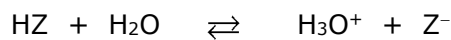


De vergelijking van de evenwichtsreactie van een eenwaardig zuur HZ in waterige oplossing luidt:

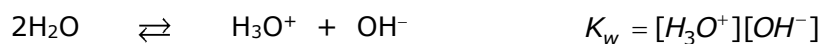


De pH van een oplossing is gedefiniëerd als $pH = -\log[H_3O^+]$, waarbij $[H_3O^+]$ de actuele concentratie is van de in de oplossing aanwezige hydroniumionen.

De $[H_3O^+]$ van een dergelijke oplossing is afhankelijk van de intrinsieke zuursterkte van het zuur, die gegeven wordt door de zuurconstante K_z , de analytische concentratie c_z van het zuur en de (geringe) bijdrage van de H_3O^+ -ionen, die wordt geleverd door de autoprotolyse van water.

De zuurconstante is als volgt gedefiniëerd:
$$K_z = \frac{[H_3O^+][Z^-]}{[HZ]}$$

De autoprotolyse van water wordt bepaald door de volgende evenwichtsreactie en de daarmee corresponderende waterconstante K_w :



Om de hiernavolgende afleiding inzichtelijker te maken worden de volgende symbolen gebruikt:

$$x = [H_3O^+], \quad y = [OH^-], \quad z = [Z^-], \quad h = [HZ]$$

De waarde van x kan dan worden berekend via de volgende vier voorwaarden:

- de stoichiometrische vergelijking van het zuur: $c_z = h + z$
- de elektroneutraliteitsvergelijking: $x = z + y$
- de evenwichtsvoorwaarde van het zuur: $K_z = \frac{x \cdot z}{h}$
- de evenwichtsvoorwaarde van de autoprotolyse: $K_w = x \cdot y$

Uit deze vier vergelijkingen kan x berekend worden door eliminatie van y , z en h :

$$h = c_z - z \quad \text{en} \quad K_z \cdot h = x \cdot z \quad \rightarrow \quad K_z(c_z - z) = x \cdot z$$

$$z = x - y \quad \text{dus} \quad K_z(c_z - x + y) = x(x - y) \quad \text{vermenigvuldigen met } x :$$

$$K_z x(c_z - x + y) = x^2(x - y) \quad \rightarrow \quad K_z x c_z - K_z x^2 + K_z x y = x^3 - x^2 y$$

Substitutie van $x y$ door K_w geeft tenslotte:

$$x^3 + K_z x^2 - (K_z c_z + K_w) x - K_z K_w = 0$$

De laatste vergelijking is een derdegraadsvergelijking, waaruit x kan worden opgelost door middel van de formule van Cardano met behulp van gegeven waarden van de analytische concentratie c_z , de zuurconstante K_z en de waterconstante K_w .

Zodra de waarde van x bekend is, is de pH te berekenen met: $pH = -\log x$