

Estersynthese und Massenwirkungsgesetz mathematisch betrachtet

Eine Ausarbeitung von Ulrich Helmich, April 2016

$$K = \frac{E^2}{(A_0 - E)(B_0 - E)}$$

Massenwirkungsgesetz für die Reaktion $A + B \rightleftharpoons E + F$, zum Beispiel
Essigsäure + Ethanol \rightleftharpoons Essigsäureethylether + Wasser.

- A_0, B_0 = eingesetzte Stoffmengen der Edukte zu Beginn der Reaktion,
- $A_0 - E$ bzw. $B_0 - E$ = Stoffmengen der Edukte im Gleichgewicht,
- E = Stoffmenge des Produkts im Gleichgewicht,
- E^2 = Produkt aus E und F , hier gilt $E = F$, da mit jedem Molekül E auch ein Molekül F entsteht; mit jedem Ester-Molekül bildet sich auch ein Wasser-Molekül.

$$E^2 = K(A_0 B_0 - A_0 E - B_0 E + E^2)$$

Ausmultiplizieren des Nenners und Umstellung der Gleichung, so dass sich E^2 auf der linken Seite befindet.

$$E^2 = K A_0 B_0 - K A_0 E - K B_0 E + K E^2$$

Ausmultiplizieren des Ausdrucks auf der rechten Seite.

$$0 = K A_0 B_0 - K A_0 E - K B_0 E + (K - 1) E^2$$

Subtraktion von E^2 auf beiden Seiten der Gleichung

$$(K - 1) E^2 - K A_0 E - K B_0 E + K A_0 B_0 = 0$$

Einfache Umstellung der Gleichung, damit 0 auf der rechten Seite ist.

$$E^2 - \frac{K(A_0 + B_0)}{K - 1} E + \frac{K}{K - 1} A_0 B_0 = 0$$

Division durch (K - 1), um die quadratische Gleichung auf die Normalform zu bringen.

$$E_{1/2} = -\frac{p}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{p}{2}\right)^2 - q}$$

Allgemeines Lösungsschema für quadratische Gleichungen (x wurde durch E ersetzt).

$$p = -\frac{K(A_0 + B_0)}{K - 1} \quad q = \frac{K}{K - 1} A_0 B_0$$

Die beiden Ausdrücke, die für p und q eingesetzt werden.

$$E_{1/2} = \frac{K(A_0 + B_0)}{2K - 2} \pm \sqrt{\left(\frac{K(A_0 + B_0)}{2K - 2}\right)^2 - \frac{K}{K - 1} A_0 B_0}$$

Daraus ergibt sich diese gewaltige Gleichung.

$$E_{1/2} = \frac{2(A_0 + B_0)}{3} \pm \sqrt{\left(\frac{2(A_0 + B_0)}{3}\right)^2 - \frac{4}{3} A_0 B_0}$$

Jetzt wird für K der gerundete Wert 4 eingesetzt, dadurch wird die komplizierte Gleichung schon besser lesbar.

$$E_{1/2} = \frac{2(2 + 1)}{3} \pm \sqrt{\left(\frac{2(2 + 1)}{3}\right)^2 - \frac{4}{3} 2}$$

Die Gleichung wird noch übersichtlicher, wenn wir die Werte für die Anfangskonzentrationen einsetzen: $A_0 = 2$ mol, $B_0 = 1$ mol.

$$E_{1/2} = 2 \pm \sqrt{4 - \frac{8}{3}}$$

$$E_{1/2} = 2 \pm \sqrt{\frac{4}{3}}$$

Nun sind wir fast fertig. Im Prinzip gibt es zwei Lösungen, aber nur eine davon ist chemisch sinnvoll.

$$E_{1/2} = 2 \pm 1,155 \Rightarrow E_1 = 3,155; E_2 = 0,845$$

Wenn man 2 mol Essigsäure und 1 mol Ethanol zusammengibt, entstehen mit Sicherheit nicht 3,155 mol Essigsäureethylester; also wird das andere Ergebnis das richtige sein, 0,845 mol.

So, ich hoffe jetzt, dass ich keinen Fehler eingebaut habe; aber das Ergebnis stimmt mit meinen Tabellenkalkulations-Versuchen überein.

Anwendung mit einer Tabellenkalkulation

$$E_{1/2} = \frac{K(A_0 + B_0)}{2K - 2} \pm \sqrt{\left(\frac{K(A_0 + B_0)}{2K - 2}\right)^2 - \frac{K}{K - 1} A_0 B_0}$$

Diese komplizierte Gleichung wird nun in eine Tabellenkalkulation übertragen; auf die genauen Formeln will ich hier jetzt nicht eingehen...

	A	B
1		
2	c0(Essigsäure)	4
3	c0(Ethanol)	4
4		
5	p	-10,67
6	q	21,33
7		
8	c(Ether)	2,67
9	c(Essigsäure)	1,33
10	c(Ethanol)	1,33

Hier ein Screenshot der Tabelle (Numbers). Die Anfangskonzentrationen werden in die Felder B2 und B3 eingegeben, alles andere wird berechnet.

Eingesetzte Essigsäure in mol

	0,5	1	2	4
0,5	0,33	0,42	0,46	0,48
1	0,42	0,67	0,85	0,93
2	0,46	0,85	1,33	1,69
4	0,48	0,93	1,69	2,67

Das sind die Ergebnisse für die Ether-Konzentration im Gleichgewicht bei verschiedenen Stoffmengen für die Edukte.