

13.4 Exkurs: Berechnungen zum chemischen Gleichgewicht

In Abschnitt 13.3 wurden die Konzentrationen des Gleichgewichts Ethansäure(l) + Ethanol(l) \rightleftharpoons Ethansäureethylester(l) + Wasser(l) verändert. Wie berechnet man diese Werte, wenn die Gleichgewichtskonstante K bekannt ist?¹



Massenwirkungsgesetz: $K = 4 = \frac{c(\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5) \cdot c(\text{H}_2\text{O})}{c(\text{CH}_3\text{COOH}) \cdot c(\text{C}_2\text{H}_5\text{OH})}$

- a. 1 mol/l Säure reagiert mit 1 mol/l Alkohol (60 g Ethansäure + 46 g Ethanol, auf 1 Liter mit einem inerten Lösemittel auffüllen)

Setzt man die Konzentration des Esters im Gleichgewicht gleich c , dann gilt dies auch für das Wasser, da beide Stoffe im Konzentrationsverhältnis 1:1 entstehen. Im Zähler steht damit ein c^2 .

Bilden sich c mol/l Ester und c mol/l Wasser, dann sind jeweils noch $1 - c$ mol/l Säure und $1 - c$ mol/l Alkohol im Gleichgewicht vorhanden. Im Nenner steht dann der Ausdruck $(1 - c)^2$. Damit ergibt sich für das MWG:

$$4 = \frac{c^2}{(1 - c)^2} = \frac{c^2}{(1 - 2c + c^2)} \text{ aufgelöst nach } c:$$

$$3c^2 - 8c + 4 = 0 \text{ (quadratische Gleichung)}$$

$$c_{1,2} = \frac{8 \pm \sqrt{64 - 48}}{6} = \frac{8 \pm 4}{6}$$

$c_1 = 2$ mol/l (unbrauchbarer Wert, da nur 1 mol/l Säure und 1 mol/l Alkohol miteinander reagieren)

$$c_2 = c(\text{Ethansäureethylester}) = c(\text{Wasser}) = 2/3 \text{ mol/l} = 0.667 \text{ mol/l}$$

$$c(\text{Ethansäure}) = c(\text{Ethanol}) = 0.333 \text{ mol/l}$$

1 Um mit den gewohnten Konzentrationen mol/l rechnen zu können, gibt man die beiden Stoffe in ein Gefäß und ergänzt anschliessend mit einem inerten (reaktionsträgen) Lösemittel auf einen Liter.
2 Hinsichtlich der Schreibweise der Kohlenstoffverbindungen vgl. Abschnitt 8.6.

- b. 1 mol/l Säure reagiert mit 2 mol/l Alkohol (60 g Ethansäure + 92 g Ethanol, auf 1 Liter mit einem inerten Lösemittel auffüllen)

Im Gleichgewicht:

$$c(\text{Ethansäureethylester}) = c(\text{Wasser}) = c; c(\text{Ethansäure}) = (1 - c); \\ c(\text{Ethanol}) = (2 - c)$$

MWG:

$$4 = \frac{c^2}{(1 - c) \cdot (2 - c)} = \frac{c^2}{2 - c - 2c + c^2}$$

$$3c^2 - 12c + 8 = 0 \text{ (quadratische Gleichung)}$$

$$c_{1,2} = \frac{12 \pm \sqrt{144 - 96}}{6} = \frac{12 \pm 6.928}{6}$$

$$c_1 = 3.155 \text{ mol/l (unbrauchbarer Wert); } c_2 = 0.845 \text{ mol/l}$$

$$c_2 = c(\text{Ethansäureethylester}) = c(\text{Wasser}) = 0.845 \text{ mol/l; } c(\text{Ethansäure}) = 0.155 \text{ mol/l; } \\ c(\text{Ethanol}) = 1.155 \text{ mol/l}$$

Tabelle 13.6 Konzentrationen im Gleichgewicht

	Konzentration Ethansäure in mol/l	Konzentration Ethanol in mol/l	Konzentration Ethansäureethylester in mol/l	Konzentration Wasser in mol/l	K
Reaktion 1: 1 mol/l + 1 mol/l	0.333	0.333	0.667	0.667	4
Reaktion 2: 1 mol/l + 2 mol/l	0.155	1.155	0.845	0.845	4