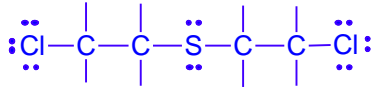


Mosterdgas

Mosterdgas kan worden weergegeven als Cl-CH₂-CH₂-S-CH₂-CH₂-Cl.

- 1 Teken de lewisstructuur van mosterdgas.

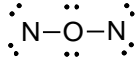


- 2 Bepaal met VSEPR de ruimtelijke vorm van mosterdgasmoleculen. Het centrale atoom (zwavel) heeft omringingsgetal 4. Het is dus een tetraëder.
- 3 Leg uit of mosterdgasmoleculen dipolen zijn. Als het molecuul een tetraëdrische vorm heeft, maken de zijtakken aan het centrale S-atoom een hoek kleiner dan 180° waardoor het centrum van de partiële ladingen van de zijtakken niet samenvalt met de partiële lading op het zwavelatoom. Dit betekent dat mosterdgasmoleculen dipoolmoleculen zijn.
- 4 Leg uit of mosterdgasmoleculen elektrofiel of nucleofiel zijn. Het centrale zwavelatoom heeft een vrij elektronenpaar. Het zal dus reageren met elektrofielen en is dus zelf nucleofiel.

Lachgas

Distikstofmono-oxide, triviale naam lachgas, wordt gebruikt bij verdovingen. Het wordt ook gebruikt in motoren om het motorvermogen te verhogen. In de atmosfeer is lachgas een broeikasgas.

Harm tekent een lewisstructuur van lachgas:

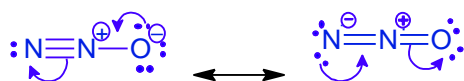


- 1 Leg uit dat in deze lewisstructuur elk atoom het juiste aantal valentie-elektronen om zich heen heeft. Stikstof heeft vijf valentie-elektronen. Die heeft het om zich heen in de vorm van 2 × 2 uit de niet-bindende elektronenparen en eentje uit het bindend elektronenpaar. Zuurstof heeft zes valentie-elektronen. Die heeft het om zich heen: 2 × 2 uit de niet-bindende elektronenparen en twee uit de bindende elektronenparen.
- 2 Leg uit waarom de lewisstructuur van Harm toch niet juist kan zijn. De stikstofatomen voldoen niet aan de octetregel. Ze hebben maar 6 elektronen om zich heen. De juiste lewisstructuur bevat atomen met een formele lading.
- 3 Geef een kloppende lewisstructuur van lachgas. Geef duidelijk de formele ladingen aan. Onderstaande berekening is niet nodig als je het zonder kunt. Dit geldt ook voor komende soortgelijke vragen.

Nodig voor acht-omhulling: 3 × 8 = 24 e⁻
 Beschikbaar: 2 × N = 10 e⁻ en 1 × O = 6 e⁻ is samen 16 e⁻ - 8 = paren
 Gemeenschappelijke paren (8 e⁻ / 2 =) 4 paren
 Vrije paren = 8 - 4 (bindende paren) = 4 paren

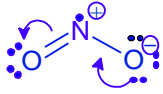


- 4 Teken een mesomere grensstructuur van de structuur die je bij 3 hebt getekend. Geef met pijltjes aan hoe de ene structuur in de andere overgaat.



- 5 Geef ook een correcte lewisstructuur voor stikstofdioxide, NO₂, waaruit blijkt dat het een radicaal is. Nodig voor acht-omhulling: 3 × 8 = 24 e⁻
 Beschikbaar: 2 × O = 12 e⁻ en 1 × N = 5 e⁻ is samen 17 e⁻ = 8 paren
 Gemeenschappelijke paren (7 e⁻ / 2 =) 3 paren + 1 e⁻ op het N-atoom

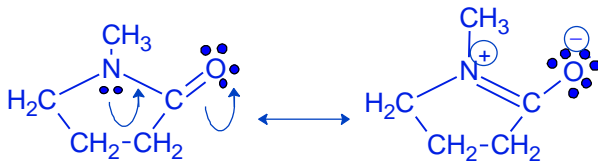
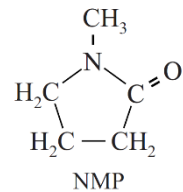
Vrije paren = $8 - 3$ (bindende paren) = 5 paren



NMP

NMP is een oplosmiddel dat op grote schaal wordt gebruikt om koolwaterstoffen op te lossen. Het is ook goed oplosbaar in water. De oplosbaarheid van NMP in water is te verklaren met behulp van de Lewisstructuur van een mesomere grensstructuur van NMP. In deze Lewisstructuur komen formele ladingen voor.

- Geef de Lewisstructuur van het hiernaast weergegeven NMP en van de andere mesomere grensstructuur van NMP. Geef formele ladingen aan in de structuren. De Lewisstructuren moeten voldoen aan de octetregel.



SO₄⁻

Het deeltje SO₄⁻ is een radicaal.

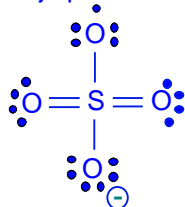
- Geef een mogelijke Lewisstructuur van het deeltje SO₄⁻, waaruit blijkt dat het deeltje een radicaal is. Geef formele ladingen aan. Neem aan dat de covalentie van zwavel zes is.

Nodig voor acht- en 12-omhulling S-atoom : $4 \times 8 + 12 = 44 e^-$

Beschikbaar: $4 \times O + 1 \times S + 1$ (ionlading) = $31 e^- = 15$ paren

Gemeenschappelijke paren $(13 e^- / 2 =) 6$ paren + 1 e⁻

Vrije paren = $15 - 6$ (bindende paren) = 9 paren + 1 vrij e⁻



of een andere mesomere structuur.

Batterijen opladen met NaSi

In 2012 werd op een vakantiebeurs een draagbare batterijoplader gepresenteerd om bijvoorbeeld een mobieltje op te laden.

In de oplader bevindt zich een eenmalig te gebruiken capsule met natriumsilicide. Het benodigde natriumsilicide wordt bereid door silicumpoeder en vloeibaar natrium met elkaar te laten reageren bij 400 °C.

De verhoudingsformule van natriumsilicide is NaSi. Natriumsilicide is opgebouwd uit Na⁺ en Si₄⁴⁻ ionen. Een Si₄⁴⁻ ion heeft de vorm van een tetraëder. Op elk hoekpunt van de tetraëder is een Si deeltje aanwezig.

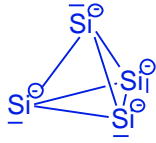
- Geef de Lewisstructuur van een ion Si₄⁴⁻. Geef formele ladingen aan.

Nodig voor acht-omhulling: $4 \times 8 = 32 e^-$

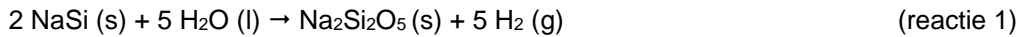
Beschikbaar: $4 \times Si + 4 \times 1$ ionlading = $20 e^- = 10$ paren

Gemeenschappelijke paren $(12 e^- / 2 =) 6$ paren

Vrije paren = $10 - 6$ (bindende paren) = 4 paren



In de oplader wordt het natriumsilicide in contact gebracht met water, waarbij waterstof ontstaat (reactie 1).



In de technische toelichting bij de oplader staat dat een capsule 4,5 g natriumsilicide-poeder bevat. Per capsule ontstaat 4,0 L waterstofgas ($T = 298 \text{ K}$, $p = p_0$).

- 2 Bereken het rendement van de waterstofproductie in de oplader ($T = 298 \text{ K}$, $p = p_0$).

1 mol NaSi \equiv 2½ mol H₂

$$\frac{4,5 \text{ g}}{51,08 \text{ g/mol}} \equiv 8,810 \cdot 10^{-2} \text{ mol NaSi} \equiv 2\frac{1}{2} \times \frac{4,5 \text{ g}}{51,08 \text{ g/mol}} = 2,202 \cdot 10^{-1} \text{ mol H}_2$$

$$2,202 \cdot 10^{-1} \text{ mol H}_2 \equiv 2,202 \cdot 10^{-1} \text{ mol H}_2 \times 24,5 \text{ L/mol} = 5,40 \text{ L H}_2 \text{ theoretisch}$$

$$\text{rendement} = \frac{4,0 \text{ L}}{5,40 \text{ L}} \times 100\% = 74\%$$

De gevormde waterstof stroomt naar het andere deel van de oplader waar zich een waterstofbrandstofcel bevindt. In de waterstofbrandstofcel wordt de waterstof omgezet tot water.

De oplader wordt in persberichten aangeprezen als duurzaam.

Om dat te onderbouwen, noemt de fabrikant de volgende punten:

- natriumsilicide wordt bereid uit grondstoffen die zeer ruimschoots aanwezig zijn op aarde: natriumchloride en siliciumdioxide (zand);
- de reactie waarbij natriumsilicide wordt gevormd uit natrium en silicium kost geen energie en levert geen enkel bijproduct op;
- tijdens stroomlevering komt alleen waterdamp in de atmosfeer;
- de capsule kan na gebruik bij het gewone afval omdat de uitgewerkte capsule geen schadelijke stoffen bevat.

Twee leerlingen twijfelen over de duurzaamheid van deze oplader.

Ze merken dat de fabrikant positieve punten noemt, zoals de goede atomeconomie van de vorming van natriumsilicide. Om een goede afweging te kunnen maken of deze oplader duurzaam is in productie en gebruik, vullen ze de bovenstaande opsomming aan. Ze noteren enkele gegevens over productie en gebruik van de oplader, waaruit blijkt dat niet wordt voldaan aan enkele uitgangspunten in de groene chemie.

- 3 Noteer bij elk van de volgende uitgangspunten in de groene chemie een gegeven waaruit blijkt dat niet wordt voldaan aan deze uitgangspunten.

Gebruik gegevens uit de voorgaande teksten over de productie en het gebruik van de oplader. Gebruik onder andere Binas-tabel 97F.

Noteer je antwoord als volgt:

- Uitgangspunt 2: ...
- Uitgangspunt 6: ...
- Uitgangspunt 12: ...

Uitgangspunt 2:

- De atomeconomie voor de bereiding van NaSi uit de grondstoffen zand en zout is geen 100% (omdat zand bestaat uit SiO₂ en zout uit NaCl).
- Er ontstaan wel afvalproducten (met massa) bij de bereiding van Na en Si (uit zand en zout).

Uitgangspunt 6:

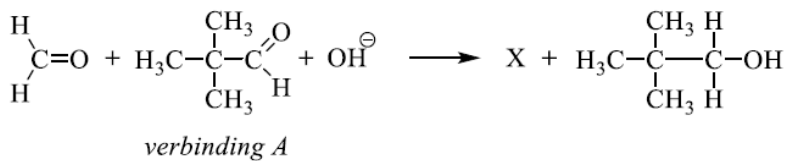
- De vormingswarmten van SiO₂ en NaCl zijn (zeer) negatief, dus voor de bereiding van Na en Si is (veel) energie nodig.
- De bereiding van natriumsilicide verloopt niet bij kamertemperatuur.
- Voor het beoordelen van de benodigde energie moet het hele proces in ogenschouw worden genomen.

Uitgangspunt 12:

- Met name het tussenproduct natrium is een gevaarlijke stof.
- Natriumsilicide is onveilig omdat het niet in contact mag komen met water.
- Waterstof is een brandbaar explosief gas. Daardoor brengt de toepassing van waterstof in deze op- lader risico's met zich mee.

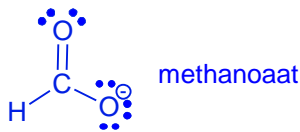
Reactie van methanal met een aldehyde

Methanal kan in basisch milieu reageren met andere aldehyden. Hieronder staat een voorbeeld van een dergelijke reactie:



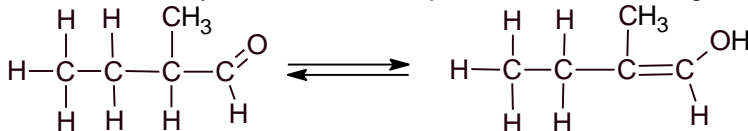
Verbinding X is een alkanoaat.

- Geef de naam van verbinding A.
Dimethylpropanal (of 2,2-dimethylpropanal).
- Geef de Lewisstructuur en de naam van verbinding X.



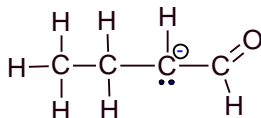
Enolvorming

Als men 2-methylbutanal in water oplost, stelt zich het volgende evenwicht in:

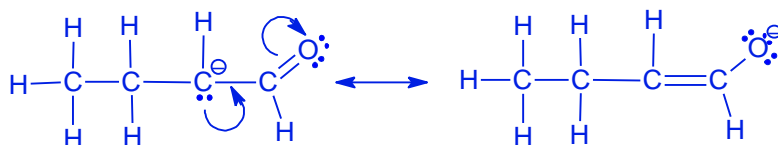


De alcohol in dit evenwicht is een zogenoemd enol. Dat wil zeggen een alcohol met C=C—OH als karakteristieke groep.

Enolvorming kan worden gekatalyseerd door OH⁻. Hierbij wordt een H⁺ van het 2^e C-atoom door OH⁻ gebonden. Er ontstaat een negatief ion:



- Leg uit dat het 2^e C-atoom een formele lading heeft van -1.
Tel het aantal valentie-elektronen om het 2^e C-atoom als volgt:
het aantal bindingen + het aantal niet gebonden ('vrije') elektronen = 3 + 2 = 5 (van een bindend elektronpaar hoort de helft bij het betreffende atoom). Vergelijk dit met de normale covalentie van C: 4. Er is nu 1 elektron meer, dus heeft C een formele lading van -1.
Met behulp van grensstructuren kan de enolvorming aangetoond worden.
- Teken beide grensstructuren en leg uit hoe de enolvorming tot stand komt. Gebruik Lewisstructuren (elektronenformules).



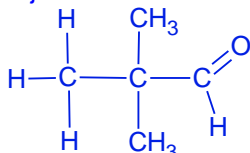
Toelichting bij de grensstructuren:

Alle atomen blijven op hun plaats. Alleen niet-bindende elektronenparen en elektronen-paren van een dubbele bindingen kunnen verplaatst worden. Dat is hier met blauwe pijlen aangegeven. Enolvorming komt tot stand als het negatief geladen O-atoom een H^+ pakt van water. Tevens ontstaat daarbij weer OH^- (de katalysator).

Enolvorming kan optreden bij alkanalen met meer dan één C-atoom per molecuul. Er zijn echter alkanalen met meer dan één C-atoom per molecuul waarbij geen enolvorming optreedt.

- 3 Geef de structuurformule van een alkanal met meer dan één C-atoom per molecuul, waarbij geen enolvorming optreedt en leg uit waarom de enolvorming niet optreedt.

Bijvoorbeeld:

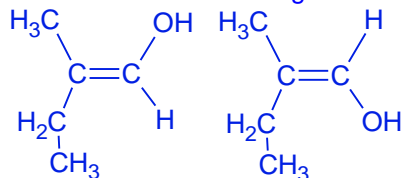


Het tweede C-atoom heeft geen H-atoom dat verplaatst kan worden naar het O-atoom. Als er een enol zou ontstaan, zou het tweede C-atoom 5 bindingen krijgen en dat kan niet.

Bij het enoliseren van 2-methylbutanal zullen twee soorten enolmoleculen ontstaan.

- 4 Leg uit of van het enol van 2-methylpropanal ook twee soorten moleculen zullen bestaan. Vergelijk in de uitleg de molecuulstructuren van de enolen van 2-methylbutanal en 2-methylpropanal.

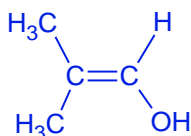
Van het enol uit de vraag bestaat een *cis*- en een *trans*-vorm.



cis-vorm

trans-vorm

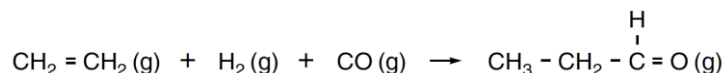
Het enol dat uit 2-methylpropanal ontstaat is:



Zou je hier de OH en de H aan het eerste C-atoom verwisselen, dan blijft het molecuul hetzelfde. Van het enol van 2-methylpropanal zullen dus niet twee soorten enolmoleculen ontstaan.

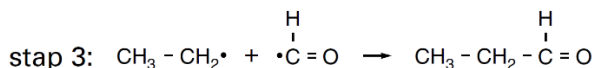
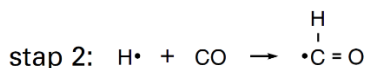
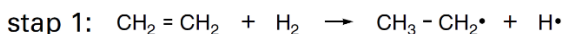
Alkanalen

Propanal kan op verschillende manieren worden bereid. Bij één van die manieren gaat men uit van etheen, waterstof en koolstofmonoxide die in een reactor samengebracht worden:



Onder de reactiesnelheid bij deze omzetting verstaat men het aantal mol propanal dat per seconde per dm^3 reactorruimte wordt gevormd. Deze reactiesnelheid hangt af van de concentraties van etheen en waterstof in de reactorruimte, maar niet van de concentratie van koolstofmonoxide in de reactorruimte.

Mede op grond hiervan veronderstelt men dat de bovengenoemde reactie via de volgende drie achtereenvolgende stappen verloopt:



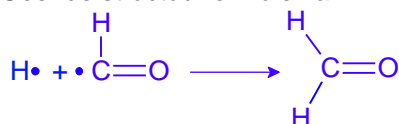
Eén van deze drie stappen is voor de vorming van propanal de snelheidsbepalende stap.

- 1 Leg aan de hand van een gegeven over de reactiesnelheid uit of stap 2 de snelheidsbepalende stap voor deze vorming van propanal kan zijn.

Stap 2 kan niet de snelheidsbepalende stap zijn omdat de reactiesnelheid niet afhangt van de concentratie van koolstofmonooxide.

Behalve propanal wordt in het reactiemengsel nog een ander alkanal aangetroffen. In deze opgave wordt dit andere alkanal verder aangegeven als X. Het ontstaan van X kan worden verklaard met behulp van het bovenbeschreven reactiemechanisme.

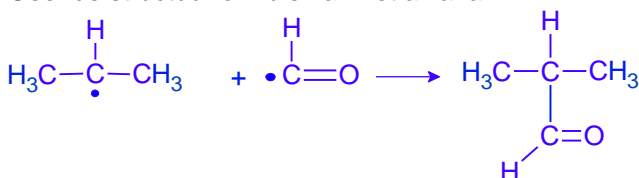
- 2 Geef de structuurformule van X.



Als men butanal wil bereiden, gaat men uit van een mengsel van propaan, waterstof en koolstofmonooxide. Men veronderstelt dat deze omzetting volgens eenzelfde reactiemechanisme verloopt als het geval is bij de bereiding van propanal. Bij de bereiding van butanal ontstaat, behalve butanal en het eerder genoemde alkanal X, nog een alkanal Y.

Dit alkanal Y kan niet ontstaan bij de bovengenoemde bereiding van propanal.

- 3 Geef de structuurformule van het alkanal Y.



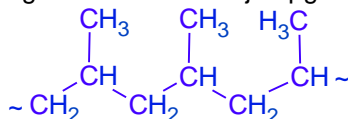
- 4 Leg aan de hand van het reactiemechanisme uit hoe het ontstaan van Y in het reactiemengsel moet worden verklaard.

In stap 1 kan ook $\text{H}_3\text{C}-\begin{array}{c} \cdot \\ | \\ \text{CH} \end{array}-\text{CH}_3$ ontstaan

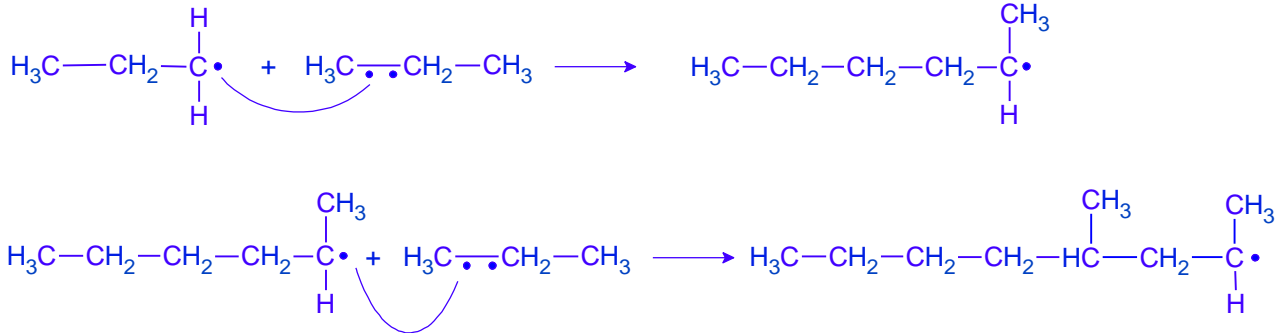
In het reactiemengsel dat ontstaat bij de bereiding van butanal wordt ook een kleine hoeveelheid polypropaan aangetroffen. Men veronderstelt dat de vorming van een polypropaanmolecuul in het reactiemengsel begint met een initiatiereactie. Zo'n initiatiereactie wordt gevolgd door een aantal opeenvolgende propagatiereacties. Deze initiatiereactie treedt op na het verlopen van de eerste stap van het reactiemechanisme voor de omzetting van propaan met waterstof en koolstofmonooxide tot butanal. De eerste stap van het reactiemechanisme voor deze bereiding van butanal is vergelijkbaar met stap 1 uit het hierboven weergegeven reactiemechanisme voor de bereiding van propanal.

- 5 Geef een gedeelte uit het midden van een molecuul polypropaan in structuurformule weer.

Dit gedeelte dient te zijn opgebouwd uit drie monomeereenheden.

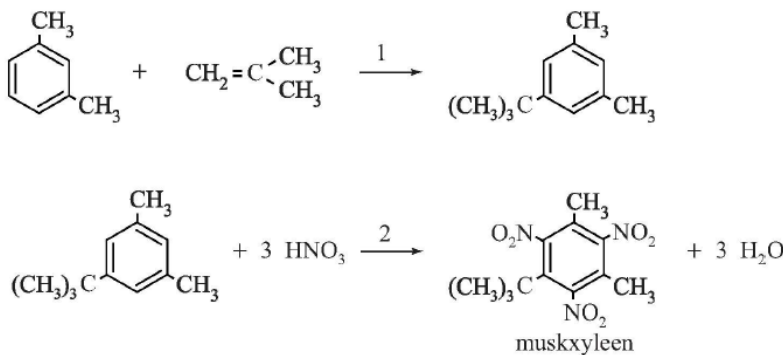


- 6 Geef van de reactie die in het reactiemengsel leidt tot de vorming van een polypropreenmolecuul een mogelijke initiatiereactie en de eerste propagatiereactie in vergelijkingen met structuurformules weer.



Nitromusks

Nitromusks zijn geurstoffen ter vervanging van muskus die in vrijwel alle parfums voorkomen. Het is eenvoudig te bereiden uit goedkope grondstoffen. Zo kan muskxyleen (MX) worden bereid in slechts twee stappen die hierna zijn weergegeven.



In stap 1 laat men 1,3-dimethylbenzeen reageren met methylpropeen. Deze omzetting heeft een rendement van 75%. Vervolgens laat men de ontstane stof na zuivering reageren met geconcentreerd salpeterzuur tot MX en water. Deze tweede stap heeft een rendement van 88%.

- 1 Bereken de E-factor voor deze bereiding van MX uit 1,3-dimethylbenzeen. De molaire massa van MX bedraagt 297,3 g mol⁻¹. Neem aan dat bij de zuivering geen stof verloren gaat.

$$\text{Massa MX} = m_{\text{werkelijke opbrengst}} = 0,75 \times 0,88 \times 297,3 \text{ g} = 196,218 \text{ g}$$

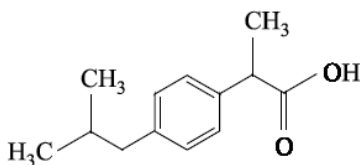
$$\text{massa HNO}_3 = 0,75 \times 3 \times 63,013 = 141,779 \text{ g}$$

$$m_{\text{beginstoffen}} = 106,2 + 56,10 + 141,779 = 304,097 \text{ g}$$

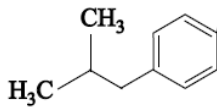
$$E = (304,097 \text{ g} - 196,218 \text{ g}) : 196,218 \text{ g} = 0,55$$

Synthese van ibuprofen

Ibuprofen is een pijnstiller, die in grote hoeveelheden wordt gemaakt. Hieronder is de schematische structuurformule van ibuprofen weergegeven.



Er bestaan verschillende methodes om ibuprofen te synthetiseren. In de zestiger jaren van de vorige eeuw is de zogenoemde 'Brown-synthese' ontwikkeld. Deze synthese bestaat uit zes reactiestappen en heeft als belangrijkste beginstof iso-butylbenzeen, waarvan de schematische structuurformule als volgt is:



Een belangrijk aspect van een synthese is het rendement van het proces. Wanneer een proces uit meerdere reactiestappen bestaat, heeft dat vaak een verlaging van het rendement tot gevolg. Zo is het totale rendement van de Brown-synthese 53%.

- Bereken hoeveel gram ibuprofen kan worden bereid uit 50,0 g iso-butylbenzeen, als het rendement van het gehele proces 53% is.

Neem aan dat alle andere beginstoffen in overmaat aanwezig zijn en dat de molverhouding iso-butylbenzeen : ibuprofen gelijk is aan 1 : 1. ($M_{\text{iso-butylbenzeen}} = 134,21 \text{ g/mol}$ en $M_{\text{ibuprofen}} = 206,27 \text{ g/mol}$)

Aantal mol iso-butylbenzeen \equiv aantal mol ibuprofen = $50 \text{ g} : 134,21 \text{ g/mol} = 0,373 \text{ mol}$

$0,373 \text{ mol ibuprofen} \equiv 0,373 \text{ mol} \times 206,27 \text{ g/mol} = 78,8 \text{ g}$

Opbrengst = $0,53 \times 78,8 \text{ g} = 41 \text{ g ibuprofen}$.

De atomeconomie van de Brown-synthese is vrij laag, namelijk 35%. Op basis van het rendement en de atomeconomie kan ook de E-factor van de Brown-synthese worden berekend.
- Bereken de E-factor van de Brown-synthese met behulp van het rendement en de atomeconomie.

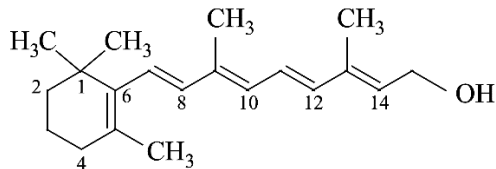
Uit $m_{\text{product}} : m_{\text{beginstoffen}} = 0,35$ volgt $m_{\text{beginstoffen}} = 206,27 \text{ g} : 0,35 = 589,3 \text{ g}$

$m_{\text{werkelijke opbrengst}} = 206,27 \text{ g} \times 0,53 = 109,3 \text{ g}$

E-factor = $(589,3 \text{ g} - 109,3 \text{ g}) : 109,3 \text{ g} = 4,42$

Vitamine A

Hieronder is de schematische structuurformule van vitamine A (retinol) weergegeven.

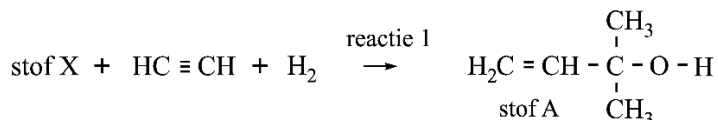


- Leid af hoeveel stereo-isomeren maximaal mogelijk zijn van retinol. Gebruik in je uitleg nummers van de koolstofatomen zoals in de structuurformule hierboven.

In de structuur van vitamine A zijn C=C bindingen aanwezig, waarbij de omringende atomen/atoomgroepen op twee manieren kunnen voorkomen (*cis-trans/Z-E*) (en er zijn geen asymmetrische C atomen).

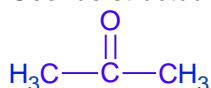
De C=C bindingen waar dit voor geldt bevinden zich bij de atomen C7/C8 en C9/C10 en C11/C12 en C13/C14. Dit betekent dat er theoretisch $2 \times 2 \times 2 \times 2 = 16$ stereo-isomeren mogelijk zijn (dus naast retinol nog 15 andere stereo-isomeren).

Een veel gebruikte methode om vitamine A (retinol) op grote schaal te produceren begint met reactie 1. In reactie 1 reageert 1 mol van stof X met ethyn en waterstof, zoals hieronder is weergegeven.



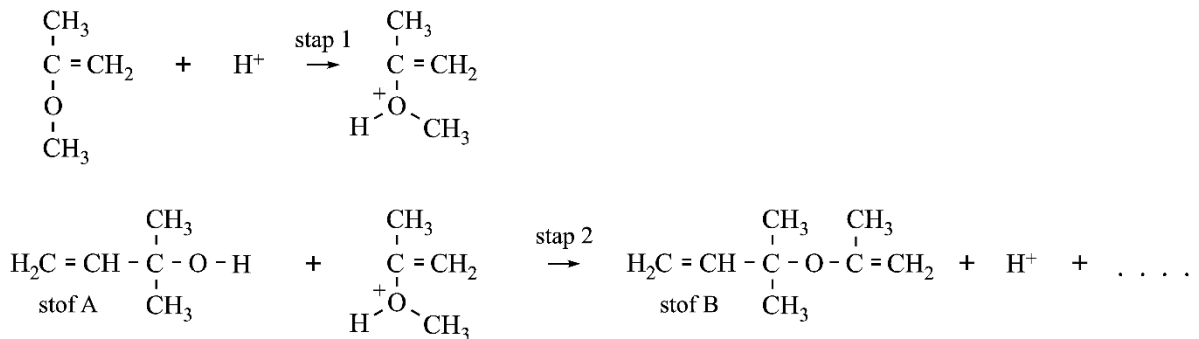
Reactie 1 kan worden opgevat als een additiereactie.

- Geef de structuurformule van stof X.

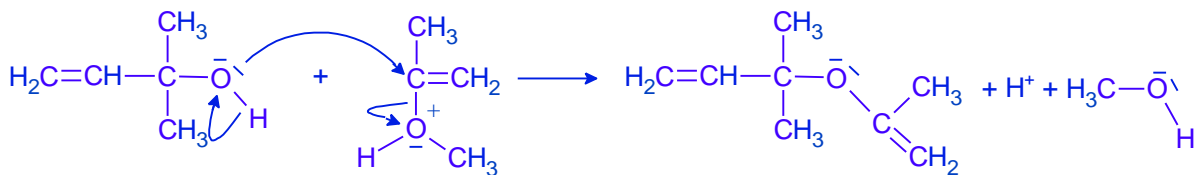


Oefenopgaven H12 en 15 (Molecuulbouw en Groene chemie)

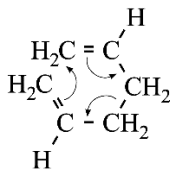
In reactie 2 wordt stof A vervolgens omgezet tot stof B. Het mechanisme van reactie 2 is hierna in twee stappen onvolledig weergegeven. Behalve stof B en H^+ wordt in stap 2 nog één andere stof gevormd.



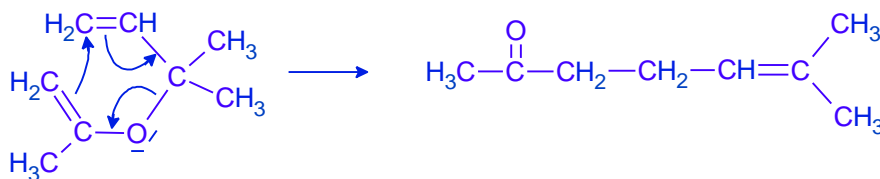
- 3 Geef de tweede stap van het mechanisme van reactie 2 weer met behulp van Lewisstructuren.
- Geef met pijlen weer hoe elektronenparen worden verplaatst tijdens de reactie;
 - geef de Lewisstructuur van het deeltje dat ook vrijkomt in de tweede stap van het mechanisme.



Stof B wordt in reactie 3 vervolgens omgezet tot stof C. Deze omzetting verloopt volgens een mechanisme zoals hieronder is weergegeven. De beide dubbele bindingen van hetzelfde molecuul komen bij elkaar in de buurt. In de zo gevormde zeshoek verplaatsen elektronenparen zich.



- 4 Geef de structuurformule van stof C.
Teken B in dezelfde vorm als hexa-1,5 dien hierboven.



Door de verbeterde syntheses is vitamine A op grote schaal beschikbaar. Het kan daarom goedkoop worden toegevoegd aan voedingsmiddelen.

Een hoeveelheid poedermelk bevat $3,0 \mu\text{g}$ vitamine A per gram. Vanuit een voedselproject wordt een hoeveelheid poedermelk naar Afrika verscheept. Na aankomst blijft de vracht nog drie maanden in de haven in het volle zonlicht staan, voordat het verder getransporteerd wordt. Omdat men vermoedt dat de vitamine A gedurende de opslag voor een deel afgebroken is, wordt voor verder transport het gehalte vitamine A in de poedermelk bepaald.

- 5 Geef aan op grond van welke chemische kennis men vermoedt dat een deel van het vitamine A is omgezet gedurende de opslag.
Voorbeelden van een juist antwoord zijn:

- Door de warmte heeft een deel van de vitamine A gereageerd met zuurstof.
- In vitamine A zijn (veel) dubbele bindingen aanwezig. Hierdoor is de stof (extra) gevoelig voor UV-licht.

Bij de bepaling wordt 140 g poedermelk gemengd met water tot het volume 1,00 L bedraagt. Het verkregen mengsel wordt met hexaan geëxtraheerd, waardoor alle vitamine A in het hexaan oplost. De hexaanlaag wordt gescheiden van de waterlaag en met hexaan aangevuld tot 750 mL. Met behulp van gaschromatografie wordt het mengsel geanalyseerd. Het piekoppervlak van vitamine A bedraagt 89. Onder dezelfde omstandigheden wordt ook van een standaardoplossing die 1996 $\mu\text{g L}^{-1}$ vitamine A bevat een chromatogram gemaakt. Het piekoppervlak bedraagt nu 934.

- 6 Bereken hoeveel procent van het vitamine A in de poedermelk is omgezet.

$$\text{In 1 L hexaanoplossing aanwezig } \frac{89}{934} \times 1996 \mu\text{g/L} = 190,2 \mu\text{g.}$$

$$\text{aanwezig in 750 mL hexaan} = 190,2 \mu\text{g} \times \frac{750}{1000} = 142,6 \mu\text{g.}$$

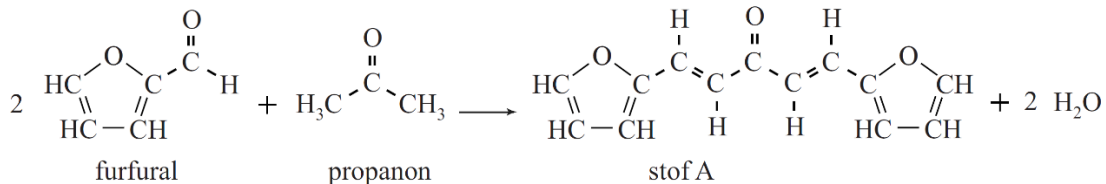
Deze hoeveelheid was aanwezig in 140 g poeder.

$$\text{dus in 1 gram poeder nog aanwezig: } \frac{142,6 \mu\text{g}}{140 \text{ g poeder}} = 1,02 \mu\text{g/1 g poeder.}$$

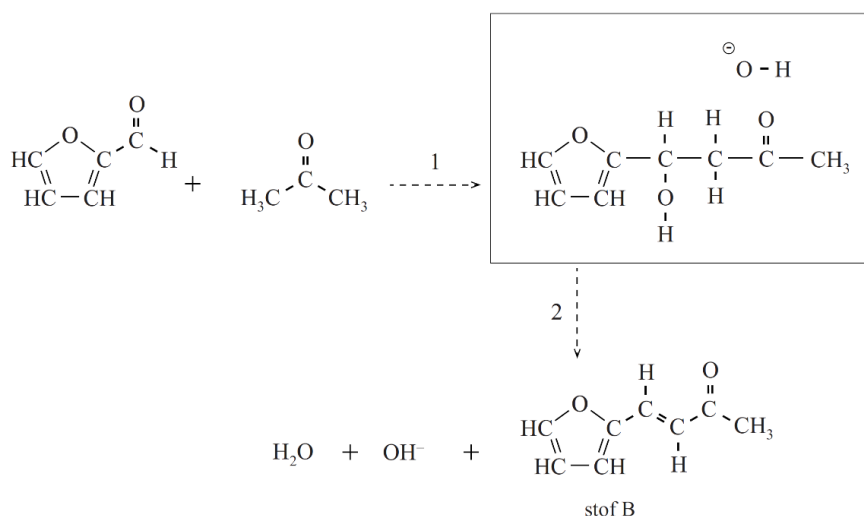
$$\text{Het percentage afname} = \frac{3,0 - 1,02}{3,0} \times 100\% = 66\%$$

Diesel uit houtafval

Bij de verwerking van hout tot bijvoorbeeld papier komt veel afvalwater vrij. In een onderzoek is gekeken of het mogelijk is om op industriële schaal dieselachtige koolwaterstoffen te produceren op basis van dit afvalwater. Afvalwater van de papierindustrie bevat een hoog gehalte xylose-oligomeren die eerst worden omgezet in furfural en vervolgens met propanon in stof A volgens onderstaande reactie:



De vorming van stof A verloopt via een aantal tussenstappen. Twee stappen uit het reactiemechanisme zijn hieronder weergegeven.

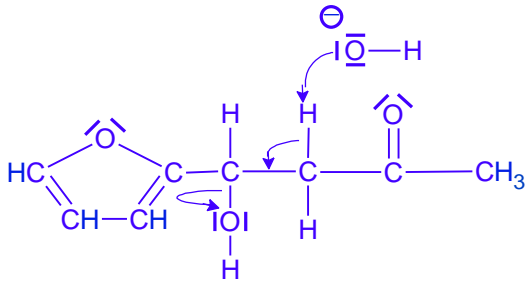


In stap 2 wordt stof B gevormd.

Hierbij neemt een OH⁻-ion eerst een H⁺-ion op van het organische deeltje dat in het kader is weergegeven. Het OH⁻-ion treedt in stap 2 op als katalysator.

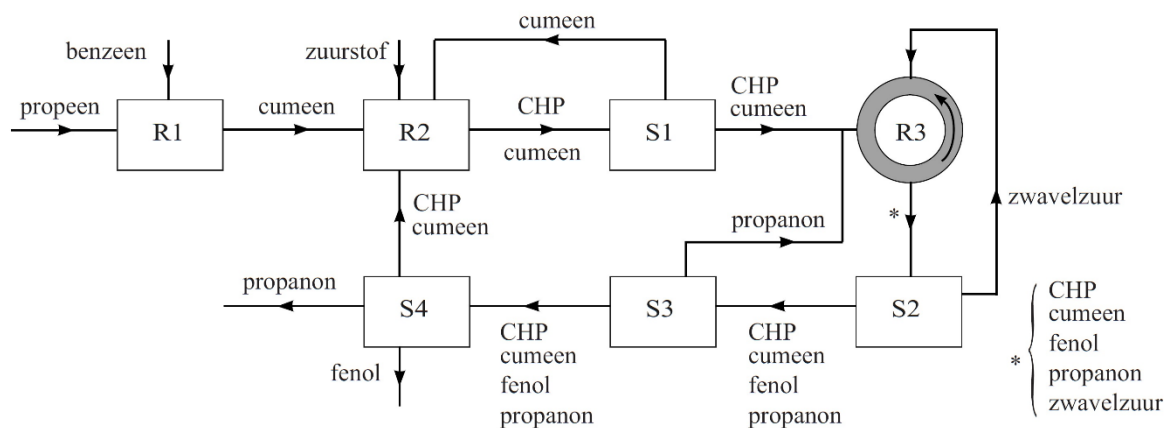
Neem beide in het kader geplaatste structuurformules over en voer de volgende twee opdrachten uit.

- 1 Geef alle niet bindende elektronenparen weer.
- 2 Geef met pijlen weer hoe de elektronenparen worden verplaatst tijdens stap 2



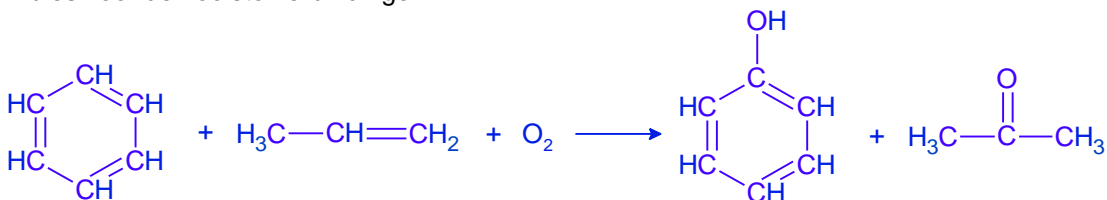
Fenolproductie

Fenol (benzenol) is een belangrijke grondstof voor veel synthetische producten, waaronder geneesmiddelen en kunststoffen. Fenol wordt geproduceerd volgens het zogeheten cumeen-proces. Een vereenvoudigd blokschema van dit proces staat hierna weergegeven.



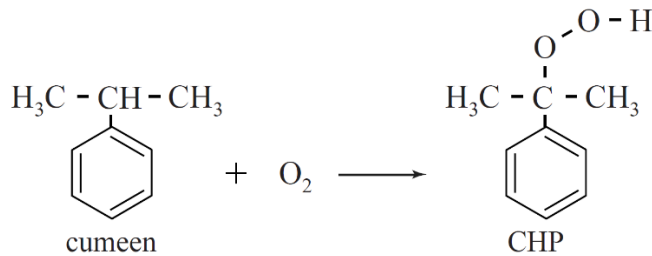
Uit het blokschema kan de totaalvergelijking voor de vorming van fenol volgens het cumeenproces worden afgeleid.

- 1 Geef de totaalvergelijking voor de vorming van fenol volgens het cumeenproces. Gebruik structuurformules voor de koolstofverbindingen.



In reactor 1 (R1) reageert propene volledig met benzeen. Daarbij ontstaat cumeen. In R2 reageert een deel van het gevormde cumeen met zuurstof tot cumeenhydroperoxide (CHP), zoals weergegeven in

onderstaande reactievergelijking.



In scheidingsruimte 1 (S1) wordt een groot deel van het overgebleven cumeen afgescheiden. Het mengsel dat overblijft, bevat 82,5 massa% CHP en 17,5 massa% cumeen.

In R3 wordt CHP grotendeels omgezet tot fenol en propanon. Fenol en propanon ontstaan in de mol-verhouding 1 : 1. Hierbij wordt zwavelzuur als katalysator gebruikt. Omdat de reactie in R3 zeer exotherm is, is het belangrijk om de temperatuur in deze reactor nauwkeurig te regelen.

Als de temperatuur te hoog oploopt, leidt dat namelijk tot veiligheidsrisico's. Tevens ontstaan dan ongewenste nevenproducten.

- 2 Geef een mogelijke verklaring waarom de vorming van nevenproducten in R3 alleen optreedt bij een hoge temperatuur.

Voorbeelden van een juiste verklaring zijn:

- De reacties die leiden tot nevenproducten hebben mogelijk een hoge activeringsenergie. (Als de activeringsenergie hoog is, is een hogere temperatuur nodig om de reactie te laten verlopen.)
- De nevenproducten worden mogelijk in een evenwicht gevormd dat bij lage temperatuur aan de exotherme kant ligt / dat bij hoge temperatuur naar de endotherme kant verschuift.
- De reacties die leiden tot nevenproducten zijn mogelijk endotherm.
- Bij hoge temperatuur kunnen de reactieproducten ontleden / met elkaar reageren.
- Bij hoge temperatuur verlopen reacties sneller, die anders te langzaam zijn om een product van enig belang te kunnen produceren.

Reactor 3 is een buisreactor. Door het grote oppervlak van de buis kan R3 goed worden gekoeld. Voordat het mengsel afkomstig uit S1 in R3 wordt gepompt, wordt nog extra propanon toegevoegd. Het toevoegen van propanon aan de instroom in R3 draagt bij aan een veilig proces in R3.

- 3 Geef twee redenen waarom het toevoegen van propanon aan de instroom in R3 bijdraagt aan een veilig proces in R3.

Voorbeelden van juiste redenen zijn (twee van de volgende):

- Het toegevoegde propanon zorgt voor koeling / neemt warmte op.
- Door het toevoegen van propanon wordt het reactiemengsel verdund (waardoor het mengsel minder opwarmt).
- Door het toevoegen van propanon daalt de reactiesnelheid (waardoor per tijdseenheid minder warmte ontstaat).
- De reactie in R3 is mogelijk een evenwicht. Door propanon toe te voegen verschuift het evenwicht naar links. Dit is de endotherme reactie, waardoor warmte wordt opgenomen.

Aan de instroom in R3 wordt extra propanon toegevoegd, zodat in de uitstroom van R3 de molverhouding fenol : propanon gelijk is aan 1,00 : 1,50. De molaire massa van propanon is 58,1 g mol⁻¹ en die van CHP is 152 g mol⁻¹.

- 4 Bereken hoeveel ton propanon er aan 1,0 ton van de instroom in R3 moet worden toegevoegd om de juiste molverhouding fenol : propanon in de uitstroom van R3 te handhaven. Een ton is 10³ kg. Neem hier aan dat CHP volledig wordt omgezet tot fenol en propanon.

$$\text{In stroom CHP in R3} = 0,825 \times \frac{1,0 \text{ ton}}{152 \text{ ton/tonmol}} = 5,428 \cdot 10^{-3} \text{ tonmol}$$

Molverhouding cumeen : fenol : propanon = 1 : 1, dus is er ook 5,428 · 10⁻³ tonmol fenol en 5,428 · 10⁻³

tonmol propanon ontstaan. Dan is er $1/2 \times 5,428 \cdot 10^{-3}$ tonmol propanon extra toegevoegd. Dan is er $2,714 \cdot 10^{-3}$ tonmol $\times 58,1$ ton/tonmol = 0,16 ton propanon toegevoegd.

Het CHP-gehalte in de uitstroom van R3 wordt voortdurend gecontroleerd. Een gehalte hoger dan 2 massa% leidt namelijk tot explosiegevaar in de scheidingsruimten die erna komen. Deze controle gebeurt door een klein gedeelte van de uitstroom van R3 naar een microreactor te leiden. In de microreactor reageert het aanwezige CHP volgens dezelfde reactie als in R3, waardoor de temperatuur van de vloeistofstroom stijgt. Uit de temperatuurstijging van de vloeistofstroom kan het gehalte CHP in de uitstroom van R3 worden berekend. Op een gegeven moment wordt een temperatuurstijging van 7,3 °C gemeten.

De soortelijke warmte van een stof kan worden gedefinieerd als het aantal joule dat nodig is om 1 g stof 1 K in temperatuur te laten stijgen.

- 5 Ga door berekening na of er in dit geval sprake is van explosiegevaar. De reactiewarmte van de reactie is -252 kJ per mol CHP. De soortelijke warmte van de vloeistof is $2,4$ J g^{-1} K $^{-1}$.

Als er 2,0 g CHP in het mengsel aanwezig zou zijn, is het aantal mol CHP = $\frac{2,0 \text{ g}}{152 \text{ g/mol}} =$

$1,32 \cdot 10^{-2}$ mol / 100 g mengsel.

De vrijgekomen warmte is dan $1,32 \cdot 10^{-2}$ mol CHP $\times 252 \cdot 10^3$ J/mol = $3,32 \cdot 10^3$ J

Hierbij hoort een temperatuurstijging van: $3,32 \cdot 10^3$ J = $100 \text{ g} \times 2,4 \text{ J } g^{-1} K^{-1} \times \Delta T K \rightarrow \Delta T = 14 \text{ K } (^{\circ}C)$. Dit is groter dan 7,3 K, dus is er geen sprake van explosiegevaar.

In scheidingsruimten S2, S3 en S4 wordt het mengsel afkomstig uit R3 gescheiden door destillatie. De kookpunten ($p = p_0$) van de stoffen bedragen: propanon (56 °C); cumeen (152 °C); CHP (153 °C); fenol (182 °C); zwavelzuur (330 °C).

- 6 Leg mede met behulp van het blokschema uit tussen welke grenzen de temperatuur in S2 moet liggen.

Uit het blokschema blijkt dat zwavelzuur wordt gescheiden van cumeen, fenol en propanon. De temperatuur moet dus hoger zijn dan 182 °C, want dat is hoger dan de kookpunten van cumeen, fenol en propanon. De temperatuur moet lager zijn dan 330 °C / het kookpunt van zwavelzuur.

Op de wereldmarkt stijgt de vraag naar fenol sneller dan de vraag naar propanon. Om te voorkomen dat propanon afval wordt, heeft het Japanse bedrijf Mitsui een methode ontwikkeld om de ontstane propanon om te zetten tot propeen.

In een extra reactor (R4) verloopt de additie van waterstof aan de C=O groep van het propanon. In een volgende reactor (R5) ontstaan door een elimatiereactie water en propeen uit de in R4 gevormde stof. Na een scheidingsstap (S5) wordt het gevormde propeen weer gebruikt in het cumeen-proces.

- 7 Vul het blokschema aan met de methode die Mitsui heeft ontwikkeld. Geef ontbrekende blokken en pijlen weer en vermeld stofnamen bij de pijlen. Neem aan dat er hierbij geen andere stoffen nodig zijn, dat er geen nevenproducten ontstaan en dat de reacties aflopend zijn.

