

Groene chemie

Je kunt bij een onderwerp komen door op de gewenste rubriek in de inhoud te klikken.

Wil je vanuit een rubriek terug naar de inhoud, klik dan op de tekst van de rubriek waar je bent.

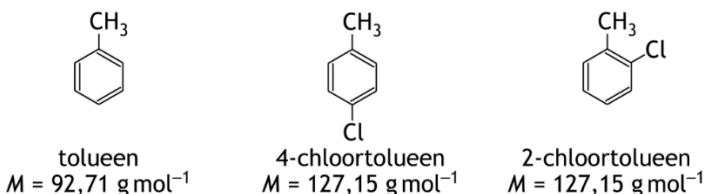
Gewoon scrollen gaat natuurlijk ook.

Achter sommige opgaven staat tussen haakjes extra informatie over aspecten die ook in betreffende opgave voorkomen.

Antwoorden zijn onder de vragen in blauw weergegeven.

Opgave 1 4-chloortolueenproductie

De stof 4-chloortolueen kan worden verkregen door reactie van chloor met toluen. Er treedt een elektrofiële substitutiereactie op. Er treedt ook een nevenreactie op waarbij 2-chloortolueen ontstaat. De molverhouding waarin deze twee stoffen ontstaan, is 2-chloortolueen : 4-chloortolueen = 0,79 : 1,00. Het rendement van de reactie waarbij 4-chloortolueen ontstaat is 92%.



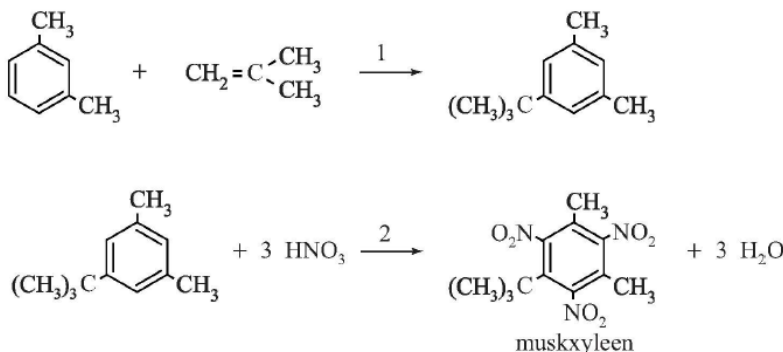
- 1 Bereken de E-factor voor de productie van 4-chloortolueen volgens dit proces.
 $1,79 \text{ mol toluen} \equiv 1,79 \text{ mol Cl}_2 \equiv 1,79 \text{ mol HCl} \equiv 1,00 \text{ mol 4-chloortolueen} \equiv 0,79 \text{ mol 2-chloortolueen}$

$$E\text{-factor} = \frac{1,79 \times 70,90 + 1,79 \times 92,71 - 0,92 \times 127,15}{0,92 \times 127,15} = 1,5$$

Opgave 2 Nitromusks

Muskus is een belangrijke geur die onderdeel uitmaakt van vrijwel alle parfums. Al ver voor het begin van onze jaartelling werd er gehandeld in muskus. Door het geringe aanbod was natuurlijke muskus altijd uiterst kostbaar. De belangrijkste geurstof in muskus is muscon.

De productie van synthetische muscon is nooit van de grond gekomen. Het rendement van de voorgestelde bereidingswijzen was steeds erg laag, mede vanwege het grote aantal tussenstappen. Ook kwamen goedkopere vervangers voor muscon beschikbaar: de nitromusks. De nitromusks zijn 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 $297,3 \text{ g mol}^{-1}$. Neem aan dat bij de zuivering geen stof verloren gaat.

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

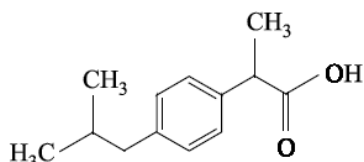
$$\text{massa HNO}_3 = 0,75 \times 3 \times 63,013 = 141,779 \text{ g}$$

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

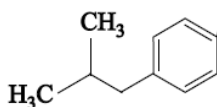
$$E = (304,097 \text{ g} - 196,218 \text{ g}) : 196,218 \text{ g} = 0,55$$

Opgave 3 Synthese van ibuprofen

Ibuprofen is een pijnstillers, 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%.

- 1 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.
Aantal mol iso-butylbenzeen \equiv aantal mol ibuprofen = 50 g : 134,21 g/mol = 0,373 mol
0,373 mol ibuprofen \equiv 0,373 mol \times 206,27 g/mol = 78,8 g
Opbrengst = 0,53 \times 78,8 g = 41 g ibuprofen.

Een ander belangrijk kenmerk van een synthese is de zogenoemde atoomeconomie. De atoomeconomie van de Brown-synthese is vrij laag, namelijk 35%. Op basis van het rendement en de atoomeconomie kan ook de E-factor van de Brown-synthese worden berekend.

- 2 Bereken de E-factor van de Brown-synthese met behulp van het rendement en de atoomeconomie.
Uit m_{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 = $(589,3 \text{ g} - 109,3 \text{ g}) : 109,3 \text{ g} = 4,39$

Opgave 3 Vanadiumproductie

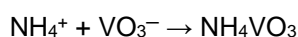
Vanadium wordt gewonnen uit het mineraal vanadinit. De formule van dit mineraal is $\text{Pb}_5(\text{VO}_4)_3\text{Cl}$. Dit mineraal wordt soms ook gebruikt als grondstof voor de bereiding van lood.

- 1 Wat is hoger: het massapercentage vanadium in vanadinit of het massapercentage lood in vanadinit? Geef, zonder een berekening te maken, een verklaring voor je antwoord.
Het aantal mol lood in vanadinit is groter dan het aantal mol vanadium. Bovendien is de atoommassa van lood groter dan die van vanadium. Dus het massapercentage lood in vanadinit is hoger dan het massapercentage vanadium.

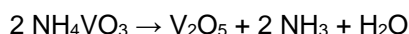
Bij de productie van vanadium uit vanadinit wordt het vanadinit eerst verhit met natriumcarbonaat. Er ontstaat dan natriumvanadaat, NaVO_3 . Dit is de enige Na en V bevattende stof die ontstaat. Behalve natriumvanadaat ontstaan nog drie stoffen. Deze omzetting is geen redoxreactie; er reageren geen andere stoffen dan vanadinit en natriumcarbonaat.

- 2 Geef de reactievergelijking voor deze omzetting.
 $2 \text{Pb}_5(\text{VO}_4)_3\text{Cl} + 3 \text{Na}_2\text{CO}_3 \rightarrow 6 \text{NaVO}_3 + \text{PbCl}_2 + 9 \text{PbO} + 3 \text{CO}_2$

In de tweede stap lost men het natriumvanadaat op en laat men het reageren met een oplossing van ammoniumchloride. Hierbij ontstaat een neerslag van ammoniumvanadaat, NH_4VO_3 :



Vervolgens wordt het ammoniumvanadaat afgescheiden en verhit, waarbij de stof vanadiumpentaoxide, V_2O_5 , ontstaat:



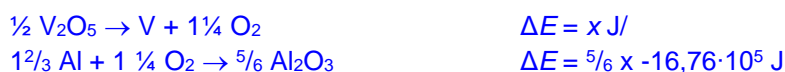
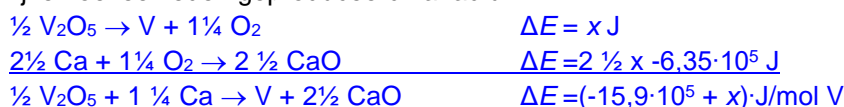
- 3 Leg uit of dit een ontledingsreactie of een redoxreactie is, of allebei of geen van beide. Noteer je antwoord als volgt (maak een keuze tussen 'een' of 'geen'):

Het is een/geen ontledingsreactie, want ... uit één stof ontstaan meerdere nieuwe stoffen.

Het is een/geen redoxreactie, want ... het oxidatiegetal van vanadium is +5, zowel in ammoniumvanadaat als in vanadiumpentaoxide en de oxidatiegetallen van de andere elementen veranderen ook niet.

Tenslotte laat men het vanadiumpentaoxide reageren met een onedel metaal. Hierbij ontstaan vanadium en het oxide van het desbetreffende onedele metaal. Als te gebruiken onedel metaal komen aluminium en calcium in aanmerking. Beide onedele metalen reageren in een exotherme reactie met vanadiumpentaoxide. Om te beoordelen welk metaal wordt gebruikt, kunnen principes uit de groene chemie worden toegepast. Eén van die principes is dat een proces energie-efficiënt wordt ontworpen. Daarvoor moet worden nagegaan in welke reactie de meeste warmte vrijkomt. Ook andere principes uit de groene chemie kunnen worden gebruikt om een keuze te maken.

- 4 In welke reactie komt meer warmte vrij: in de reactie van vanadiumpentaoxide met aluminium of in de reactie van vanadiumpentaoxide met calcium? Geef een verklaring voor je antwoord. Ga uit van gelijke hoeveelheden geproduceerd vanadium.



Per mol V komt er met Ca $(-15,9 \cdot 10^5 + x) \text{ J/mol V}$ en met Al $(-14,0 \cdot 10^5 + x) \text{ J/mol V}$ vrij. In de reactie met Ca komt dus meer warmte vrij.

- 5 Welk van beide genoemde onedele metalen zou jouw voorkeur hebben? Maak je keuze op basis van een ander principe uit de groene chemie dan energie-efficiëntie. Ondersteun je keuze met een berekening. Ga ervan uit dat in beide gevallen de reactie met 100% rendement plaatsvindt en dat de beschikbaarheid van grondstoffen niet uitmaakt.



$$\text{atoomec}_{\text{Al}} = \frac{6 \times 50,94}{3 \times 181,9 + 10 \times 26,98} \times 100\% = 37,48\%$$

$$\text{atoomec}_{\text{Ca}} = \frac{2 \times 50,94}{181,9 + 5 \times 40,08} \times 100\% = 26,65\%$$

Op basis van de atomeconomie heeft de reactie met Al de voorkeur.

$$E\text{-factor}_{\text{Al}} = \frac{3 \times 181,9 + 10 \times 26,98 - 6 \times 50,94}{6 \times 50,94} = 1,668$$

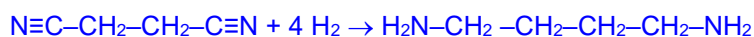
$$E\text{-factor}_{\text{Ca}} = \frac{181,9 + 5 \times 40,08 - 2 \times 50,94}{2 \times 50,94} = 2,752$$

Op basis van de E-factor heeft ook de reactie met Al de voorkeur.

Opgave 3 De grondstoffen van stanyl®

Stanyl® is een hittebestendig polymeer dat bij ongeveer 300 °C vloeibaar wordt. Het is een condensatiepolymeer van de monomeren hexaandizuur en butaan-1,4-diamine. Het butaan-1,4-diamine wordt in een aantal stappen bereid. In de laatste stap wordt butaan-1,4-diamine bereid uit waterstof en butaan-1,4-dinitril ($\text{N}\equiv\text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{C}\equiv\text{N}$).

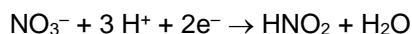
- 1 Bereken hoeveel m^3 waterstof ($T = 298 \text{ K}$, $p = p_0$) minimaal nodig is om 1,0 ton butaan-1,4-diamine te produceren uit butaan-1,4-dinitril. Een ton is 10^3 kg .



1 mol butaan-1,4-diamine \equiv 4 mol H_2

1 ton butaan-1,4-diamine \equiv 1,0 ton $\times 10^6$ g/ton : 88,16 g/mol \equiv 4 \times 1,0 $\cdot 10^6$: 88,16 mol $\text{H}_2 = 4,537 \cdot 10^4$ mol \equiv 4,537 $\cdot 10^4$ mol $\times 2,45 \cdot 10^{-2}$ mol/ $\text{m}^3 = 1,1 \cdot 10^3$ m^3

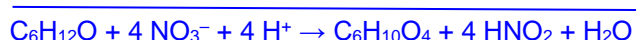
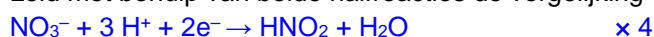
Hexaandizuur kan op meerdere manieren worden bereid. De bereiding van hexaandizuur door cyclohexanol ($\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}$) te laten reageren met geconcentreerd salpeterzuur noemen we in deze opgave proces 1. De halfreactie van het salpeterzuur is hieronder gegeven.



- 2 Geef de vergelijking van de halfreactie van de omzetting van cyclohexanol tot hexaandizuur. Gebruik molecuulformules. In de vergelijking van de halfreactie komen ook H_2O en H^+ voor.



- 3 Leid met behulp van beide halfreacties de vergelijking van de totaalreactie voor proces 1 af.



In proces 1 wordt HNO_2 gevormd. Deze stof ontleedt bij de procesomstandigheden tot onder andere NO . De atomefficiëntie (atoomeconomie) van proces 1 bedraagt 41,49%.

Een andere methode om hexaandizuur te maken (proces 2) is de reactie van cyclohexeen met waterstofperoxide (H_2O_2). Cyclohexeen reageert hierbij in een molverhouding van 1 : 4 met waterstofperoxide. Behalve hexaandizuur ontstaat hierbij alleen water.

- 4 Bereken de atomefficiëntie (atoomeconomie) van proces 2.

$$\text{atoomeconomie} = \frac{\text{massa product}}{\text{massa beginstoffen}} \times 100\% = \frac{146,14 \text{ g/mol}}{(82,14 + 4 \times 32,02) \text{ g/mol}} \times 100\% = 66,97\%$$

- 5 Geef twee argumenten die gebruikt kunnen worden als een keuze tussen proces 1 en 2 moet worden gemaakt. Geef argumenten gebaseerd op informatie uit deze opgave en/of Binas-tabel 97A.
- De atomefficiëntie (atoomeconomie) van proces 2 is hoger dus proces 2 verdient de voorkeur.
 - In proces 1 wordt salpeterzuur gebruikt. Dit is een sterk zuur / sterke oxidator. Dit is gevaarlijk bij gebruik dus proces 2 verdient de voorkeur.
 - In proces 2 wordt waterstofperoxide gebruikt. Dit levert explosiegevaar als het wordt verhit dus proces 1 verdient de voorkeur.
 - In proces 1 wordt cyclohexeen gebruikt. Cyclohexeen geeft gevaarlijke dampen dus proces 2 verdient de voorkeur.
 - In proces 1 ontstaat NO . Dit geeft gevaarlijke dampen / reageert heftig met brandbare stoffen dus proces 2 verdient de voorkeur.
 - In proces 2 ontstaat alleen water als afval, dus proces 2 verdient de voorkeur.