.1)

Gevraagd wordt de omzetting van $c \rightarrow \text{m}\%$

Uit de formule $c = \frac{\text{m}\% \cdot \rho_{\text{oplossing}} \cdot 10}{M}$ volgt $\text{m}\% = \frac{c \cdot M}{\rho_{\text{oplossing}} \cdot 10}$

We beschikken over de volgende gegevens: $c = 2,25 \text{ mol/L}$ en $\rho_{\text{oplossing}} = 1,135$

De molaire massa M van zwavelzuur (H_2SO_4) is

$$M_{H_2SO_4} = \sum_i A_i = 2 \times 1,01 + 32,06 + 4 \times 16,00 \quad \text{of} \quad M_{H_2SO_4} = 98,08 \text{ g/mol}$$

$$\text{Dit levert: } m\% = \frac{2,25 \times 98,08}{1,135 \times 10} = 19,4$$

```

2*1.01+32.06+4*1
6
          98.08
(2.25*98.08)/(1.
135*10)
          19.44317181
  
```

Met het operating system 2.53MP en het toestel in mode Mathprint wordt dit (het menu wordt geactiveerd met [ALPHA] [F1])

```

↑BACK↑
MATHPRINT CLASSIC
n/d Un/d
ANSWERS: AUTO DEC FRAC
GOTOFORMAT GRAPH: NO YES
STATDIAGNOSTICS: OFF ON
SET CLOCK 03/14/10 8:33PM
  
```

```

1: n/d
2: Un/d
3: f n/d d Un/d
4: f F4 D
FRAC FUNC MTRN VVAR
  
```

```

2.25*98.08
1.135*10
          19.44317181
  
```

Oefeningen:

1. Bereken de molaire concentratie van een geconcentreerde oplossing van zoutzuur. Zo'n oplossing heeft een concentratie van 37,27 m% en een relatieve dichtheid van 1,185. (Antwoord: 12,11 mol/L)
2. Bereken de molaire concentratie van een oplossing van 16,76 m% salpeterzuur met een relatieve dichtheid van 1,095. (Antwoord: 2,912 mol/L)

1.2.3 Stoichiometrische berekeningen

- a) Een oplossing van salpeterzuur die 59,69 m% salpeterzuur bevat , heeft een relatieve dichtheid van 1,365. Bereken de molaire concentratie.
- b) Hoeveel g koper reageert met 28,74 mL van de salpeterzuuroplossing volgens de reactie:



- c) Het gevormde stikstofdioxidegas wordt opgevangen bij 25 °C en 1023 mbar atmosferdruk. Hoeveel liter NO₂ wordt er gevormd?

Oplossing:

Algemeen:

- salpeterzuur = waterstofnitraat = HNO₃

- stoichiometrie:

voor een reactie van het type $a A + b B + \dots \rightarrow c C + d D + \dots$

$$\text{geldt: } \frac{1}{a} n_A = \frac{1}{b} n_B = \frac{1}{c} n_C = \frac{1}{d} n_D$$

We vertrekken hieruit, met toepassing van formules als:

$$n_D = \frac{d}{a} n_A, \quad n = \frac{m}{M}, \quad c = \frac{n}{V} \quad \text{met } [c] = \text{mol} / L$$

a) Uit $c = \frac{m\% \cdot \rho_{oplossing} \cdot 10}{M}$ volgt $c = \frac{59,69 \times 1,365 \times 10}{63,02} = 12,93 \text{ mol} / L$

b) stoichiometrie:



$$\text{met } n_{\text{Cu}} = \frac{1}{4} n_{\text{HNO}_3} = n_{\text{Cu}(\text{NO}_3)_2} = \frac{1}{2} n_{\text{NO}_2} = \frac{1}{2} n_{\text{H}_2\text{O}}$$

$$\text{zodat } n_{\text{Cu}} = \frac{1}{4} n_{\text{HNO}_3} = \frac{1}{4} c_{\text{HNO}_3} \cdot V_{\text{HNO}_3} = \frac{12,93 \times 28,74 \times 10^{-3}}{4} = 0,09290 \text{ mol}$$

$$\text{waaruit } m_{\text{Cu}} = n_{\text{Cu}} \cdot M_{\text{Cu}} = 0,09290 \times 63,55 = 5,904 \text{ g}$$

c) De ideale gaswet levert $p \cdot V = n \cdot R \cdot T$ of $V = \frac{n \cdot R \cdot T}{p}$

$$\text{met volgende gegevens: } R = 8,314 \text{ JK}^{-1} \text{mol}^{-1}, \quad T = 25 + 273 = 298 \text{ K}, \\ p = 1023 \text{ mbar} = 1023 \text{ hPa} = 102300 \text{ Pa}$$

Te berekenen: het aantal mol NO_2 of

$$n_{\text{NO}_2} = 2 \cdot n_{\text{Cu}} = 2 \times 0,09290 = 0,1858 \text{ mol}$$

$$\text{Bijgevolg is } V_{\text{NO}_2} = \frac{n \cdot R \cdot T}{p} = \frac{0,1858 \times 8,314 \times 298}{102300} = 4,50 \times 10^{-3} \text{ m}^3 = 4,50 \text{ L}$$

Oefening:

- a) Een oplossing van zoutzuur die 36,28 m% HCl bevat heeft een relatieve dichtheid van 1,180. Bereken de molaire concentratie.
- b) Hoeveel g aluminium reageert met 32,87 mL van de zoutzuuroplossing volgens de reactie:
- $$2 \text{Al} + 6 \text{HCl} \rightarrow 2 \text{AlCl}_3 + 3 \text{H}_2$$
- c) Het gevormde waterstofgas wordt opgevangen bij 19,5 °C en 1015 mb atmosferedruk. Hoeveel liter H_2 wordt er gevormd?

(Antwoord: 11,74 mol/L , 3,470 g, 4,62 L)

1.2.4 Reactiesnelheid

De reactie $2 \text{NO} \rightarrow \text{N}_2 + \text{O}_2$ is een reactie van tweede orde. De reactiesnelheid kan dus geschreven worden als $v = k \cdot [\text{NO}]^2$.

Hierbij is k de reactiesnelheidsconstante. Deze kan worden bepaald bij verschillende temperaturen. De resultaten zijn:

temperatuur T K	reactiesnelheidsconstante k
1400	0,143
1500	0,659

Bereken de activeringsenergie E_a van de reactie.

Oplossing

Men kan de activeringsenergie bepalen met de vergelijking van Arrhenius :

$$\ln\left(\frac{k_1}{k_2}\right) = \frac{E_a}{R} \cdot \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}\right)$$

Hieruit volgt :

$$E_a = \frac{R}{\left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}\right)} \cdot \ln\left(\frac{k_1}{k_2}\right) = \frac{8,314}{\left(\frac{1}{1500} - \frac{1}{1400}\right)} \cdot \ln\left(\frac{0,143}{0,659}\right) = 267\,000 \text{ J/mol} = 267 \text{ kJ/mol}$$

“Classic”

“Mathprint”

Oefeningen:

- Voor de reactie $\text{C}_2\text{H}_5\text{Cl} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{HCl}$ is de reactiesnelheidsconstante $3,5 \cdot 10^{-8}$ bij 600 K en $1,6 \cdot 10^{-6}$ bij 650 K. Bereken de activeringsenergie van de reactie.
(Antwoord: 247 kJ/mol)
- Voor de reactie $\text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_6$ is de activeringsenergie 181 kJ/mol.
 $k = 1,3 \cdot 10^{-3}$ bij 700 K.
Bereken de reactiesnelheidsconstante van de reactie bij 730 K.
(Antwoord: $4,7 \cdot 10^{-3}$)

3. Voor de reactie $C_2H_5Br \rightarrow C_2H_4 + HBr$ is de activeringsenergie 226 kJ/mol en $k = 2,0 \cdot 10^{-5}$ bij 380 °C.

Bij welke temperatuur is $k = 6,0 \cdot 10^{-5}$?

(Antwoord: 398 °C)

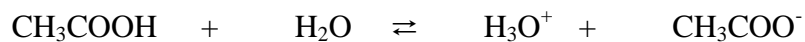
1.3 Vergelijkingen met één onbekende oplossen met de TI-84 Plus

1.3.1 Chemisch evenwicht en pH

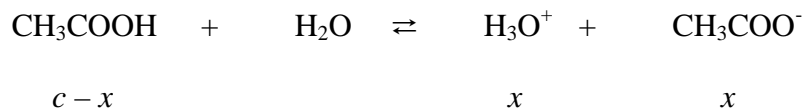
Bereken de pH van een oplossing van het zwak zure azijnzuur (CH_3COOH). De oplossing heeft een concentratie van 0,200 mol/L.

Oplossing:

Een zwak zuur als azijnzuur dissocieert bij het oplossen in water slechts gedeeltelijk en geeft dus aanleiding tot het ontstaan van een evenwicht:



De reële concentratie aan oxoniumionen (x) ontstaat door gedissocieerde azijnzuur moleculen. De analytische concentratie c aan azijnzuur vermindert dus deels door deze dissociatie, zodat bij evenwicht de volgende concentraties voorkomen:



Het evenwicht wordt gekenmerkt door de evenwichtsconstante K (voor een zuur: K_a), empirisch vastgesteld als:

$$K_{CH_3COOH} = \frac{[H_3O^+][CH_3COO^-]}{[CH_3COOH]} = \frac{x \cdot x}{c - x} = \frac{x^2}{c - x} = K_a$$

Dit levert de tweedegraadsvergelijking: $x^2 + K_a \cdot x - c \cdot K_a = 0$

In tabellen vinden we voor CH_3COOH een $pK_a = 4,75$ of $K_a = 10^{-4,75}$

De vergelijking wordt dan: $x^2 + 10^{-4,75} \cdot x - 0,200 \cdot 10^{-4,75} = 0$

De pH van de oplossing wordt vervolgens bepaald door $pH = -\log [H_3O^+]$

Aangezien dit een *veeltermvergelijking* is kan men ze oplossen met de Applicatie “Polynomial root finder and simultaneous equation solver”.

Deze applicatie is ter beschikking via www.education.ti.com → downloads → Apps, Software & Updates → TI-84 Plus Family, Math Apps.

Druk op [APPS], ga met de pijltjestoets naar PolySmlt2, druk [ENTER] en ga verder met 1:PolyRootFinder

```

APPLICATIONS
↑Nederlan
:NoteFlio
:Organize
:Perioden
:Periodic
:Physics
↓PolySmlt2
    
```

```

TEXAS
INSTRUMENTS
POLY ROOT FINDER AND
SIMULTANEOUS EQN SOLVER
V2.00
PRESS ANY KEY
© 2006 TEXAS INSTRUMENTS
    
```

```

MAIN MENU
1: POLY ROOT FINDER
2: SIMULT EQN SOLVER
3: ABOUT
4: POLY HELP
5: SIMULT HELP
6: QUIT POLYSMLT
    
```

```

POLY ROOT FINDER MODE
ORDER 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10
REAL a+bi r<θ>
DEC FRAC
NORMAL SCI ENG
FLOAT 0 1 2 3 4 5 6 7 8 9
RADIAN DEGREE
[MAIN] [HELP/NEXT]
    
```

```

a2x^2+a1x+a0=0
a2=1
a1=1.7782794E-5
a0=-3.556559E-6
[MAIN][MODE][CLR][LOAD][SOLVE]
    
```

```

a2x^2+a1x+a0=0
x1=-.0018947965
x2=.0018770137
[MAIN][MODE][COEFF][STD][F4][D]
    
```

De gezochte concentratie is bijgevolg $x = 0.00188 \text{ mol/L}$ en $\text{pH} = -\log x = 2.73$

Opmerkingen:

- Na invoeren van de coëfficiënt $a_1=10^{-4.75}$ verschijnt $a_1=1.778E-5$, met $1.778E-5 = 1.778 \cdot 10^{-5}$, men kan b.v. $4 \cdot 10^{-7}$ ook invoeren als $4 [2nd] [EE] -7$
- De vergelijking oplossen gebeurt met het menu SOLVE van de applicatie, dit menu kan men activeren door het drukken van de corresponderende onderliggende grijze toets [graph] van de TI-84.
- Om de applicatie af te sluiten ga je naar het MAIN menu door het indrukken van de corresponderende grijze toets [Y=] en vervolgens 6:QuitPolySmlt

Een andere werkwijze om een vergelijking op te lossen is met de vergelijkingenoplosser: druk de toets [MATH], selecteer SOLVER en druk [ENTER]. Voer de vergelijking in en druk [ENTER]. Neem bijvoorbeeld 0,1 in als startwaarde voor X.

Druk vervolgens [ALPHA] [Solve], hiermee wordt de vergelijking numeriek opgelost door een oplossing te zoeken in de buurt van de startwaarde:

```

[MATH] NUM CPX PRB
6:fMin(
7:fMax(
8:nDeriv(
9:fnInt(
0:summation Σ(
A:logBASE(
[Solve] Solver...
    
```

```

EQUATION SOLVER
eqn:0=X^2+10^-4.7
5*X-0.2*10^-4.75
    
```

```

X^2+10^-4.75*X...=0
X=0.1
bound=(-1e99,1...
    
```

```

X^2+10^-4.75*X...=0
X=.00187701365...
bound=(-1e99,1...
left-rt=0
    
```

We vinden opnieuw $x = 0.00188$. Experimenteer met andere startwaarden.

Oefening:

Bereken de pH van een oplossing van mierenzuur (HCOOH) met een concentratie van 0.0125 mol/L.

Antwoord:

de vergelijking is $x^2 + K_a \cdot x - c \cdot K_a = 0$, met $x = [\text{H}_3\text{O}^+]$, $\text{pH} = -\log x$, $K_a = 10^{-3,8}$ en $c = 0,0125$.

1.3.2 De ideale gaswet

Bepaal V met de vergelijkingenoplosser uit $p \cdot V = n \cdot R \cdot T$ als

$R = 8,314 \text{ JK}^{-1} \text{ mol}^{-1}$, $T = 25 + 273 = 298 \text{ K}$, $p = 1023 \text{ mbar} = 1023 \text{ hPa} = 102300 \text{ Pa}$
 $n = 0,1858 \text{ mol}$ (zie ook vorige paragraaf).

Oplossing:

Vul de gegevens in en kies een positieve startwaarde voor V , bijvoorbeeld $V=10$.

Los de vergelijking op met [ALPHA] [Solve], terwijl de cursor naast de te zoeken variabele V staat.

```
EQUATION SOLVER
eqn: 0=P*V-N*R*T
```

```
P*V-N*R*T=0
P=102300
V=10
N=.1858
R=8.314
T=298
bound=(-1e99,1...
```

```
P*V-N*R*T=0
P=102300
V=.00449983262...
N=.1858
R=8.314
T=298
bound=(-1e99,1...
left-rt=0
```

We vinden $V = 4,50 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3 = 4,50 \text{ L}$

1.4 Grafiek van geleidbaarheidsmetingen

Beschrijving van het experiment:

Materiaal: oplossing van AlCl_3 , oplossing van NaCl , oplossing van CaCl_2

De drie oplossingen hebben dezelfde concentratie.

Aan een hoeveelheid gedeseioniseerd water worden druppels van één oplossing toegevoegd.

Nadat een druppel is toegevoegd wordt de geleidbaarheid van de oplossing gemeten.

Het resultaat van de metingen staat in de volgende tabel.

aantal druppels AlCl_3	geleidbaarheid ($\mu\text{S/cm}$)	aantal druppels NaCl	geleidbaarheid ($\mu\text{S/cm}$)	aantal druppels CaCl_2	geleidbaarheid ($\mu\text{S/cm}$)
0	26,60559745	0	26,68835203	0	25,9849381
1	203,8245304	1	86,35440417	1	150,4892036
2	375,7471702	2	152,6822	2	268,4558573
3	586,3989535	3	221,9064061	3	374,2162105

Opgave: maak een grafiek van de drie metingen in één venster.

Werkwijze:

Met [STAT] 5:SetUpEditor L1, ALCL3, NAEL, CACL2 [ENTER] en vervolgens [STAT] 1:EDIT kan men de vier lijsten invullen en de plots definiëren:

L1	ALCL3	NAEL	3
0	26.606	26.688	
1	203.83	86.354	
2	375.75	152.68	
3	586.4	221.91	
----	----	----	

ALCL3	NAEL	CACL2	4
26.606	26.688	25.98	
203.83	86.354	150.49	
375.75	152.68	268.46	
586.4	221.91	374.22	
----	----	----	

Plot2 Plot3
 Off
 Type:
 Xlist:L1
 Ylist:ALCL3
 Mark: + .

Plot1 Plot2 Plot3
 Off
 Type:
 Xlist:L1
 Ylist:NAEL
 Mark: + .

Plot1 Plot2 Plot3
 Off
 Type:
 Xlist:L1
 Ylist:CACL2
 Mark: +

STAT PLOTS
 Plot1...On
 Plot2...On
 Plot3...On
 PlotsOff

MEMORY
 3:Zoom Out
 4:ZDecimal
 5:ZSquare
 6:ZStandard
 7:ZTrig
 8:ZInteger
 9:ZoomStat

P1:L1:ALCL3
 X=2 Y=375.75

1.5 Potentiometrische titratie van een sterk zuur met een sterke base

Bij titratie van een zuur met een base is de pH een functie van het toegevoegd volume base :

$$\text{pH} = f(\text{toegevoegd volume base}) \text{ of } y = f(x)$$

De grafiek van deze functie (zie verder) vertoont een buigpunt, dit is een punt waarbij de kromme overgaat van bol naar hol (of omgekeerd). Dit buigpunt is het *equivalentiepunt*.

In een buigpunt verandert de tweede afgeleide van teken. We kennen het functievoorschrift echter niet, aangezien de functie experimenteel in tabelvorm wordt opgemeten. Daarom bepalen we een discrete benadering van de eerste en de tweede afgeleide, uitgaande van de gegeven data.

Voor twee opeenvolgende meetpunten (x_i, y_i) en (x_{i+1}, y_{i+1}) stellen we :

$$f' \left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2} \right) \approx \frac{\Delta y_i}{\Delta x_i} = \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i}$$

Meetkundig betekent dit dat we de helling van de raaklijn aan de kromme halverwege het interval $[x_i, x_{i+1}]$ benaderen door de helling van de koorde die de punten (x_i, y_i) en

(x_{i+1}, y_{i+1}) verbindt. We gaan analoog tewerk voor het benaderen van de tweede afgeleide.

In de praktijk is het nuttig om de eerste afgeleide voortdurend op te volgen, van zodra deze immers in de buurt van 0,15 komt betekent dit dat de grafiek steiler wordt en men steeds minder base dient toe te voegen om het equivalentiepunt goed te kunnen bepalen.

Dit proces kan worden verwerkt in een excelbestand (zie www.t3vlaanderen.be → cahiers)

x_i toegevoegd volume NaOH in mL	y_i pH	$x_i^* = \frac{x_i + x_{i+1}}{2}$	$f'(x_i^*)$	$x_i^{**} = \frac{x_i^* + x_{i+1}^*}{2}$	$f''(x_i^{**})$
0,00	1,50				
		2,55	0,02353		
5,10	1,62			5,06	0,00176
		7,57	0,03239		
10,04	1,78			10,083	0,00212
		12,595	0,04305		
15,15	2,00			15,035	0,0044
		17,475	0,06452		
19,80	2,30			18,943	0,00874
		20,41	0,09016		
21,02	2,41			20,955	0,05107
		21,50	0,14583		
21,98	2,55			22,01	0,02042
		22,52	0,16667		
23,06	2,73			23,03	0,15319
		23,54	0,32292		
24,02	3,04			23,90	0,4485
		24,26	0,64583		
24,50	3,35			24,45	3,3756
		24,64	1,9286		
24,78	3,89			24,74	4,1071
		24,84	2,75		
24,90	4,22			24,895	78,636
		24,95	11,4		
25,00	5,36			25,00	350
		25,05	46,4		
25,10	10,00			25,095	-478,1
		25,14	3,375		
25,18	10,27			25,19	-17,92
		25,24	1,5833		
25,30	10,46			25,47	-2,246
		25,70	0,55		
26,10	10,90			26,355	-0,1682
		27,01	0,32967		
27,92	11,50			27,985	-0,1198
		28,96	0,09615		
30,00	11,70				

Met de TI-84 Plus:

de opeenvolgende kolommen komen in de lijsten L1, L2, ..., L6.

Eerst vullen we de lijsten L1 en L2 voorlopig in met getallen 100,101, 102, ...,150:

$L1 = \text{seq}(100+X, X, 0, 50)$ en $L2 = L1$. Dit doen we om foutmeldingen te vermijden (de lijsten moeten op elk ogenblik evenveel getallen bevatten).

Bereken vervolgens de eerste afgeleide in $L4 = \frac{\Delta \text{List}(L2)}{\Delta \text{List}(L1)}$. Door de aanhalingstekens wordt de definitie “verankerd” en werkt de TI-84 als een spreadsheet.

Laat nu enkel de lijsten L1, L2 en L4 verschijnen in de lijsteneditor.

Overschrijf de getallen in lijst L1 met de data x_i , in lijst L2 komen de data y_i .

Merk op hoe de afgeleiden in lijst L4 stapsgewijs worden aangepast.

```

SetUpEditor L1,L
2,L4
Done

```

L1	L2	L4	# 3
100	100	1	
101	101	1	
102	102	1	
103	103	1	
104	104	1	
105	105	1	
106	106	1	

L4 = "ΔList(L2)/ΔL

L1	L2	L4	# 3
0	1.5	.02353	
5.1	1.62	.03239	
10.04	1.78	.04305	
15.15	2	.06452	
19.8	2.3	.08016	
21.02	2.41	.11378	
21.98	2.55	.16667	

L4(6) = .145833333...

L1	L2	L4	# 3
24.9	4.22	11.4	
25	5.36	46.4	
25.1	10	3.375	
25.18	10.27	1.5833	
25.3	10.46	.55	
26.1	10.9	.32867	
27.92	11.5	.09615	

L4(13) = 46.4

Het buigpunt is tevens het punt waar de afgeleide een extreme waarde bereikt: we lezen af dat $f'(24,95) = 11,4$, $f'(25,05) = 46,4$, $f'(25,14) = 3,375$

Het equivalentiepunt ligt dus alvast tussen 24,95 mL en 25,14 mL toegevoegd volume NaOH.

Maak ter controle een grafiek van de data (x_i, y_i) in een aangepast venster :

```

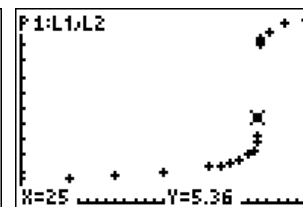
Plot2 Plot3
Off Off
Type: [ ] [ ] [ ]
Xlist:L1
Ylist:L2
Mark: [ ] [ ]

```

```

WINDOW
Xmin=0
Xmax=30
Xscl=1
Ymin=0
Ymax=12
Yscl=1
Xres=1

```



Laat nu enkel de lijsten L3, L5 en L6 verschijnen in de lijsteneditor.

Stel L 3 = $\text{seq}((L1(X)+L1(X+1))/2, X, 1, \text{dim}(L1)-1)$

Stel L 5 = $\text{seq}((L3(X)+L3(X+1))/2, X, 1, \text{dim}(L3)-1)$

Stel L 6 = $\Delta\text{List}(L4) / \Delta\text{List}(L3)$

```

SetUpEditor L3,L
5,L6
Done

```

L3	L5	L6	3
23.54	23.9	4485	
24.26	24.45	3.3756	
24.64	24.74	4.1071	
24.84	24.895	78.636	
24.95	25	350	
25.05	25.095	-478.1	
25.14	25.19	-17.92	

L6(13) = -478.05555...

Ga na waar de tweede afgeleide van teken verandert:

$$f''(25) \approx 350 \text{ en } f''(25,095) \approx -478,1$$

We benaderen de grafiek van de tweede afgeleide tussen de punten (25; 350) en (25,095 ; -478,1) door een lijnstuk (lineaire interpolatie), het nulpunt levert de x -coördinaat van het equivalentiepunt.

Aangezien Δy evenredig is met Δx kunnen we het nulpunt bepalen met de regel van drie:

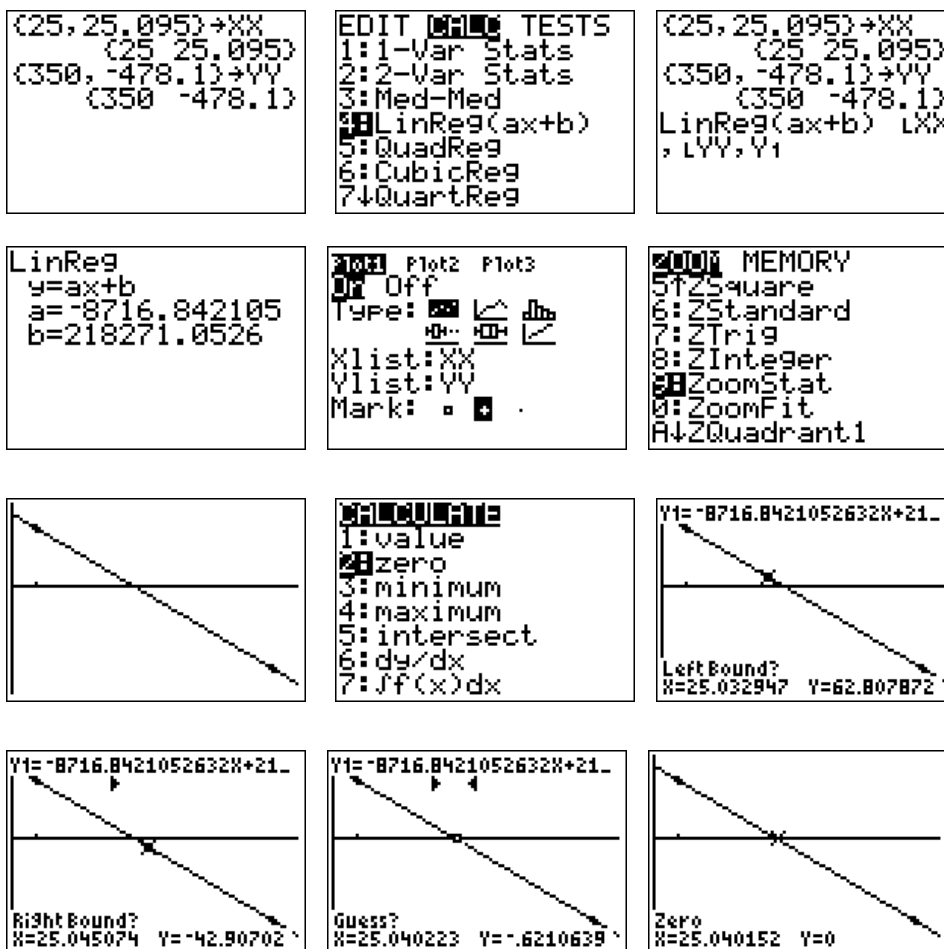
Voor $\Delta y = -478,1 - 350 = -828,1$ is $\Delta x = 25,095 - 25 = 0,095$

Voor $\Delta y = 1$ is $\Delta x = -\frac{0,095}{828,1}$

Voor $\Delta y = 0 - 350 = -350$ is $\Delta x = -\frac{0,095}{828,1} \cdot (-350) = 0,04015$

We besluiten dat het toegevoegd volume NaOH bij het equivalentiepunt gelijk is aan $25 + 0,040 = 25,040$ mL.

Dit resultaat kan ook worden verkregen door lineaire regressie en nulpuntsbepaling:



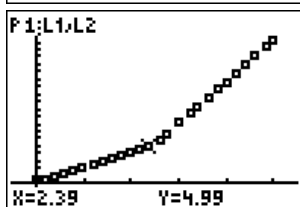
1.6 Conductometrische titratie van azijnzuur met natriumhydroxide

Gegeven de volgende tabel van meetwaarden:

Geleidbaarheid in mS/cm	toegevoegd volume NaOH in mL
0	0,453
0,188	0,484
0,386	0,919
0,594	1,349
0,8	1,805
0,998	2,23
1,198	2,65
1,4	3,08
1,606	3,5
1,8	3,89
1,99	4,19
2,196	4,59
2,39	4,99
2,596	5,7
2,778	6,64
3,002	8,18
3,23	9,37
3,388	10,25
3,618	11,65
3,816	12,78
4	13,64
4,204	14,77
4,4	15,89
4,598	17,03
4,848	18,44
4,992	19,28

L1	L2	L3	Z
4	13.64		
4.204	14.77		
4.4	15.89		
4.598	17.03		
4.848	18.44		
4.992	19.28		

L2(26)=19.28			



Plot2	Plot3
Off	
Type: [] [] []	
Xlist: L1	
Ylist: L2	
Mark: [] + .	

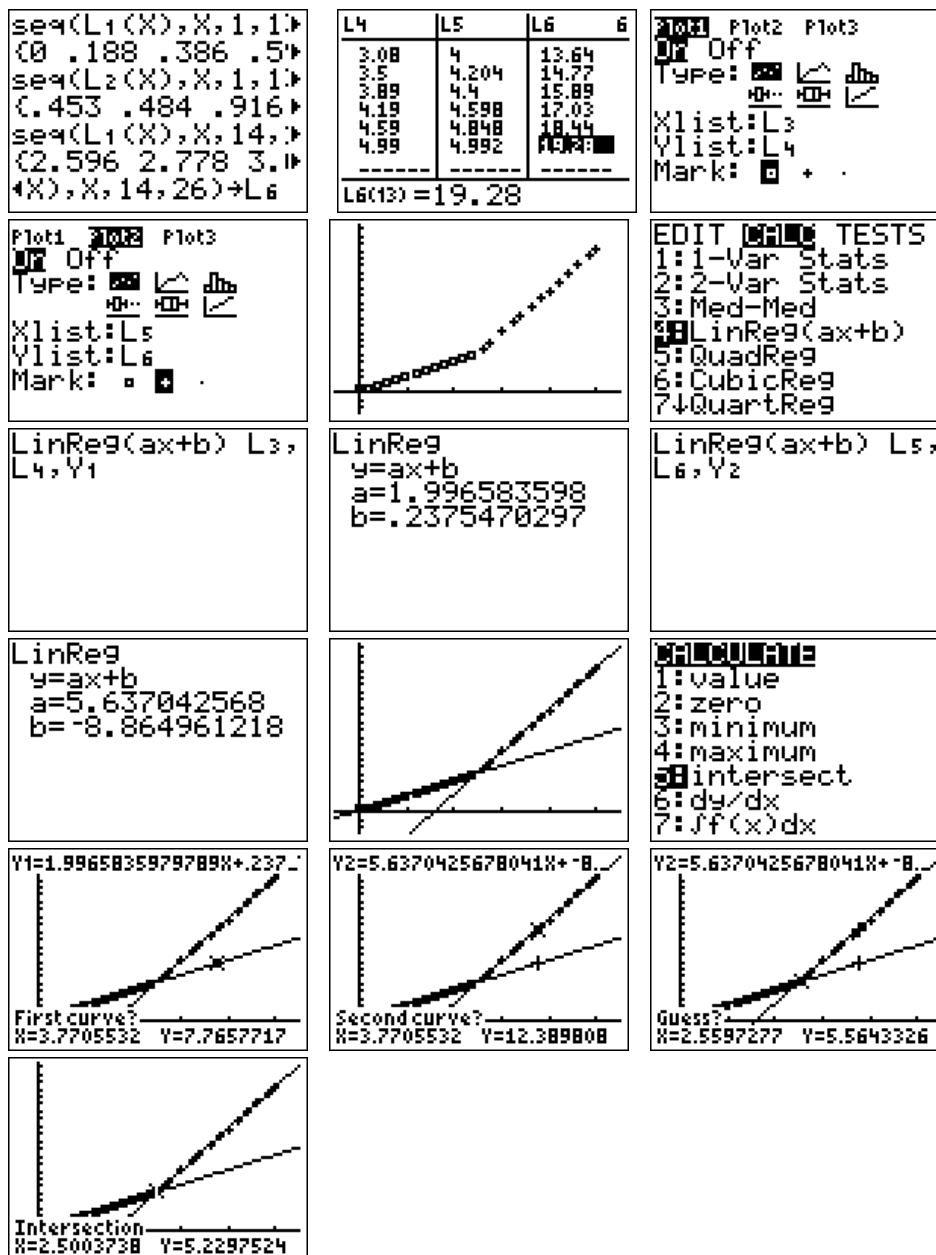
MEMORY
3:Zoom Out
4:ZDecimal
5:ZSquare
6:ZStandard
7:ZTrig
8:ZInteger
9:ZoomStat

Uit de grafiek blijkt dat het punt (2,39 ; 4,99) het eindpunt is van de eerste lineaire deel, dit is het 13^{de} punt uit de reeks van 26 punten.

Stel dus $L3 = \text{seq}(L1(X), X, 1, 13)$ en $L4 = \text{seq}(L2(X), X, 1, 13)$

$L5 = \text{seq}(L1(X), X, 14, 26)$ en $L6 = \text{seq}(L2(X), X, 14, 26)$

Maak vervolgens de grafieken, vind de vergelijkingen van beide rechten met lineaire regressie en bepaal het equivalentiepunt als snijpunt van de rechten:



Bij het equivalentiepunt werd dus 2,5004 mL volume NaOH toegevoegd.

1.7 Aanbevolen websites

Bezoek eens de volgende sites:

<http://dwb.unl.edu/calculators/chem-math.html>

<http://www.uhasselt.be/uhasselt@school/lesmateriaal/chemie/archief.asp>

2 Experimenten met sensoren gekoppeld aan TI-84 Plus

2.1 Onderzoek van de invloed van concentratie van oplossingen op geleidbaarheid

2.1.1 Leerlingennota's

Oriënteren

Onderzoeksvragen

Hoe kunnen we het effect van de concentratie van oplossingen op de geleidbaarheid experimenteel onderzoeken?

Voorbereiden

Achtergrondinformatie

Ionverbindingen dissociëren in ionen in water. De oplossing zal hierdoor de elektrische stroom geleiden.

Bijvoorbeeld de dissociatiereactie van NaCl: $\text{NaCl} \xrightarrow{\text{H}_2\text{O}} \text{Na}^+ + \text{Cl}^-$

Tijdens dit practicum zullen we de concentratie van de oplossing geleidelijk aan verhogen door toevoegen van druppels van NaCl-oplossing. We herhalen de werkwijze om het effect na te gaan van andere oplossingen met dezelfde concentratie maar met een verschillend aantal ionen: AlCl_3 en CaCl_2 . De geleidbaarheid van de oplossingen wordt gemeten met een geleidbaarheidssensor.

Benodigd materiaal

Klem, statief, bekersglas van 100 ml, bekersglas van 250 ml, roerstaaf, geleidbaarheidssensor, EasyLink, TI-84 + SE rekenmachines.

Benodigde stoffen

NaCl-oplossing (1,0 mol/l), AlCl_3 -oplossing (1,0 mol/l), CaCl_2 -oplossing (1,0 mol/l) gedestilleerd water.

Opstelling



Figuur 1 Opstelling

Uitvoeren

1. Doe 70 ml gedestilleerd water in een bekeerglas van 100 ml. Houd een druppelflesje met NaCl oplossing in de buurt.
2. Controleer de stand van de keuzeknop op de versterkingsbox.
Kies de stand 0-2000 μ S.
 - Verbind de geleidbaarheidssensor met de Easy Link interface.
 - Verbind de TI-84 plus met de Easy Link.
3. Normaal start de rekenmachine en het Easy Data programma automatisch op. Na een paar seconden verschijnt het Easy Data hoofdscherm. Op het scherm kunnen we de huidige data collection mode en sensor reading aflezen.
4. Instellen van de data-collection mode
 - Kies **setup**
 - Kies **3: Events With Entry**
5. Vooraleer je druppels oplossing toevoegt, kies je **Start** om gegevens te verzamelen. Breng de oplossing naar de geleidbaarheidssensor tot de opening aan het einde van de sensor volledig is ondergedompeld in de oplossing.
Kies **Keep**. Je wordt nu gevraagd om de x-waarde (= volume toegevoegd) in te vullen. Typ "0", het volume toegevoegd NaCl. Druk **OK**. Je hebt nu de eerste gegevens bewaard van dit experiment. Zet het bekeerglas op de werktafel zodat de sensor uit de oplossing komt.
6. Je bent nu klaar om de NaCl oplossing toe te voegen.
 - a) Voeg 1 druppel NaCl oplossing toe aan het gedestilleerd water. Roer goed om het mengen te bevorderen.
 - b) Breng de oplossing terug naar de sensor.
 - c) Schud even voorzichtig met de beker. Volg de geleidbaarheid van de oplossing gedurende 5 seconden.
 - d) Kies **Keep** en typ "1". "1" is het aantal druppels NaCl toegevoegd. De geleidbaarheid en het toegevoegd volume van de tweede meting zijn nu bewaard.
 - e) Zet de beker terug op de werktafel, zodat de sensor uit de oplossing is.
7. Herhaal stap 6 en typ "2" voor deze meting.
8. Herhaal de meting voor elke druppel toegevoegd NaCl oplossing tot je 6 druppels hebt toegevoegd.
Opmerking: Je gaat dit experiment ook nog herhalen voor de andere oplossingen (AlCl_3 en CaCl_2). Zorg ervoor dat je in elk experiment het aantal metingen (0-6 druppels) steeds hetzelfde houdt.
9. Druk **Stop** als je klaar bent met het verzamelen van de gegevens
Je krijgt nu een grafiek te zien. Door toevoeging van druppels NaCl oplossing zal de concentratie van NaCl in de oplossing toenemen. De curve geeft daarom ook de relatie weer tussen geleidbaarheid en concentratie.
Bepaal de richtingscoëfficiënt van de curve.

- Druk op **Anylz**
- Kies **2: Linear Fit**
- Noteer de rico (=a) in de tabel bij **Reflecteren**.

Kies **Main** om terug te keren naar het Easy Data hoofdscherm.

10. Bewaar de gegevens van het eerste experiment om later te gebruiken

Hoe doe je dit?

- a) Kies **File** van het hoofdmenu
- b) Kies **5: Store Run**
- c) Kies **OK** om op te slaan

11. Herhaal stap 4 t.e.m. 10 maar gebruik nu 1,0 mol/l AlCl_3 oplossing
(reinig eerste de sensor met gedestilleerd water en papier, giet de inhoud van het bekeerglas in het correcte afvalvat en vul het na het reinigen opnieuw met 70 ml gedestilleerd water)
(Vergeet niet om de rico te bepalen! Zie stap 9)

12. Herhaal stap 4 t.e.m. 9 maar gebruik nu 1,0 mol/l CaCl_2 oplossing

PAS OP!

Stap 10 (gegevens opslaan) nu NIET uitvoeren zoals bij de vorige twee experimenten.

(Vergeet niet de sensor en het bekeerglas te reinigen)

(Vergeet niet de rico te bepalen! Zie stap 9)

13. De curven van de drie experimenten op één grafiek met geleidbaarheid i.f.v. aantal druppels toegevoegd:

- a) kies **Graph** vanuit het Easy Data hoofdmenu
- b) Kies **Adv** en selecteer **7: L2, L3, AND L4 VS L1**
- c) De curven van de drie experimenten zouden moeten verschijnen op dezelfde grafiek

De bovenste curve is van AlCl_3 , de middelste van CaCl_2 en de onderste van NaCl .

KOPPEL NU EERST DE EASY LINK VAN JE REKENMACHINE!!!!

Zo verleng je de levensduur van de batterijen.

Reflecteren

- 1) Schets de drie curven. *Vergeet de assen niet te benoemen en duid bij iedere curve aan over welke stof (NaCl , AlCl_3 of CaCl_2) het gaat.*
- 2) Schrijf de dissociatiereacties van NaCl , AlCl_3 en CaCl_2 in water.
- 3) Wat gebeurt er met de geleidbaarheid als er druppels NaCl oplossing worden toegevoegd? Verklaar!
- 4) Vergelijk de hellingen van de curven:

Oplossing	Richtingscoëfficiënt van de curve
NaCl	
CaCl_2	
AlCl_3	

5) Waarom verschillen de hellingen van de drie curven?

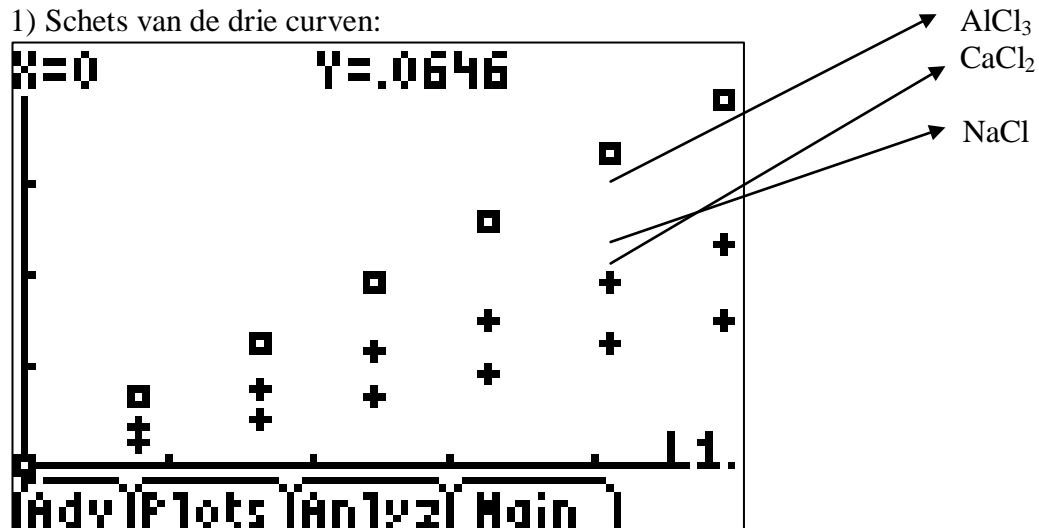
2.1.2 Tips voor de leerkracht en verbeter sleutel

TIPS

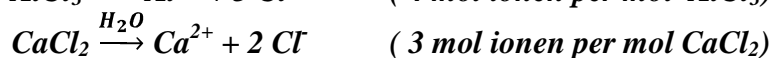
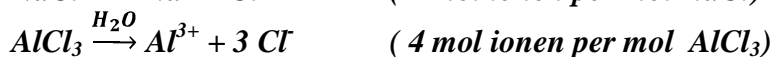
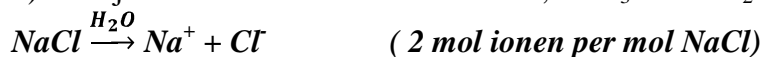
- Dit experiment kan ook als demoproef getoond worden.
- Bereiding van 1,0 mol/l NaCl-oplossing: 5,85 g NaCl per 100 ml oplossing.
- Bereiding van 1,0 mol/l AlCl₃-oplossing: 24,15 g AlCl₃ per 100 ml oplossing.
Opmerking: AlCl₃ is corrosief. R34 S7/8 S28 S45
- Bereiding van 1,0 mol/l CaCl₂-oplossing: 11,1 g CaCl₂ per 100 ml oplossing.
Opmerking: CaCl₂ is irriterend. R36 S22 S24
- Zorg ervoor dat de oplossingen in druppelflesjes aanwezig zijn. Om de beste resultaten te behalen, houden de leerlingen de druppelteller best perfect verticaal bij het druppelen.
- De verhouding van de richtingscoëfficiënten benadert zeer goed de verhouding van het aantal mol ionen dat ontstaat bij dissociatie:
 - Verhouding van rco's: 89,34 tot 133,66 tot 205,49
 - Verhouding van aantal mol ionen: 2 tot 3 tot 4

VERBETER SLEUTEL

1) Schets van de drie curven:



2) Schrijf de dissociatiereacties van NaCl, AlCl₃ en CaCl₂ in water:



3) Wat gebeurt er met de geleidbaarheid als er druppels NaCl oplossing worden toegevoegd? Verklaar!

De geleidbaarheid neemt toe als het aantal druppels (de concentratie) toeneemt.

4) Vergelijk de hellingen van de curven:

Oplossing	Richtingscoëfficiënt van de curve
NaCl	89,34
CaCl ₂	133,66
AlCl ₃	205,49

5) Waarom verschillen de hellingen van de drie curven?

De drie oplossingen hebben bij het begin dezelfde concentratie (1,0 mol/l). Bij de dissociatie van 1 mol AlCl₃ ontstaan er 4 mol ionen. Bij de dissociatie van 1 mol CaCl₂ ontstaan er 3 mol ionen. Bij de dissociatie van 1 mol NaCl ontstaan er 2 mol ionen. Bij de dissociatie van AlCl₃ ontstaan er dus het meeste ionen. Dit verklaart waarom de curve van AlCl₃ de grootste richtingscoëfficiënt heeft.

De verhouding van de richtingscoëfficiënten benadert zeer goed de verhouding van het aantal mol ionen dat ontstaat bij dissociatie:

- *Verhouding van rico's: 89,34 tot 133,66 tot 205,49*
- *Verhouding van aantal mol ionen: 2 tot 3 tot 4*

2.2 Onderzoek van een neutralisatiereactie a.d.h.v. pH- en geleidbaarheidsmetingen

2.2.1 Leerlingennota's

Oriënteren

Probleemstelling

Onderzoek van de neutralisatiereactie tussen NaOH –opl. (0,100 mol/l) en HCl (0,100 mol/l).

Visueel kun je zonder hulpmiddelen deze neutralisatiereactie niet waarnemen.

Onderzoeksvraag

.....

.....

Voorbereiden

Informatie verzamelen

- We onderzoeken de neutralisatiereactie tussen NaOH –opl. (0,100 mol/l) en HCl (0,100 mol/l).

Stoffenreactievergelijking:

Reactievergelijking in ionvorm:

Essentiële reactievergelijking:

- D.m.v. sensoren, gekoppeld aan meetinstrumenten, kan deze reactie wel gevolgd worden. Bv. door een verandering van elektrische geleiding of een pH-verandering. Ook door middel van kleurverandering van een zuur-base indicator (bv. fenolftaleïne) kan een neutralisatiereactie gevolgd worden.

Benodigd materiaal

- bekersglas 400 ml
- 2 klemmen
- statief
- buretklem
- buret
- maatcilinder van 10 ml en 100 ml
- pH-sensor
- geleidbaarheidssensor
- 2 EasyLink
- 2 TI-84 + SE rekenmachines

Benodigde stoffen

- HCl-oplossing (0,1 mol/l)
- NaOH-oplossing (0,1 mol/l)
- gedestilleerd water
- fenolftaleïne

Vorbereidende handelingen

1. Doe (m.b.v. een maatcilinder van 10 ml) zo nauwkeurig mogelijk 10 ml HCl-oplossing (0,1 mol/l) in een bekersglas van 400 ml.
2. Doe vervolgens 150 ml gedestilleerd water bij de HCl-oplossing in het bekersglas van 400 ml.
3. Doe vervolgens ook twee druppels fenolftaleïne in het bekersglas.
4. Verbind de geleidbaarheidssensor via de EasyLink interface met de eerste rekenmachine.
Zorg ervoor dat de keuzeknop op de versterkingsbox op de stand 0-2000 μ S staat.
5. Verbind de pH-sensor via de andere EasyLink interface met de tweede rekenmachine.
6. Bevestig de sensoren m.b.v. de klemmen aan het statief.
7. Vul het buret tot aan de 0 ml ijkstreep met NaOH – oplossing 0,1 mol/l.
8. Bevestig het buret m.b.v. de buretklem aan het statief.
9. Breng de sensoren in de HCl-oplossing in het bekersglas van 400 ml. Zorg ervoor dat de uiteinden van beide sensoren voldoende in de oplossing zitten.
10. Schud even voorzichtig met het bekersglas zodat de oplossing goed gemengd is.

11. Normaal start de rekenmachine en het Easy Data programma automatisch op. Na een paar seconden verschijnt het Easy Data hoofdscherm. Op het scherm kunnen we de huidige data collection mode en sensor reading aflezen.



Figuur 2 Opstelling

12. Kies op iedere rekenmachine **File** en dan **1:New**
13. Stel in iedere rekenmachine de volgende data-collection mode in:
Kies **Setup** Kies **3: Events With Entry**

Uitvoeren

1. Voor dat je NaOH-oplossing toevoegt via het buret (**handelingen steeds op beide rekenmachines uitvoeren**):
 - a) Druk op **Start** om de metingen te starten
 - b) Kies **Keep**.
Je wordt nu gevraagd om de x-waarde (= volume toegevoegd) in te vullen. typ "0", = het volume toegevoegd NaOH-oplossing. Druk **OK**
Je hebt de eerste gegevens bewaard van dit experiment.
Vul ook de onderstaande tabel nauwkeurig aan. Je kunt de pH waarde en geleidbaarheid steeds bovenaan het scherm aflezen.
2. Voeg nu via het buret 2 ml NaOH-oplossing toe.
Schud even voorzichtig met het bekersglas zodat de oplossing goed gemengd is.
3. Schud de oplossing en druk op **Keep**.
Typ "2" (2ml NaOH-oplossing toegevoegd) en druk **OK**
Je hebt de volgende gegevens bewaard.

Voeg verder NaOH-oplossing toe volgens de volgende tabel (waarnemingen).

Schud telkens voorzichtig de oplossing en bewaar telkens bij iedere toevoeging de gegevens (**Keep** drukken en toegevoegde hoeveelheid invullen)

Druk op het einde van het experiment op **Stop**

Nadat je op **Stop** hebt gedrukt, verschijnt op het scherm van de ene rekenmachine de geleidbaarheidscurve en op het scherm van de andere rekenmachine de pH-curve.

Bewaar de gegevens van de experimenten zodat je later kan verder werken.

Druk op **File** en kies **3:Save As . . .** Kies een gepaste naam voor de pH-metingen (bv. PH) en voor de geleidbaarheidsmetingen (bv. G).

Je kunt later op ieder ogenblik dan de gegevens opnieuw oproepen via **File** en **2:Open . . .** en het gewenste bestand selecteren.

Je kunt het programma Easy Data openen via de applicatie (druk **APPS** op het rekentoestel.)

Waarnemingen:

Volume NaOH toegevoegd (ml)	Geleidbaarheid (μS)	Kleur van de indicator	pH-waarde
0			
2			
4			
6			
7			
8			
8,5			
9			
9,5			
10			
10,5			
11			
11,5			
12			
13			
15			
17			

Reflecteren

Verwerking van de gegevens

- **De pH-curve:**

De pH-curve is een grafiek waarop de pH van de oplossing uitgezet wordt in functie van het volume NaOH dat toegevoegd werd.

Welke zijn de x-waarden?

Welke zijn de y-waarden?

Verbind je rekentoestel met een computer via een USB-kabel. Gebruik het programma **TI connect** om een “**screen capture**” te nemen van de grafiek op je scherm.

Print de curve uit en kleef ze hieronder.

- **De geleidbaarheidscurve**

De geleidbaarheidscurve is een grafiek waarop de geleidbaarheid uitgezet wordt in functie van het volume NaOH dat toegevoegd werd.

Welke zijn de x-waarden?

Welke zijn de y-waarden?

Verbind je rekentoestel met een computer via een USB-kabel. Gebruik het programma **TI connect** om een “**screen capture**” te nemen van de grafiek op je scherm. Print de curve uit en kleef ze hieronder.

Bespreking van de resultaten

Beantwoord volgende vragen m.b.v. de pH-curve, geleidbaarheidscurve en de gemeten waarden.

1. pH-curve

Bekijk aandachtig de pH-curve.

Als de hoeveelheid H^+ -ionen (afkomstig van HCl) aanwezig in de erlenmeyer, gelijk is aan de hoeveelheid OH^- -ionen (afkomstig van NaOH) toegevoegd uit de buret, treedt een pH-sprong op.

Bij de pH-sprong geldt $n(OH^-) \dots\dots n(H^+)$ (vul in met =, < of >)

Dit is het eindpunt van de neutralisatiereactie. Dit eindpunt noemen we het equivalentiepunt (EP), vermits equivalente (gelijke) hoeveelheden OH^- - ionen met H^+ - ionen gereageerd hebben.

Hoeveel ml NaOH hebben we toegevoegd tot aan het EP?

Wat is de pH bij het equivalentiepunt?

Verandert de indicator van kleur tijdens de reactie (=voor het EP)?

Wat is de kleur van de indicator **na** het EP?

2. geleidbaarheidscurve

Bekijk nu aandachtig de geleidbaarheidscurve.

Het einde van de reactie (=EP) is merkbaar door een knik in de geleidbaarheidscurve.

Vermits de stroom (~geleiding) in een oplossing gedragen wordt door vrije ionen, is het nuttig na te gaan welke ionen aanwezig zijn in de oplossing tijdens de reactie (= tot aan het EP).

Welke ionen combineren met vorming van ongesplitste H_2O -moleculen tot aan het EP?

Welke ionen blijven vrij in oplossing tot aan het EP?

Wat is het verloop van de geleidbaarheid tot aan het EP? (=vermindert of vermeerderd of blijft gelijk)

Verklaring: Er verdwijnen steeds H^+ - ionen uit de oorspronkelijke oplossing. Deze worden vervangen door eenzelfde aantal Na^+ - ionen. Deze dragen in mindere/meerdere (schrapp wat niet past) mate bij tot de geleiding dan de H^+ - ionen. Daardoor daalt/stijgt (schrapp wat niet past) de geleidbaarheid van de oplossing tot aan het EP.

Wat is het verloop van de geleidbaarheid **na** het EP?
(=vermindert of vermeerderd of blijft gelijk)

We zoeken hiervoor een verklaring.

Eens dezelfde hoeveelheden H^+ en OH^- - ionen met elkaar gereageerd hebben (bij het EP, het einde van de reactie), zal het blijven toevoegen van OH^- - ionen leiden tot een overmaat aan OH^- - ionen. De OH^- - ionen combineren immers na het EP niet meer met H^+ -ionen met vorming van ongesplitste moleculen water vermits er na het EP geen H^+ - ionen meer aanwezig zijn in de oplossing.

Welke ionen zijn dus in de oplossing aanwezig na het EP?

Tracht met deze informatie het verloop van de geleiding na het EP te verklaren.

Algemeen besluit:

Een neutralisatiereactie kan gevolgd worden door middel van een- enmeting. Bovendien kan men de reactie ook volgen door het toevoegen van een De indicator verandert immers van kleur bij het (= einde van de reactie).

2.2.2 Tips voor de leerkracht en verbeter sleutel

TIPS

- Dit experiment kan ook als demoproef worden getoond bij de bespreking van de neutralisatiereactie of zuur-basetitraties.
- Bereiding van 0,1 mol/l NaOH-oplossing: 4,0 g NaOH per liter oplossing.
Opmerking: natriumhydroxideparels zijn corrosief (R35, S2, S36 en S37/39)
NaOH-oplossing is geen oertierstof en kan eventueel (indien gewenst) gesteld worden m.b.v. KMnO₄-oplossing.
- Bereiding van 0,1 mol/l HCl-oplossing: 8,33 ml geconcentreerde HCl (37%) per liter oplossing.
Opmerking: geconcentreerde HCl-oplossing is corrosief (R34, R37,S2 en S26)
- Terwijl de leerlingen de proef uitvoeren, is het aan te raden rond te wandelen en de leerlingen voortdurend vragen te stellen. Bv. Hoe evolueert de pH van de oplossing als je HCl toevoegt? Kun je dit verklaren? Dit zorgt ervoor dat de leerlingen ook nadenken over de “chemie” achter het experiment en niet gewoon een recept volgen.
- Als het scherm van het rekentoestel uitvalt tijdens het experiment, druk dan even op **ENTER** of op **ON**.
- Zorg ervoor dat het bekersglas voldoende groot is en dat de uiteinden van de sensoren in de oplossing zitten. (Eventueel meer gedestilleerd water bijvoegen in het begin van het experiment tot alle uiteinden goed in de oplossing zitten.)
- Het is belangrijk dat de leerlingen na iedere toevoeging van HCl-oplossing de oplossing goed homogeniseren door voorzichtig (in een draaiende beweging) te schudden. Indien er voldoende beschikbaar zijn, kunnen ook magnetische roerplaten met magneet gebruikt worden.

VERBETERSLEUTEL

Oriënteren

Onderzoeksvraag

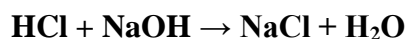
.....Hoe kunnen we experimenteel een neutralisatiereactie volgen?.....

Voorbereiden

Informatie verzamelen

- We onderzoeken de neutralisatiereactie tussen NaOH –opl. (0,100 mol/l) en HCl (0,100 mol/l).

Stoffenreactievergelijking:



Reactievergelijking in ionvorm:



Essentiële reactievergelijking:



Waarnemingen:

Volume NaOH toegevoegd (ml)	Geleidbaarheid (μS)	Kleur van de indicator	pH-waarde
0	2635,5	<i>Kleurloos</i>	2,506
2	2186,2	<i>Kleurloos</i>	2,608
4	1755,2	<i>Kleurloos</i>	2,748
6	1308	<i>Kleurloos</i>	2,967
7	1080,7	<i>Kleurloos</i>	3,142
8	883,4	<i>Kleurloos</i>	3,423
8,5	787,6	<i>Kleurloos</i>	3,68
9	693,8	<i>Kleurloos</i>	4,423
9,5	682	<i>Paars</i>	6,9
10	718,6	<i>Paars</i>	9,8
10,5	763,9	<i>Paars</i>	10,62
11	822	<i>Paars</i>	10,901
11,5	891	<i>Paars</i>	11,105
12	910,4	<i>Paars</i>	11,202
13	1026,8	<i>Paars</i>	11,382
15	1259,5	<i>Paars</i>	11,605
17	1468,5	<i>Paars</i>	11,76

Reflecteren

Verwerking van de gegevens

- *de pH-curve:*

In de pH-curve wordt in een grafiek de pH van de oplossing uitgezet in functie van het volume NaOH dat toegevoegd werd.

Welke zijn de x-waarden?

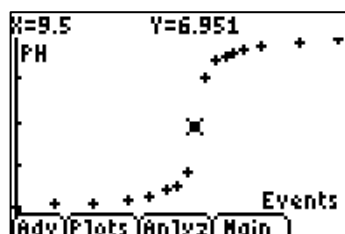
volume NaOH toegevoegd (ml)

Welke zijn de y-waarden?

pH

Verbind je rekentoestel met een computer via een USB-kabel. Gebruik het programma TI connect om een "screen capture" te nemen van de grafiek op je scherm.

Print de curve uit en kleef ze hieronder.



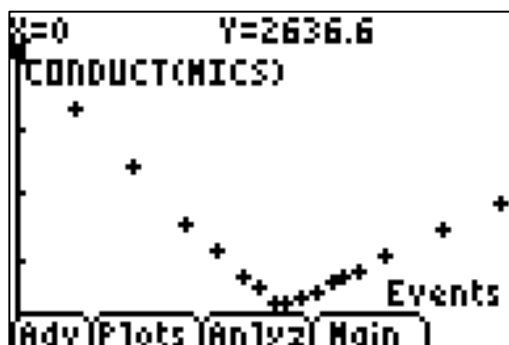
Figuur 3 pH-curve

- *de geleidbaarheidscurve*

In de geleidbaarheidscurve wordt in een grafiek de geleidbaarheid uitgezet in functie van het volume NaOH dat toegevoegd werd.

Welke zijn de x-waarden?
volume NaOH toegevoegd (ml)
Welke zijn de y-waarden?
geleidbaarheid (μS)

Verbind je rekentoestel met een computer via een USB-kabel. Gebruik het programma TI connect om een “screen capture” te nemen van de grafiek op je scherm. Print de curve uit en kleef ze hieronder.



Figuur 4 Geleidbaarheidscurve

Opmerking:

Bij de bespreking van de geleidbaarheidscurve kun je erop wijzen dat de geleidbaarheid bij dit experiment niet volledig “0 μS ” wordt bij het EP. Laat de leerlingen het EP ook aanduiden op de curve.

Bespreking van de resultaten

Beantwoord volgende vragen m.b.v. de pH-curve, geleidbaarheidscurve en de gemeten waarden.

3. *pH-curve*

Bekijk aandachtig de pH-curve.

Als de hoeveelheid H^+ -ionen (afkomstig van HCl) aanwezig in de erlenmeyer, gelijk is aan de hoeveelheid OH^- -ionen (afkomstig van NaOH) toegevoegd uit de buret, treedt een pH-sprong op.

Bij de pH-sprong geldt $n(\text{OH}^-) \dots = \dots n(\text{H}^+)$ (vul in met =, < of >)

Dit is het eindpunt van de neutralisatiereactie. Dit eindpunt noemen we het equivalentiepunt (EP), vermits equivalente (gelijke) hoeveelheden OH^- - ionen met H^+ - ionen gereageerd hebben.

Hoeveel ml NaOH hebben we toegevoegd tot aan het EP?

9,5 ml (theoretisch bij 10 ml)

Wat is de pH bij het equivalentiepunt?

pH = 6,9 (theoretisch pH=7) (neutrale oplossing)

Verandert de indicator van kleur tijdens de reactie (=voor het EP)?

neen

Wat is de kleur van de indicator na het EP? **paars (overmaat base)**

4. geleidbaarheidscurve

Bekijk nu aandachtig de geleidbaarheidscurve.

Het einde van de reactie (=EP) is merkbaar door een knik in de geleidbaarheidscurve. Vermits de stroom (~geleiding) in een oplossing gedragen wordt door vrije ionen, is het nuttig na te gaan welke ionen aanwezig zijn in de oplossing tijdens de reactie (= tot aan het EP).

Welke ionen combineren met vorming van ongesplitste H₂O-moleculen tot aan het EP? **H⁺ en OH⁻ - ionen**

Welke ionen blijven vrij in oplossing tot aan het EP?
H⁺ /Na⁺/ Cl⁻

Wat is het verloop van de geleidbaarheid tot aan het EP? (=vermindert of vermeerderd of blijft gelijk)

De geleidbaarheid vermindert.

Verklaring: Er verdwijnen steeds H⁺ - ionen uit de oorspronkelijke oplossing. Deze worden vervangen door eenzelfde aantal Na⁺ - ionen. Deze dragen in **mindere/meerdere**-(schrapp wat niet past) mate bij tot de geleiding dan de H⁺ - ionen. Daardoor **daalt/stijgt** (schrapp wat niet past) de geleidbaarheid van de oplossing tot aan het EP.

Wat is het verloop van de geleidbaarheid **na** het EP?
(=vermindert of vermeerderd of blijft gelijk)

De geleidbaarheid vermeerderd na het EP.

We zoeken hiervoor een verklaring.

Eens dezelfde hoeveelheden H⁺ en OH⁻ - ionen met elkaar gereageerd hebben (bij het EP, het einde van de reactie), zal het blijven toevoegen van OH⁻ - ionen leiden tot een overmaat aan OH⁻ - ionen. De OH⁻ - ionen combineren immers na het EP niet meer met H⁺-ionen met vorming van ongesplitste moleculen water vermits er na het EP geen H⁺ - ionen meer aanwezig zijn in de oplossing.

Welke ionen zijn dus in de oplossing aanwezig na het EP?

Na⁺/ Cl⁻/OH⁻

Tracht met deze informatie het verloop van de geleiding na het EP te verklaren.

De OH⁻ kunnen na het EP niet meer combineren met H⁺ ionen tot water en dragen bij tot het vermeerderen van de geleidbaarheid van de oplossing na het EP. Hoe meer OH⁻ men blijft toevoegen, hoe beter de geleidbaarheid van de oplossing wordt.

Algemeen besluit:

Een neutralisatiereactie kan gevolgd worden door middel van een ...**pH**.....- en ...**geleidbaarheids**meting. Bovendien kan men de reactie ook volgen door het toevoegen van een ...**indicator**..... De indicator verandert immers van kleur bij het ...**equivalentiepunt**..... (= einde van de reactie).

2.3 Verdamping en intermoleculaire krachtwerking

2.3.1 Leerlingennota's

Oriënteren

Onderzoeksvraag

Hoe kunnen we de invloed van intermoleculaire krachten op fysische eigenschappen van stoffen nagaan en voorspellen?

Voorbereiden

Achtergrondinformatie

In dit experiment wordt een temperatuursensor achtereenvolgens in verschillende vloeistoffen gebracht. Het verdampingsproces treedt op wanneer deze sensor uit de vloeistof wordt gebracht. Dit verdampingsproces is een endotherm proces, wat resulteert in een temperatuursafname. De grootte van de temperatuursafname is, net zoals kooktemperatuur, een maat voor de sterkte van de intermoleculaire krachten.

Benodigd materiaal

- EasyLink
- TI 84 plus
- temperatuursensor
- vier rechthoekige stukjes filtreerpapier
- een kleine rekker
- kleefband

Benodigde stoffen

- ethanol (R11, S2, S7, S16)
- 1-propanol (R11,R41,R67, S2, S7, S16, S24,S26, S39)
- 1-butanol (R10, R22, R37/38, R41, R67, S7/9, S13, S26, S37/39, S46)
- pentaan

Afvalstroom: vat solventen (niet gehalogeneerd)

Opstelling



figuur 1



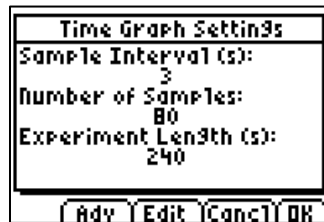
Figuur 2

Voorbereidende handelingen op het rektoestel

1. Draag een veiligheidsbril!!!
2. Verbind de temperatuursensor met de EasyLink interface.
3. Verbind de EasyLink interface met het grafisch rektoestel.

4. Het programma Easy Data start automatisch op.
5. We stellen het programma in:
 - Selecteer **File** en dan **1: New**
 - Selecteer **Setup** en dan **2: Time Graph...**
 - Selecteer **Edit**
 - Typ **3** bij time between samples in seconds en selecteer **Next**
 - Typ **80** bij number of samples en selecteer **Next**.
(er zullen gedurende 4 minuten data verzameld worden)

Het volgende overzichtsscherm verschijnt:



- Selecteer **OK** om naar het hoofdscherm terug te keren.

Uitvoeren

1. Wikkel rond de temperatuursensor een rechthoekig stukje filtreerpapier en maak het vast met een elastiekje. Rol het filtreerpapieretje rond de sensor in de vorm van een cilinder.
2. Steek de sensor nu in een proefbuis die je voor +/- 1/5 gevuld hebt met ethanol. Zorg ervoor dat de proefbuis niet overloopt. (zie figuur 1)
3. Maak twee stukjes kleefband van ongeveer 10 cm klaar. Deze worden gebruikt in stap 9.
4. Als de sensor 30 seconden in de vloeistof zit, selecteer dan **Start** om temperatuursgegevens te beginnen verzamelen. Er verschijnt real time een grafiek (temperatuur in functie van tijd) op het scherm van de rekenmachine. Laat nu gedurende 15 seconden de temperatuursensor in de proefbuis met de vloeistof zitten om de begintemperatuur te kunnen bepalen. Verwijder vervolgens de sensor uit de proefbuis en kleef de sensor aan een tafeluiteinde vast zoals getoond op figuur 2.
5. Het verzamelen van de data stopt automatisch na vier minuten. Op het scherm verkrijg je dan een grafiek waarop de metingen zijn weergegeven (temperatuur i.f.v. tijd). Als je de cursor verschuift over de grafiek, wordt bovenaan het scherm de corresponderende tijd (X) en temperatuur (Y) weergegeven. Bepaal op deze manier de maximumtemperatuur θ_1 en de minimumtemperatuur θ_2 en bepaal $\Delta\theta$ (in tabel noteren!)
6. Verwijder het filtreerpapier en maak de sensor klaar voor een nieuwe meting (= nieuw filtreerpapier rond de sensor wikkelen)
7. Selecteer **Main** om naar het hoofdscherm terug te keren
8. Herhaal stap 6 – 12 maar nu met 1 – propanol.
9. Voorspel nu de $\Delta\theta$ voor 1-butanol en pentaan gebaseerd op de gegevens over ethanol en 1-propanol.
10. Herhaal dan stap 6-12 voor 1-butanol en pentaan.

Verslag

Stof	Brutoformule	structuur	molaire massa (g/mol)	H-bruggen mogelijk? Ja of nee
ethanol	C_2H_5OH	$ \begin{array}{c} H \quad H \\ \quad \\ H-C-C-OH \\ \quad \\ H \quad H \end{array} $		
1- propanol	C_3H_7OH			
1 - butanol	C_4H_9OH			
pentaan	C_5H_{12}			

Data

Stof	θ_1 (°C)	θ_2 (°C)	$\Delta\theta$ (°C)
ethanol			
1- propanol			
1 - butanol			
pentaan			

Voorspelde $\Delta\theta$ (°C)	Verklaring

Reflecteren

Rangschik de stoffen volgens toenemende intermoleculaire krachtwerking en verklaar!

2.3.2 Tips en verbeter sleutel

TIPS

- Het is aan te raden rond het uiteinde van de temperatuursensor een papier te wikkelen. Dit zorgt voor meer representatieve gegevens. Zowel chromatografiepapier als filterpapier komen in aanmerking. Er kunnen verschillende elastiekjes gebruikt worden om het papier op de juiste plaats te houden. Elastiekjes die een orthodontist gebruikt hebben echter de perfecte afmetingen.
- De meeste van de stoffen die gebruikt worden zijn zeer vluchtig. Zorg er dus voor dat het lokaal goed verlucht wordt tijdens het uitvoeren van de proef. Dit experiment niet in de nabijheid van een vlam uitvoeren!

VERBETERSLEUTEL

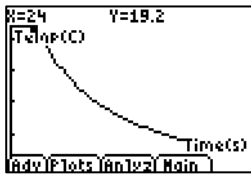
Stof	Brutoformule	structuur	molaire massa (g/mol)	H-bruggen mogelijk? Ja of nee
ethanol	C_2H_5OH	<pre> H H H - C - C - OH H H </pre>	46,1	JA
1- propanol	C_3H_7OH	<pre> H H H H - C - C - C - OH H H H </pre>	60,1	JA
1 - butanol	C_4H_9OH	<pre> H H H H H - C - C - C - C - OH H H H H </pre>	74,1	JA
pentaan	C_5H_{12}	<pre> H H H H H H - C - C - C - C - C - H H H H H H </pre>	72,1	NEE

Data

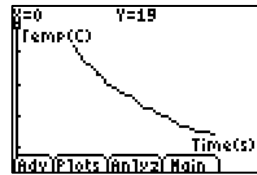
Stof	θ_1 (°C)	θ_2 (°C)	$\Delta\theta$ (°C)
ethanol (grafiek 1)	19,3	11,4	7,9
1- propanol (grafiek 2)	19,0	16,4	2,6
1 - butanol (grafiek 3)	21,0	19,2	1,8
pentaan (grafiek 4)	21,0	-2,1	23,1

Voorspelde $\Delta\theta$ (°C)	Verklaring
< 2,6	Hogere molaire massa (beide H-bruggen)
>7,9	Geen H-bruggen

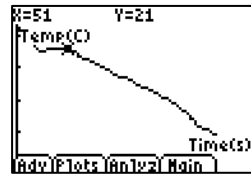
Bij pentaan (zie grafiek 4) neemt de temperatuur plots weer toe. Dit wijst erop dat de stof op dit tijdstip volledig verdampt is.



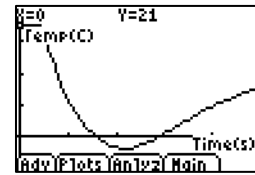
Grafiek 1 Curve ethanol



Grafiek 2 Curve 1-propanol

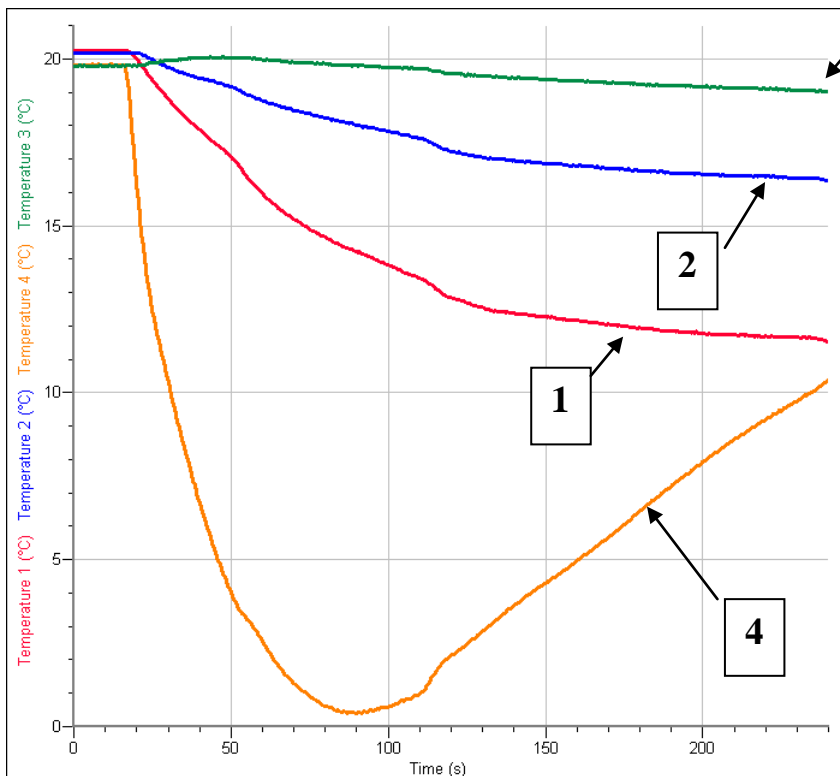


Grafiek 3 Curve 1-butanol



Grafiek 4 Curve pentaan

Hieronder is de grafiek weergegeven die bekomen wordt met een interface (verbonden aan een computer) waar op hetzelfde ogenblik vier temperatuursensoren kunnen worden aangesloten (bv Vernier LabPro interface met Logger Pro software)



Legende:

1= ethanol

2= 1-propanol

3=1-butanol

4=pentaan

Reflecteren

Rangschik de stoffen volgens toenemende intermoleculaire krachtwerking en verklaar!

*Rangschikking volgens toenemende intermoleculaire krachtwerking:
pentaan < ethanol < 1-propanol < 1-butanol*

Hoe meer en hoe groter de intermoleculaire krachten, hoe trager een stof verdampt. (Hoe kleiner het gemeten temperatuursverschil zal zijn). Ethanol, 1-propanol en 1-butanol bezitten naast vanderwaalskrachten en dipoolkrachten ook H-brugkrachten. Hoe groter de molaire massa, hoe sterker de intermoleculaire krachten zijn. Dit verklaart het verschil tussen de alcoholen onderling. Pentaan bezit geen H-brugkrachten en zal dus het snelst verdampen.

2.4 Studie van een buffermengsel a.d.h.v. pH-metingen

2.4.1 Leerlingennota's

Oriënteren

Onderzoeksvraag

Hoe kunnen we experimenteel een buffermengsel identificeren a.d.h.v. digitale pH-metingen?

Voorbereiden

Benodigd materiaal

TI-84 plus SE	pH-sensor
easylink	sputfles
2 bekeerglazen	spatel
statief	klem

Benodigde stoffen

azijnzuur oplossing (CH_3COOH) (0,1M)
natriumacetaat (CH_3COONa)
natriumchloride (NaCl)
waterstofchloride oplossing (HCl) (1M) (in druppelflesje)
natriumhydroxide oplossing (NaOH) (1M) (in druppelflesje)
gedestilleerd water

Voorbereiding rekenmachine en sensors

1. Bevestig de pH sensor aan het statief met behulp van de klem
2. Verbind de sensor met de EasyLink interface.
3. Draai met het plastic flesje waarin de pH-sensor steekt terwijl je de schroefdop vasthoudt.
Het flesje komt los van de pH-sensor. **Giet de inhoud van het flesje niet weg!!!!**
4. Spoel de pH-sensor met gedestilleerd water en droog hem **voorzichtig** af met papier.
5. Verbind de EasyLink met je rekenmachine.
6. Het programma Easy Data start automatisch op
7. Kies **File** en dan **1:New**
8. Kies **Setup** vanuit het main menu en keis **5:Single Point**

Uitvoeren

We gaan in dit practicum van twee oplossingen na of ze buffermengsel zijn:

- A 150 ml 0,1 M azijnzuuroplossing + afgestreken koffielepel Na-acetaat
- B 150 ml gedestilleerd water + afgestreken koffielepel NaCl

Testen van oplossing A

1. Bereid oplossing A in een bekeerglas en giet de helft van de oplossing over in een ander bekeerglas.
2. We onderzoeken nu de pH – verandering van het mengsel bij
 - a) toevoegen van kleine hoeveelheid zuur (HCl)
 - b) toevoegen van kleine hoeveelheid base (NaOH)

We beginnen met toevoegen van kleine hoeveelheid zuur (HCl)

3. Breng de pH sonde in oplossing A (één van de twee bekeerglazen)
4. Druk op **Start**.

De sensor meet nu gedurende 10 seconden de pH van de oplossing.
Lees daarna de gemeten pH waarde af (bovenaan rechts op het scherm).
Noteer de pH meting in de overzichtstabel (zie verder).
Tip: we hebben nog geen enkele druppel zuur toegevoegd
5. Druk **OK** en je komt terug in het main menu van het Easy Data programma.
6. Voeg nu 5 druppels HCl-oplossing toe aan de oplossing A.
7. **Meng** (= schudden) **voldoende!**
8. We gaan opnieuw de pH van de oplossing meten na het toevoegen van de eerste vijf druppels zuur:

Druk op **Start**. Lees na 10 seconden de gemeten pH waarde af.
Noteer opnieuw de meting in de tabel. (nu bij 5 druppels HCl toegevoegd)
Druk op **OK** en je komt terug in het main menu.
9. Herhaal bovenstaande methode na toevoegen van in totaal 10, 15 en 20 druppels.
10. Na het toevoegen van 20 druppels HCl en het meten van de pH, haal je de pH – sensor uit de oplossing en spoel je die met gedestilleerd water. Droog voorzichtig de sensor af!

Nu onderzoeken we de pH verandering bij toevoegen van kleine hoeveelheid base (NaOH) aan oplossing A.

1. Breng de pH sonde in oplossing A (in het **tweede** bekeerglas)
2. Meet m.b.v. de sensor de pH van de oplossing na toevoegen van 0, 5, 10, 15 en 20 druppels NaOH. Vergeet niet te roeren!
Noteer alle metingen ook in de tabel.
3. Wanneer je klaar bent met de metingen, spoel je opnieuw de pH-sensor af met gedestilleerd water.

Testen van oplossing B

1. Bereid oplossing B in een bekeerglas en giet de helft van de oplossing over in een ander bekeerglas.
2. Onderzoek analoog aan bovenstaande procedure de pH veranderingen bij toevoegen van kleine hoeveelheden zuur (HCl) en base (NaOH). Vergeet niet tussen de metingen de pH sensor af te spoelen met gedestilleerd water!

Verwerking van de gegevens

Na alle metingen:

1. Kies **Graph** in het main menu
2. Kies **Plots** en selecteer **1: PH vs Events**
3. Op het scherm verschijnt een grafiek:
pH in functie van meting (= zowel van oplossing A als oplossing B)
Verbind je rekentoestel met een computer via een USB-kabel. Gebruik het programma **TI connect** om een “screen capture” te nemen van de grafiek op je scherm.
Print de curve uit en kleef ze op de volgende pagina.

Je kan de gegevens van het experiment ook bewaren op je rekentoestel zodat je later kan verder werken.

Druk op **File** en kies **3: Save As . . .** Kies een gepaste naam (bv. BUFFER)

Je kunt later op ieder ogenblik dan de gegevens opnieuw oproepen via **File** en **2: Open . . .** en het gewenste bestand selecteren. Je kunt het programma Easy Data openen via de applicatie (drukop **APPS** op het rekentoestel.)

Kleef hier de grafiek:

Duid op de grafiek aan de verschillende metingen aan:

- oplossing A (+ HCl)
- oplossing A (+ NaOH)
- oplossing B (+ HCl)
- oplossing B (+ NaOH)

Meetresultaten

	aantal druppels	0	5	10	15	20
oplossing A	pH met HCl					
	pH met NaOH					
oplossing B	pH met HCl					
	pH met NaOH					

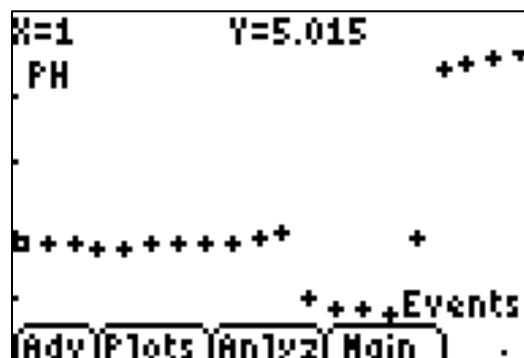
Reflecteren

1. Welke van de beschouwde oplossingen is een buffermengsel? Verklaar!
2. Hoe is die buffer samengesteld?

2.4.2 Tips en verbeter sleutel

VERBETERSLEUTEL

	aantal druppels	0	5	10	15	20
oplossing A	pH met HCl	5,0	4,892	4,85	4,809	4,771
	pH met NaOH	4,902	4,927	4,967	5,011	5,054
oplossing B	pH met HCl	5,276	2,667	2,391	2,24	2,134
	pH met NaOH	5,197	11,884	12,187	12,367	12,487



Grafiek pH i.f.v. events

Reflecteren

- Welke van de beschouwde oplossingen is een buffermengsel? Verklaar!
Oplossing A, de pH van de oplossing blijft nagenoeg constant bij toevoegen van kleine hoeveelheden zuur of base.
- Hoe is die buffer samengesteld? *Een zwak zuur (CH_3COOH)/ geconjugeerde base onder de vorm van zout (CH_3COONa).*

3 Chemische reactiostoichiometrie met behulp van matrixrekenen

3.1 Inleiding

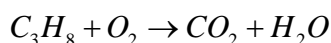
Chemische reacties balanceren is vaak een zware opgave voor heel wat studenten chemie. Het balanceren geeft aanleiding tot het oplossen van een stelsel van lineaire vergelijkingen. Met een voorbeeld laten we zien hoe een stelsel kan worden herleid tot een eenvoudiger stelsel met dezelfde oplossingen, en hoe daarmee de gezochte gehele coëfficiënten worden gevonden. Eerst wordt de essentiële informatie van het stelsel genoteerd in een matrix, deze wordt dan door “elementaire rijoperaties” herleid tot de meest eenvoudige vorm.

Het manuele rekenwerk kan hierbij echter oplopen en leiden tot rekenfouten. Met het grafisch rekentoestel TI-84 Plus wordt de meest eenvoudige matrixvorm van het stelsel echter meteen berekend!

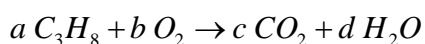
Deze methode werkt voor de meeste reactievergelijkingen zonder verandering van oxidatiegetal, voor redoxreacties en voor het oplossen van halfreacties. Zeker voor complexe redoxreacties, waar het bepalen van de oxidatiegetallen vaak ingewikkeld of onduidelijk is, is deze methode zeer handig. Ook voor reacties in de ionvorm, waar studenten niet alleen problemen hebben met de massabalans, maar nog veel meer met de ladingsbalans, werkt de methode uitstekend.

3.2 De matrixmethode

Beschouw de ongebalanceerde reactievergelijking



Vermenigvuldig elk reagens met een variabele:



De reactievergelijking *balanceren* betekent het bepalen van de eenvoudigste natuurlijke getallen a, b, c, d (d.w.z. zo klein mogelijk) zodat het totaal aantal atomen van elk optredend element aan elke kant van \rightarrow gelijk blijft.

Dit leidt tot de volgende vergelijkingen:

$$\text{voor } C : 3a = c$$

$$\text{voor } H : 8a = 2d$$

$$\text{voor } O : 2b = 2c + d$$

In de wiskunde noemt men dit een *stelsel van lineaire vergelijkingen*, omdat in elke vergelijking elke variabele voorkomt in de eerste graad.

We illustreren nu de werkwijze om zo'n stelsel op te lossen. Schrijf eerst alle variabelen in het linkerlid:

$$\begin{cases} 3a - c = 0 \\ 8a - 2d = 0 \\ 2b - 2c - d = 0 \end{cases}$$

elke vergelijking kan worden beschouwd als een vergelijking in de vier variabelen a, b, c, d ; de ontbrekende variabelen krijgen *coëfficiënt* 0:

$$\begin{cases} 3a - c = 0 \\ 8a - 2d = 0 \\ 2b - 2c - d = 0 \end{cases} \quad \text{of} \quad \begin{cases} 3a + 0b - c + 0d = 0 \\ 8a + 0b + 0c - 2d = 0 \\ 0a + 2b - 2c - d = 0 \end{cases}$$

Noteer hierbij de variabelen steeds in de volgorde a, b, c, d !

De matrix van het stelsel is

$$\begin{array}{cccccc} & a & b & c & d & \text{RL} \\ \begin{bmatrix} 3 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 8 & 0 & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 2 & -2 & -1 & 0 \end{bmatrix} \end{array}$$

In de eerste kolom komen de coëfficiënten van a , in de tweede kolom de coëfficiënten van b ,, de laatste kolom bevat de rechterleden van de vergelijkingen. *Deze matrix legt het corresponderende stelsel ondubbelzinnig vast.*

We illustreren hoe het stelsel kan worden opgelost in een aantal stappen. De basisstrategie is dat we in elke stap overgaan op een stelsel *met dezelfde oplossingen*, tot we uiteindelijk het “meest eenvoudige” stelsel vinden waarmee we de oplossingen rechtstreeks kunnen vinden.

“Elimineer” de eerste variabele a uit de tweede en derde vergelijking (is hier niet meer nodig):

$$\begin{cases} 3a - c = 0 \\ 8a - 2d = 0 \\ 2b - 2c - d = 0 \end{cases} \xrightarrow{\text{vgl}(1)/3} \begin{cases} a - \frac{c}{3} = 0 \\ 8a - 2d = 0 \\ 2b - 2c - d = 0 \end{cases} \xrightarrow{\text{vgl}(2)-8.\text{vgl}(1)} \begin{cases} a - \frac{1}{3}c = 0 \\ \frac{8}{3}c - 2d = 0 \\ 2b - 2c - d = 0 \end{cases}$$

In matrixversie wordt dit:

$$\begin{bmatrix} 3 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 8 & 0 & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 2 & -2 & -1 & 0 \end{bmatrix} \xrightarrow{R_1/3} \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1/3 & 0 & 0 \\ 8 & 0 & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 2 & -2 & -1 & 0 \end{bmatrix} \xrightarrow{R_2-8R_1} \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1/3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 8/3 & -2 & 0 \\ 0 & 2 & -2 & -1 & 0 \end{bmatrix}$$

Merk op dat er nu alvast geen a meer voorkomt in de tweede en derde vergelijking

Verwissel de tweede en derde vergelijking:

$$\begin{cases} a - \frac{1}{3}c = 0 \\ \frac{8}{3}c - 2d = 0 \\ 2b - 2c - d = 0 \end{cases} \rightarrow \begin{cases} a - \frac{1}{3}c = 0 \\ 2b - 2c - d = 0 \\ \frac{8}{3}c - 2d = 0 \end{cases}$$

in matrixvorm:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & -1/3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 8/3 & -2 & 0 \\ 0 & 2 & -2 & -1 & 0 \end{bmatrix} \xrightarrow{R_2 \leftrightarrow R_3} \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1/3 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 8/3 & -2 & 0 \end{bmatrix}$$

De matrix is nu reeds herleid tot een “trapvorm” of “(rij)echelonvorm”:

Eventuele nulrijen (enkel nullen in de rij) staan onderaan
 in elke rij staat het eerste niet nul element (het *leidende element* van de rij) rechts van het eerste niet nul element in de voorgaande rij
 Alle elementen onder een leidend element zijn nul

Het is duidelijk dat het volstaat om enkel met de matrixvorm verder te werken; het corresponderende stelsel is meteen af te lezen van de matrix.

De volgende “*elementaire rijoperaties*” op een matrix zijn toegestaan; de oplossingen van het corresponderende stelsel blijven hierbij ongewijzigd:

- Twee rijen verwisselen
- Een rij vermenigvuldigen met een getal verschillend van nul
- Bij een rij een veelvoud van een andere rij optellen

We herleiden de echelonmatrix nu verder tot de “*gereduceerde (rij)echelonmatrix*” of *reduced row echelon form (rref)*, corresponderend met de “meest eenvoudige” vorm van het stelsel.

Eerst herleiden we het “leidende element” (eerste van nul verschillend element) in de laatste rij tot 1:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & -1/3 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 8/3 & -2 & 0 \end{bmatrix} \xrightarrow{\frac{R_3}{8} \text{ of } \frac{3}{8}R_3} \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1/3 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -\frac{3}{4} & 0 \end{bmatrix}$$

Met die 1 in de onderste rij herleiden we de elementen erboven tot nul:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & -1/3 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -\frac{3}{4} & 0 \end{bmatrix} \xrightarrow{R_2+2R_3} \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1/3 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & -\frac{5}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -\frac{3}{4} & 0 \end{bmatrix} \xrightarrow{R_1+\frac{1}{3}R_3} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -\frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 2 & 0 & -\frac{5}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -\frac{3}{4} & 0 \end{bmatrix}$$

Nu herleiden we het leidende element in de tweede rij tot 1:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -\frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 2 & 0 & -\frac{5}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -\frac{3}{4} & 0 \end{bmatrix} \xrightarrow{\frac{R_2}{2}} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -\frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -\frac{5}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -\frac{3}{4} & 0 \end{bmatrix}$$

Deze laatste matrix is *de* gereduceerde echelonmatrix van het stelsel; men kan immers aantonen dat eender welke reeks van elementaire rijoperaties uitgaande van de matrix van het oorspronkelijke stelsel steeds dezelfde gereduceerde echelonmatrix oplevert!

Algemeen is een gereduceerde echelonmatrix van het volgende type (* staat voor eender welk getal)

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & * & 0 & 0 & 0 & * & * & 0 & * \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & * & * & 0 & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & * & * & 0 & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & * & * & 0 & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Een gereduceerde echelonmatrix is een echelonmatrix die bovendien voldoet aan:

Het eerste niet nul element van elke niet nulrij is 1, d.i. de *leidende 1* van die rij
Elke leidende 1 is het enige niet nul element in zijn kolom.

Uitgaande van $\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -\frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -\frac{5}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -\frac{3}{4} & 0 \end{bmatrix}$ of $\begin{array}{cccc|c} a & b & c & d & \text{RL} \\ \hline 1 & 0 & 0 & -\frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -\frac{5}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -\frac{3}{4} & 0 \end{array}$ lezen we het

corresponderende stelsel af:
$$\begin{cases} a - \frac{1}{4}d = 0 \\ b - \frac{5}{4}d = 0 \\ c - \frac{3}{4}d = 0 \end{cases}$$

De *hoofdvariabelen* a, b, c , die horen bij een leidende 1, schrijven we in functie van de overblijvende *vrije* variabele d :

$$\begin{cases} a - \frac{1}{4}d = 0 \\ b - \frac{5}{4}d = 0 \\ c - \frac{3}{4}d = 0 \end{cases} \rightarrow \begin{cases} a = \frac{1}{4}d \\ b = \frac{5}{4}d \\ c = \frac{3}{4}d \\ d \text{ is vrij} \end{cases}$$

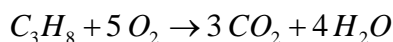
voor de “vrije” variabele d kunnen we eender welke waarde kiezen. Het stelsel heeft (wiskundig) dus oneindig veel oplossingen! Elke keuze van d bepaalt een oplossing van het stelsel.

We zijn echter op zoek naar de **eenvoudigste natuurlijke waarden** voor a, b, c, d .

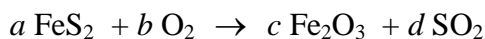
Daarenboven staat a voor een reagens, en is dus positief.

Klaarblijkelijk vinden we die door $d = 4$ te kiezen zodat $a = 1, b = 5, c = 3, d = 4$.

De gezochte gebalanceerde reactievergelijking is dus



Als tweede voorbeeld beschouwen we



$$\begin{array}{cccccc} & a & b & c & d & \text{RL} \\ \text{Fe} & \begin{bmatrix} 1 & 0 & -2 & 0 & 0 \end{bmatrix} & \xrightarrow{R_2 - 2R_1} & \begin{bmatrix} 1 & 0 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & -1 & 0 \end{bmatrix} & \xrightarrow{R_2 \leftrightarrow R_3} & \begin{bmatrix} 1 & 0 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -3 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & -1 & 0 \end{bmatrix} \\ \text{S} & \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & -1 & 0 \end{bmatrix} & & & & \\ \text{O} & \begin{bmatrix} 0 & 2 & -3 & -2 & 0 \end{bmatrix} & & & & \end{array}$$

$$\xrightarrow{\frac{R_3}{4}} \begin{bmatrix} 1 & 0 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -3 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1/4 & 0 \end{bmatrix} \xrightarrow{\frac{R_2 + 3R_3}{R_1 + 2R_3}} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -1/2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & -11/4 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1/4 & 0 \end{bmatrix} \xrightarrow{\frac{R_2}{2}} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -1/2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -11/8 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1/4 & 0 \end{bmatrix}$$

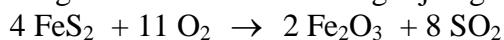
Het gelijkwaardige stelsel wordt dus

$$\begin{cases} a - \frac{1}{2}d = 0 \\ b - \frac{11}{8}d = 0 \\ c - \frac{1}{4}d = 0 \end{cases} \rightarrow \begin{cases} a = \frac{1}{2}d \\ b = \frac{11}{8}d \\ c = \frac{1}{4}d \\ d \text{ is vrij} \end{cases}$$

Voor d kiezen we het kleinste gemeen veelvoud van de optredende noemers 2, 8, 4:

$d = \text{kgv}(2, 8, 4) = 8$ zodat $a = 4, b = 11, c = 2, d = 8$

De gebalanceerde reactievergelijking wordt dus

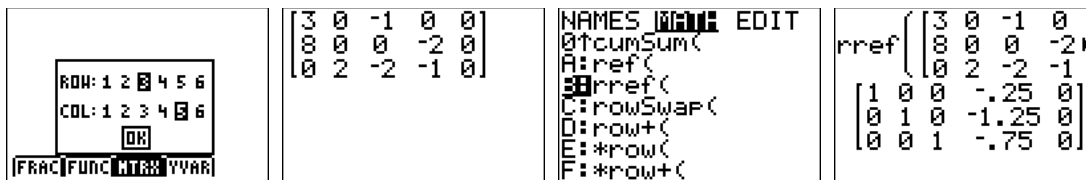


3.3 De gereduceerde echelonvorm van een matrix bepalen met de TI-84 Plus

Gelukkig kunnen we het bovenstaande rekenwerk snel laten uitvoeren door het grafisch rekenoestel TI-84 Plus: eerst moeten we de matrix invoeren en vervolgens vinden we de gereduceerde echelonvorm met de functie **rref** (we tonen hier het eerste voorbeeld):



Met het operating system 2.53MP voor de TI-84 Plus kan men rechtstreeks matrices invoeren zonder ze een naam te geven. Gebruik hiertoe het menu [ALPHA] [F3], met de pijltjestoetsen kan men een eerder ingevoerde matrix selecteren en met [ENTER] naar de invoerlijn brengen.



3.4 Oefeningen

Voorbeeld 1:



We stellen een matrix op met:

rijen: K, Fe, C, N, H, S, en O

kolommen: a, b, c, d, e, f, g en RL

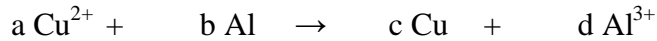
De uitwerking van de matrix geeft als resultaat:

a = 1/6 g	kiezen we g = 6 dan is	a = 1
b = g		b = 6
c = g		c = 6
d = 1/3 g		d = 2
e = 1/6 g		e = 1
f = 1/2 g		f = 3

of de netto-reactie wordt:



Voorbeeld 2:



We dienen bij het opstellen van de matrix ook rekening te houden met het behoud van lading, die we in de matrix weergeven als +/-.

We stellen een matrix op met:

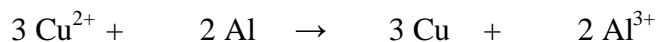
rijen: Cu, Al en +/-

kolommen: a, b, c, d en RL

De uitwerking van de matrix geeft als resultaat:

$$\begin{array}{lll} a = 3/2 d & \text{kiezen we } d = 2 \text{ dan is} & a = 3 \\ b = d & & b = 2 \\ c = 3/2 d & & c = 3 \end{array}$$

of de netto-reactie wordt:



Voorbeeld 3:



We stellen een matrix op met:

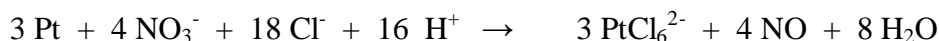
rijen: Pt, N,O, Cl, H en +/-

kolommen: a, b, c, d, e, f, g en RL

De uitwerking van de matrix geeft als resultaat:

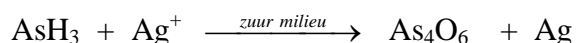
$$\begin{array}{lll} a = 3/8 g & \text{kiezen we } g = 8 \text{ dan is} & a = 3 \\ b = 1/2 g & & b = 4 \\ c = 9/4 g & & c = 18 \\ d = 2 g & & d = 16 \\ e = 3/8 g & & e = 3 \\ f = 1/2 g & & f = 4 \end{array}$$

of de netto-reactie wordt:

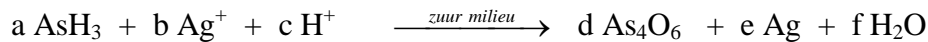


Voorbeeld 4:

De volgende reactie gaat door in zuur milieu:



We passen in zuur milieu de massabalans aan door gebruik te maken van H^+ en H_2O .
De reactie wordt dus:



We stellen een matrix op met:

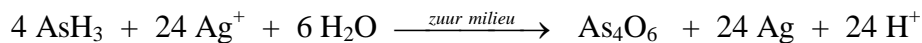
rijen: As, Ag, H, O en +/-

kolommen: a, b, c, d, e, f en RL

De uitwerking van de matrix geeft als resultaat:

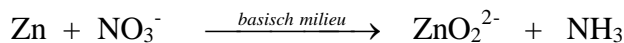
$a = -2/3 f$	kiezen we $f = -6$, zodat	$a = 4$, en dus positief, dan zijn
$b = -4 f$		$b = 24$
$c = 4 f$		$c = -24$
$d = -1/6 f$		$d = 1$
$e = 4 f$		$e = 24$

of de netto-reactie wordt:

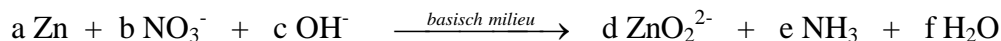


Voorbeeld 5:

De volgende reactie gaat door in basisch milieu:



We passen in basisch milieu de massabalans aan door gebruik te maken van OH^- en H_2O .
De reactie wordt dus:



We stellen een matrix op met:

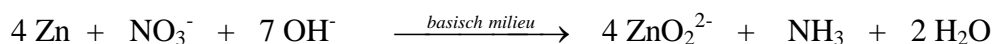
rijen: Zn, N, O, H en +/-

kolommen: a, b, c, d, e, f en RL

De uitwerking van de matrix geeft als resultaat:

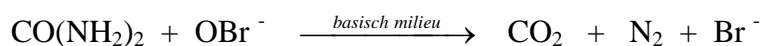
$a = 2 f$	kiezen we $f = 2$ dan is	$a = 4$
$b = 1/2 f$		$b = 1$
$c = 7/2 f$		$c = 7$
$d = 2 f$		$d = 4$
$e = 1/2 f$		$e = 1$

of de netto-reactie wordt:

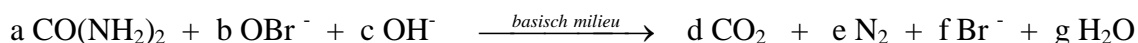


Voorbeeld 6:

De volgende reactie gaat door in basisch milieu:



We passen in basisch milieu de massabalans aan door gebruik te maken van OH^- en H_2O .
De reactie wordt dus:



We stellen een matrix op met:

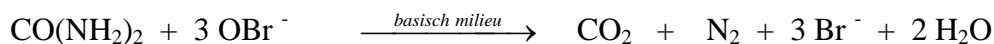
rijen: C, O, N, H, Br en +/-

kolommen: a, b, c, d, e, f, g en RL

De uitwerking van de matrix geeft als resultaat:

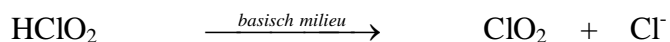
$$\begin{array}{lll} a = 1/2 \text{ g} & \text{kiezen we } g = 2 \text{ dan is} & a = 1 \\ b = 3/2 \text{ g} & & b = 3 \\ c = 0 \text{ g} & & c = 0 \\ d = 1/2 \text{ g} & & d = 1 \\ e = 1/2 \text{ g} & & e = 1 \\ f = 3/2 \text{ g} & & f = 3 \end{array}$$

of de netto-reactie wordt:

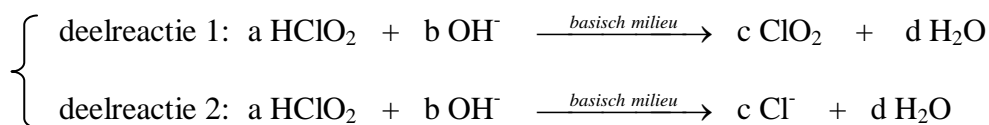


Voorbeeld 7:

De volgende reactie, die doorgaat in basisch milieu, splitsen we op in de deelreacties oxidatie en reductie:



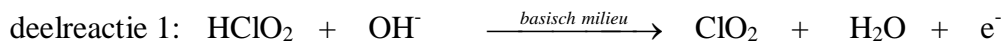
De massabalansen voor de deelreacties in basisch milieu zijn bijvoorbeeld:



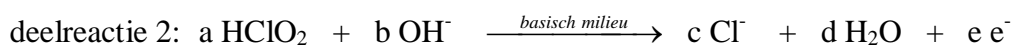
Hierbij is deelreactie 1 vrij gemakkelijk op te lossen als



De ladingsbalans voor deelreactie 1 is dan ook op te stellen als



Voor deelreactie 2 kan getwijfeld worden, dus hier passen we de matrixrekening toe op volgende deelreactie:



We stellen een matrix op met:

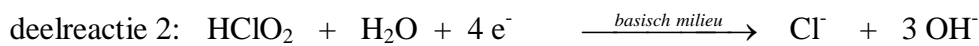
rijen: H, Cl, O en +/-

kolommen: a, b, c, d, e en RL

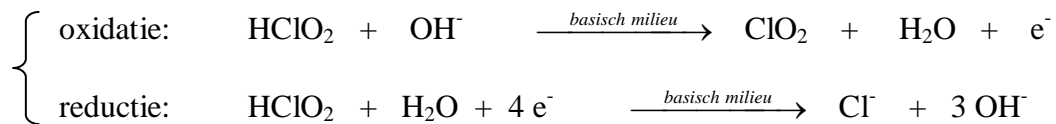
De uitwerking van de matrix geeft als resultaat:

$$\begin{array}{lll}
 a = -1/4 e & \text{kiezen we } e = -4, \text{ zodat} & a = 1, \text{ en dus positief, dan zijn} \\
 b = 3/4 e & & b = -3 \\
 c = -1/4 e & & c = 1 \\
 d = 1/4 e & & d = -1
 \end{array}$$

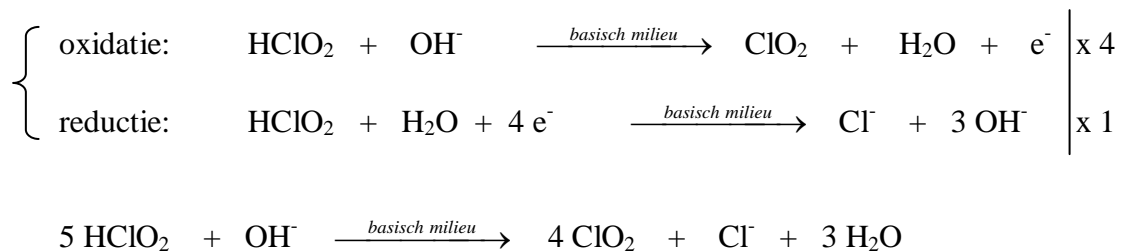
of de tweede halfreactie wordt:



We kunnen dan meteen de deelreacties schrijven als oxidatie en reductie:

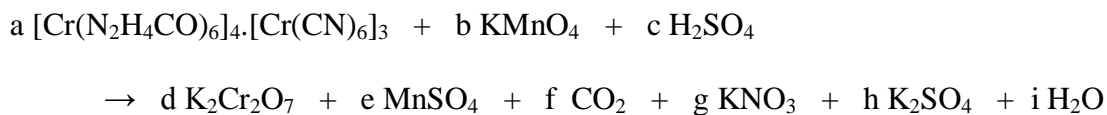


Uitgaande van de deelreacties kunnen we nu ook de netto-reactie opstellen:



Voorbeeld 8:

Voor wie van een echte uitdaging houdt, kan volgende reactie via matrix-rekenen en ook eens op de "klassieke" manier aanpakken.

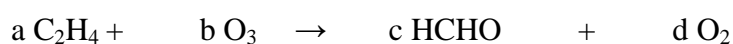


De oplossing is:

$$\begin{array}{lllll}
 a = 10 & b = 1176 & c = 1399 & d = 35 & e = 1176 \\
 f = 420 & g = 660 & h = 223 & i = 1879 &
 \end{array}$$

Voorbeeld 9:

We beschouwen de reactie tussen etheen en ozon:



We stellen een matrix op met:

rijen: C,H en O

kolommen: a, b, c, d en RL

De uitwerking van de matrix geeft als resultaat:

$$a = 1/2 c \quad \text{en} \quad b = 1/3 c + 2/3 d$$

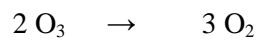
De voorwaarden voor gehele, onderling ondeelbare getallen en een positieve waarde voor a zijn:

- c is een even getal; we kunnen dus stellen: $c = 2x$

- dan is $b = \frac{2x + 2d}{3} = 2 \cdot \frac{x + d}{3}$; dit betekent dat $x + d$ een veelvoud is van 3.

We geven enkele voorbeelden:

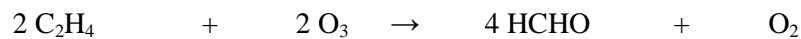
1) als $x = 0$ dan is $c = 0$
a = 0
met $d = 3$ en $b = 2$



2) als $x = 1$ dan is $c = 2$
a = 1
met $d = 2$ en $b = 1$



3) als $x = 2$ dan is $c = 4$
a = 2
met $d = 1$ en $b = 2$



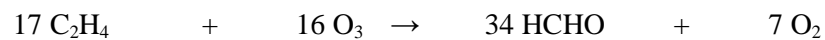
4) als $x = 3$ dan is $c = 6$
a = 3
met $d = 0$ en $b = 2$



5) als $x = 3$ dan is $c = 6$
a = 3
met $d = 3$ en $b = 4$



6) als $x = 17$ dan is $c = 34$
a = 17
met $d = 7$ en $b = 16$



Dit cahier behandelt chemische toepassingen met de TI-84 Plus.

In het eerste hoofdstuk wordt dieper ingegaan op de elementaire en meer ingewikkelde handelingen met de TI-84 plus, zoals het verwerken van meetgegevens en het equivalentiepunt bepalen van een titratie.

In het tweede hoofdstuk wordt aan de hand van concreet uitgewerkte experimenten de mogelijkheid besproken om sensoren te koppelen aan het grafisch rekentoestel. Hierbij wordt gebruik gemaakt van de EasyLink interface.

In het derde hoofdstuk komt chemische reactiostoichiometrie aan bod waarbij stelsels worden opgelost met elementaire rijoperaties op matrices..

OLIVIER DOUVERE is leraar wetenschappen aan het Sint-Jozefhumaniora te Brugge. Hij geeft chemie en fysica in de tweede en derde graad. Hij is lid van de stuurgroep chemie van West-Vlaanderen.

GUIDO HERWEYERS doceert wiskunde en statistiek aan het Departement Industriële Ingenieurswetenschappen en Technologie van de Katholieke Hogeschool Brugge-Oostende en is wetenschappelijk medewerker aan de K.U.Leuven. Hij is lid van de stuurgroep wiskunde van West-Vlaanderen.

LUC SCHERPEREEL is opleidingshoofd chemie en doceert industriële chemie en milieuzorg aan het Departement Industriële Ingenieurswetenschappen en Technologie van de Katholieke Hogeschool Brugge-Oostende. Hij is lid van de stuurgroep chemie van West-Vlaanderen.

Maart 2010