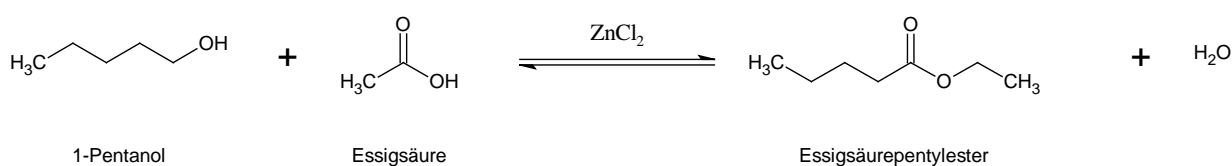


Gruppe 7 – Pflichtversuch

Darstellung von Essigsäurepentylester aus 1-Pentanol und Essigsäure

Reaktion:



Zeitbedarf:

Vorbereitung:	15 min
Versuchsdurchführung:	25 min
Nachbereitung:	10 min

Chemikalien:

Chemikalien	Summenformel	Menge	R-Sätze	S-Sätze	Gefahrensymbole	Schuleinsatz (HessGiss)
1-Pentanol	C ₅ H ₁₁ OH	2 mL	10-20	24/25	Xn	S 1
Essigsäure konz.	CH ₃ COOH	2 mL	10-35	23-26-45	C	S 1
Zinkchlorid (wasserfrei)	ZnCl ₂	2 g	22-34-50/53	26-36/37/39-45-60-61	C, N	S 1

Geräte und Materialien:

- Reaktionskolben (25 mL)
- Glasrohr (Länge etwa 50 – 70 cm)
- Durchbohrter Gummistopfen
- Bunsenbrenner
- Spritze (2 mL) mit Kanüle

Versuchsaufbau:



Abb. 1.: Brenner und Kolben (mit Glasrohr als Rückflusskühler)

Versuchsdurchführung:

In einem Reaktionskolben werden 2 mL 1-Pentanol mit 2 mL Essigsäure und mit etwa 2 g wasserfreiem Zinkchlorid gemischt. Dann ist der Rundkolben durch einen Stopfen mit langem Glasrohr als Rückflusskühler zu verschließen. Der Rundkolben ist etwa 15 min über einer kleinen Flamme zu erwärmen. Das Stoffgemisch soll nur schwach sieden; das Flüssigkeitsvolumen darf dabei nicht kleiner werden. Dann wird das Stoffgemisch in ein Reagenzglas gegossen, das zur Hälfte mit Wasser gefüllt ist.

Beobachtungen:

Auch nach dem Vermischen des 1-Pentanol mit der Essigsäure lag eine klare Flüssigkeit im Kolben vor. Nach kurzer Zeit begann das Gemisch zu sieden. Dabei färbte sich das Zinkchlorid an der Grenzfläche zur Flüssigkeit langsam gelb. Nach einigen Minuten schlug die anfängliche Gelbfärbung des Zinkchlorids zu einer orange-rote Färbung um. Nach 18-minütigem Erhitzen lag eine trübe, leicht gelbliche Lösung vor. Beim Umschütten der Flüssigkeit in das mit Wasser befüllte Reagenzglas sank die trübe, gelbliche Lösung zunächst zum Boden des Gefäßes und stieg langsam an die Oberfläche des Gemisches. Ein süßlicher Birnengeruch war eindeutig wahrnehmbar.



Abb. 2.: gelb-orange Färbung des Zinkchlorids



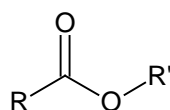
Abb. 3.: An die Wasseroberfläche steigendes Produkt

Entsorgung:

Der Inhalt des Reagenzglas wird neutralisiert und in den Sammelbehälter für organische Lösungsmittel gegeben. Die Reste des Zinkchlorids werden aus dem Kolben entfernt und trocken in die Feststofftonne gegeben.

Fachliche Analyse:

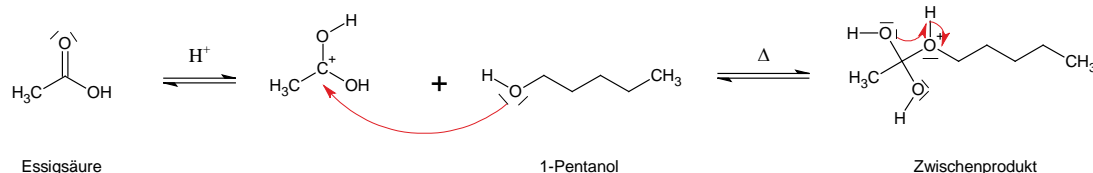
Ester haben die allgemeine Formel:



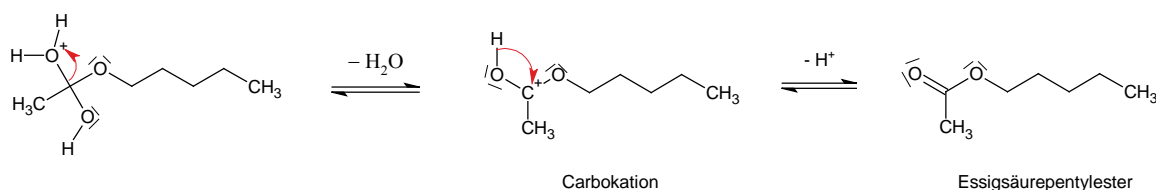
Dabei stehen R und R' für beliebige organische Reste. Damit zählt die Gruppe der Ester zu den Carbonsäure-Derivaten. Esterverbindungen sind in der Natur sehr weit verbreitet. Zu ihnen zählen viele häufig vorkommende Geschmacksstoffe. Viele Ester haben charakteristische, angenehme Gerüche und sind wichtige Bestandteile natürlicher und künstlicher Fruchtaromen. Wachse, Fette und Öle besitzen ebenfalls Ester-Gruppen. Sie sind die Ester der Fettsäuren und bilden wichtige Ausgangsstoffe für die Herstellung von Seifen. Andere Ester wie z. B. Essigsäuremethylester werden im Labor gerne als unpolares Lösungsmittel verwendet. Essigsäuremethylester ist zudem ein Lösungsmittel, das häufig in Klebstoffen enthalten ist und damit für einen charakteristischen Geruch sorgt (typischer Uhu-Alleskleber Geruch).

In der Synthese sind Ester aus einer Carbonsäure und einem Alkohol zugänglich. Die Reaktion verläuft nach einem Additions-Eliminierungs-Schema. Als Kondensationsprodukt wird Wasser gebildet. Die nicht sehr exotherm ablaufende Reaktion kann durch Zugabe einer anorganischen Säure (z. B. Schwefelsäure) katalysiert werden. Zudem führt man dem System Energie in Form von Wärme zu, um die Reaktionsgeschwindigkeit zu erhöhen. Gibt man konzentrierte Essigsäure und 1-Pentanol zu gleichen Teilen zusammen, so wird durch die

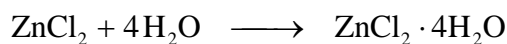
Anwesenheit von Protonen zunächst das Sauerstoffatom der Carbonylgruppe protoniert. Nun ist das C-Atom der Carbonylgruppe einfach positiv geladen und besonders elektrophil. Ein freies Elektronenpaar des O-Atoms der Alkoholgruppe des 1-Pentanol greift nun am aktivierten C-Atom der Carbonsäure an. Es bildet sich ein Zwischenprodukt, welches nicht sehr stabil ist und sofort weiterreagiert.



Das einfach positiv geladene O-Atom des Zwischenproduktes ist so stark elektronenziehend, dass das H-Atom leicht abgespalten werden kann. Das Proton wird direkt von einem freien Elektronenpaar eines O-Atoms der benachbarten Hydroxy-Gruppen abgefangen. Auf diese Weise wird ein Wassermolekül vorgebildet, das eine sehr gute Abgangsgruppe ist und unter Mitnahme der Bindungselektronen aus dem Molekül austritt. Das so gebildete Carbokation wird nun stabilisiert, indem das H-Atom der verbliebenen Hydroxy-Gruppe abgespalten wird und das frei werdende Bindungselektronenpaar eine C=O-Doppelbindung ausbildet.



Als Produkt wird neben dem Wasser Essigsäurepentylester gebildet. Bei allen Reaktionsschritten handelt es sich um Gleichgewichtsreaktionen, so dass sich rasch ein chemisches Gleichgewicht einstellt. Dieses liegt nicht vollständig auf der Produktseite. Um die Reaktion im Sinne der Estersynthese zu beeinflussen, wird dem Reaktionsgemisch wasserfreies Zinkchlorid zugesetzt. Das wasserfreie Zinkchlorid hat die Fähigkeit Wassermoleküle in sein Kristallgitter einzubauen und damit chemisch zu binden. Dabei bildet sich das gelb-orange Tetrahydrat, das selbst nicht in Lösung geht.



Auf diese Weise gelingt es die gebildeten Wassermoleküle dauerhaft aus dem Gleichgewicht zu entfernen. Durch das Entziehen eines der beiden Reaktionsprodukte wird das Gleichgewicht nach dem Prinzip von Le Chatelier vollständig auf die Produktseite verschoben.

Gibt man das Reaktionsprodukt in Wasser, so findet aufgrund des unpolaren Molekülcharakters des Essigsäurepentylesters keine Vermischung mit dem polaren Medium statt. Der Ester überschichtet das Wasser, da er mit $\rho = 0,87 \text{ g/cm}^3$ eine geringere Dichte hat. An der Was-

seroberfläche „schwimmend“ kann der Essigsäurepentylester eindeutig durch seinen angenehmen, süßlichen Birnengeruch identifiziert werden.

Methodisch-didaktische Analyse:

1. Einordnung

Der Versuch kann wie folgt in die Themengebiete des hessischen Lehrplans (G8) eingebettet werden.

Jahrgangsstufe u. Unterrichtseinheit	Themengebiet
11G.1	<u>Carbonylverbindungen:</u> Strukturmerkmal der Aldehyd-Gruppe; Eigenschaften und Verwendung von Methanal und Ethanal; Nachweis der reduzierenden Wirkung der Aldehyd-Gruppe; Ketone.
12G.1	<u>Umkehrbare Reaktionen und chemisches Gleichgewicht:</u> Nachweis des gleichzeitigen Vorliegens von Edukten und Produkten an ausgewählten Beispielen (Lösungsgleichgewichte, Gasgleichgewichte, Säure-Base-Gleichgewichte, Redox-Gleichgewichte); Definition des chemischen Gleichgewichts; Modellversuche zum chemischen Gleichgewicht und seiner Einstellung; Statische und dynamische Vorstellungen.
12G.1	<u>Prinzip vom Zwang:</u> Beeinflussung der Lage von Gleichgewichten durch Druck, Temperatur und Konzentration; Anwendungen des Prinzips vom Zwang in Natur, Technik und Industrie; z.B. Haber-Bosch-Verfahren; Ostwald-Verfahren; Kontakt-Verfahren; Hochofenprozess; Methanolherstellung; Gleichgewichte an Membranen.
12.G.1	<u>Geschwindigkeit chemischer Reaktionen:</u> Reaktionszeit; Reaktionsgeschwindigkeit (Definition und experimentelle; Ermittlung; c / t – Diagramme); Abhängigkeit von verschiedenen Faktoren (z.B. Stoff, Konzentration, Temperatur, Zerteilungsgrad, Druck); Aktivierungsenergie und Katalyse; Katalysatoren: Anwendungen in Industrie und Technik (fakultativ).

2. Aufwand

Alle verwendeten Geräte zählen zur Standardausrüstung einer Chemie Sammlung. Gegebenfalls muss das Glasrohr, welches als einfacher Rückflusskühler dient einmalig für den Versuch vorbereitet werden. Die benötigten Chemikalien sind preiswert und werden zudem in einem sehr kleinen Maßstab verwendet. Der Versuch ist prinzipiell in einer Schulstunde durchführbar. Es ist jedoch empfehlenswert, eine Doppelstunde dafür einzuplanen, da die Reaktion viel Zeit (mindestens 15 Minuten) in Anspruch nimmt.

3. Durchführung

Der Versuch funktioniert sehr zuverlässig. Die Trübung und Verfärbung der Lösung sind gut zu erkennen. Das Fruchtaroma des Esters ist eindeutig als Birnenaroma identifizierbar. Aufgrund des kleinen Versuchsmaßstabes müssen die Schüler jedoch nah an das Versuchsgeschehen herantreten. Nur dann können sie alle Effekte wahrnehmen. Alle verwendeten Chemikalien sind nach HessGiss für Schülerexperimente ab der Sekundarstufe I zugelassen. Ist der Versuch als Schülerversuch geplant, so sollte beachtet werden, dass das vorsichtige Erhitzen des Reaktionsgemisches mit dem Gasbrenner Übung erfordert. Insgesamt ist der Versuch sehr gut für die Schule geeignet, da sich an der behandelten Reaktion bei Variation der Versuchsparameter viele Aspekte einer Gleichgewichtsreaktion verdeutlichen lassen.

Literatur:

- **Versuchsvorschrift aus:** M. Just, A. Hradetzky, **Chemische Schulexperimente, Band 4**, 2. Auflage, Volk und Wissen Volkseigener Verlag, Berlin, 1977.
- K. P. C. Vollhardt, N. E. Schore, **Organische Chemie, Dritte Auflage**, Wiley-VCH Verlag GmbH, Weinheim, 2000.
- A. F. Holleman, E. Wiberg, N. Wiberg, **Lehrbuch der Anorganischen Chemie, 102. Auflage**, Walter de Gruyter & Co., Berlin, 2007.
- Charles E. Mortimer, Ulrich Müller, **Chemie, das Basiswissen der Chemie**, Georg Thieme Verlag, Stuttgart, 2003.
- **HessGiss-Datenbank**, V 11.0 – 2006/2007.
- www.dguv.de, **GESTIS-Stoffdatenbank**, 2009, Zugriff: 11.06.09.
- **Lehrplan Chemie, Gymnasialer Bildungsgang, Jahrgangsstufen 7G bis 12G**, Hessisches Kultusministerium 2008.