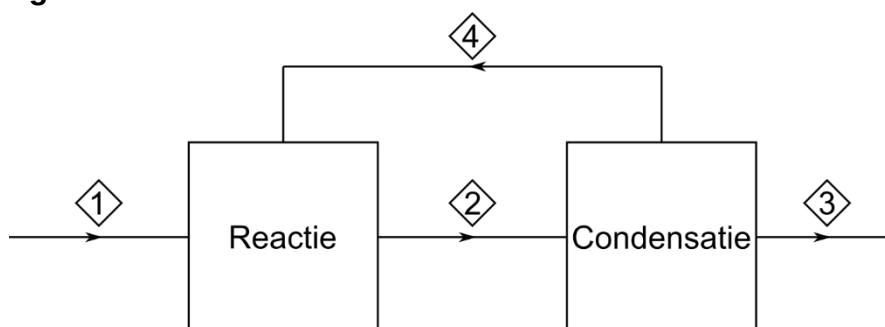


## Ammoniaksynthese

Bekijk de schematische voorstelling van een ammoniakfabriek in figuur 1.

figuur 1



In de reactor wordt waterstof en stikstof omgezet in ammoniak. Na de evenwichtsreactie wordt het ammoniak afgescheiden door het mengsel te laten condenseren door het af te koelen in een condensor.

Gegeven:

- In de reactor wordt 20% van de ingevoerde waterstof en stikstof omgezet in ammoniak.
- Stroom 2 bevat 72 kmol waterstof en 24 kmol stikstof.
- De condensor scheidt alle ammoniak van de overige gassen.

1 Geef de reactievergelijking voor de reactie die optreedt in de reactor.

2 Neem volgend schema over en vul het in:

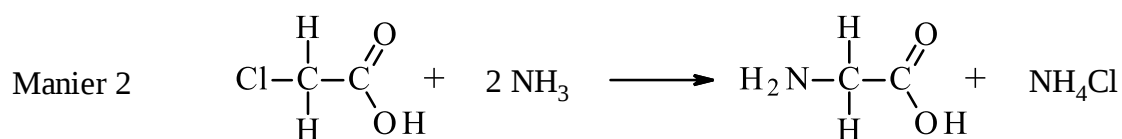
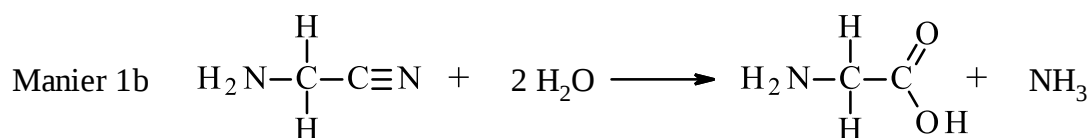
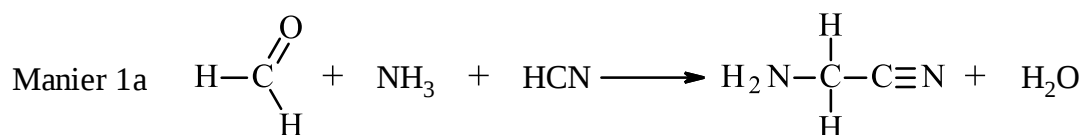
| kmol            | Stroom 1 | Stroom 2 | Stroom 3 | Stroom 4 |
|-----------------|----------|----------|----------|----------|
| H <sub>2</sub>  |          |          |          |          |
| N <sub>2</sub>  |          |          |          |          |
| NH <sub>3</sub> |          |          |          |          |

3 Leg uit waarom ammoniak zich gemakkelijk laat scheiden van waterstof en stikstof in een condensor.

## Synthese van aminozuren

---

Het aminozuur glycine kan industrieel op twee manieren gemaakt worden. Manier 1 bestaat uit twee stappen (a en b) en kan ook gebruikt worden voor de productie van ingewikkeldere aminozuren. Manier 1 maakt onder andere gebruik van blauwzuur (HCN). Manier 2 wordt veel gebruikt voor de productie van simpele aminozuren als glycine.



- 4 Geef met behulp van uitgangspunten van groene chemie (Binas 97A) twee argumenten waarom je zou kiezen voor manier 2.

## Ananasgeur

---

Mark wil een geurstof maken die naar ananas ruikt. Volgens zijn practicumbegeleider moet hij dan een ester maken van ethanol en butaanzuur. Mark voert deze proef uit met 15 mL butaanzuur en 20 mL ethanol.

- 5 Geef de reactievergelijking voor deze verestering in structuurformules.

Wanneer Mark klaar is met de verestering, wil hij onzuiverheden wegwassen in een scheitrechter (zie figuur 1). Het mengsel bevat namelijk nog wat van de beginstoffen ethanol en butaanzuur. Hij doet het reactiemengsel in de scheitrechter en voegt een flinke hoeveelheid water en wasbenzine toe.

- 6 Leg uit in welke laag (bovenste of de onderste) de beginstoffen zich bevinden en in welke laag de ananasgeurstof.
- 7 Hoe heet deze scheidingsmethode?

Nadat hij de juiste laag heeft afgetapt, moet hij de ester nog scheiden van het oplosmiddel waarin het is opgelost.

- 8 Welke scheidingsmethode kan Mark hiervoor gebruiken?
- 9 Zet deze drie stappen (reactie en twee scheidingen) in een blokschema.

Nadat Mark zijn gewenste ester zuiver in handen heeft, berekent hij het rendement van zijn experiment. Hij zet de gegevens waarmee hij heeft gewerkt op een rijtje (zie aantekeningen in figuur 1).

- 10 Bereken het rendement van zijn experiment.

## figuur 1

### Butaanzuur:

Formule:  $C_4H_8O_2$

Dichtheid:  $0,9577 \text{ g/mL}$

Molmassa:  $88,12 \text{ g/mol}$

Gebruikt:  $15 \text{ mL}$

### Ethanol:

Formule:  $C_2H_6O$

Dichtheid:  $0,80 \text{ g/mL}$

Molmassa:  $46,068 \text{ g/mol}$

Gebruikt:  $20 \text{ mL}$

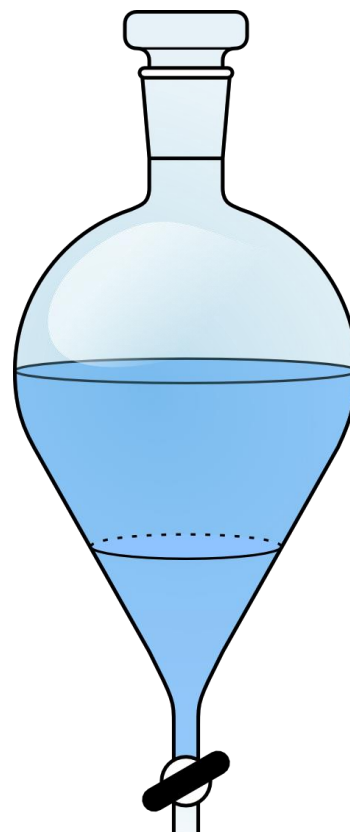
### Product:

Formule:  $C_6H_{12}O_2$

Dichtheid:  $0,88 \text{ g/mL}$

Molmassa:  $116,16 \text{ g/mol}$

Opbrengst:  $16,83 \text{ g}$

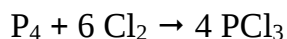


## Fosfortrichloride

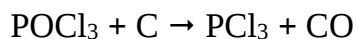
Atoomeconomie is vooral handig om twee verschillende productiemethoden met elkaar te vergelijken.

Fosfortrichloride kan bijvoorbeeld op twee manieren worden geproduceerd:

Door reactie van witte fosfor met chloor:



Door carbothermische reductie van fosforylchloride:

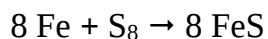


- 11 Bereken de atoomeconomie van proces 1.
- 12 Bereken de atoomeconomie van proces 2.

## IJzersulfide

---

Tom neemt een reageerbuis met 8,0 mmol ijzerpoeder en 1,0 mmol zwavelpoeder. Bij verhitten treedt de volgende reactie op:



Na reactie heeft Tom 0,68 g ijzer(II)sulfide gekregen.

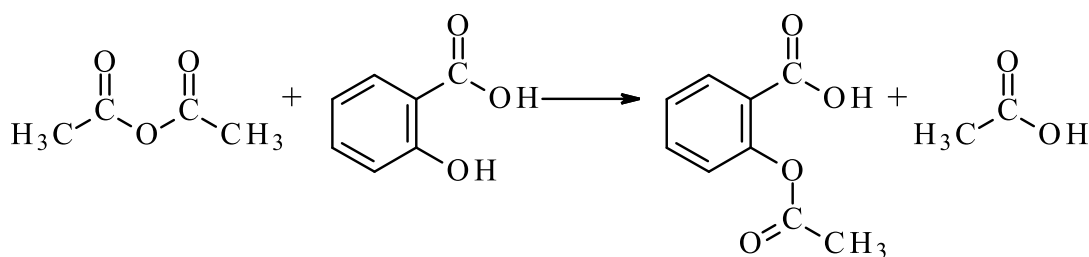
- 13 Leg uit dat de atomeconomie van deze reactie 100% is.
- 14 Bereken het rendement van zijn experiment.
- 15 Bereken de E-factor van Tom's experiment.

## Aspirine

---

Aspirine is een medicijn dat vrij gemakkelijk gemaakt kan worden. De grondstoffen voor de synthese zijn azijnzuuranhydride en salicylzuur. De reactievergelijking in structuurformules zie je in figuur 1.

figuur 1



Een molecuul azijnzuuranhydride wordt gevormd uit twee moleculen azijnzuur. Hierbij wordt een molecuul van stof X afgesplitst.

- 16 Geef de reactievergelijking in molecuulformules voor de vorming van azijnzuuranhydride uit azijnzuur. Geef hierbij ook de molecuulformule van stof X.
- 17 Wat voor een soort reactie is dit?

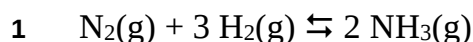
Aspirine kan op basis van karakteristieke groepen worden ingedeeld bij twee klassen van organische verbindingen.

- 18 Tot welke klassen organische stoffen kan aspirine worden gerekend?

Bij de synthese, zoals die hierboven is beschreven, kan een rendement worden gehaald van 90%.

- 19 Bereken de atoomeconomie van deze reactie.
- 20 Bereken de E-factor van deze synthese bij een rendement van 90%.

## Uitwerkingen



2 Dit is een leuke puzzel. Begin bij stroom 2:

Volgens de opgave wordt 20% van het waterstof dat de reactor ingaat omgezet in ammoniak. Als er dus 72 kmol overblijft, dan is deze 72 kmol gelijk aan 80% van wat er in gegaan is.

Hoeveel is de reactor dan ingegaan?

$$\text{H}_2: \frac{72}{0,80} = 90 \text{ kmol}$$

Er gaat dus 90 kmol de reactor in. Dit betekent echter niet dat stroom 1

90 kmol aan waterstof bevat! Want wat gebeurt er met de 72 kmol waterstof die in stroom 2 zit? Juist! Die wordt via stroom 4 teruggeleid in de reactor.

Stroom 1 bevat dus  $90 - 72 = 18$  kmol waterstof.

Aangezien de condensor alle ammoniak scheidt van de overgebleven gassen, bevat stroom 3 geen waterstof.

Doe dezelfde berekening voor stikstof en je tabel ziet er als volgt uit:

| kmol            | Stroom 1 | Stroom 2 | Stroom 3 | Stroom 4 |
|-----------------|----------|----------|----------|----------|
| H <sub>2</sub>  | 18       | 72       | 0        | 72       |
| N <sub>2</sub>  | 6        | 24       | 0        | 24       |
| NH <sub>3</sub> |          |          |          |          |

Nu ammoniak doorrekenen. Er is 90 kmol waterstof de reactor ingegaan.

Wanneer daarvan 20% reageert tot ammoniak, reageert er dus  $0,20 \cdot 90 = 18$  kmol waterstof. Volgens de reactievergelijking van opgave 1 ontstaat daaruit

$\frac{2}{3} \cdot 18 = 12$  kmol ammoniak (molverhouding is 3 : 2). Stroom 2 bevat dus

12 kmol ammoniak en aangezien dit door de condensor wordt afgescheiden, gaat al deze ammoniak naar stroom 3. Stroom 1 bevat geen ammoniak, dus:

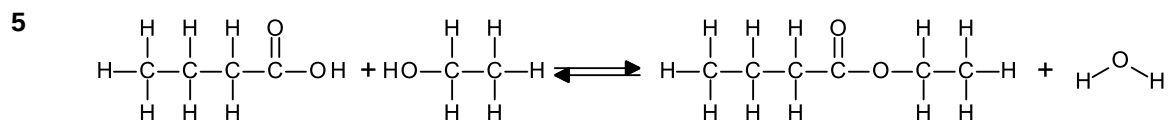
| kmol            | Stroom 1 | Stroom 2 | Stroom 3 | Stroom 4 |
|-----------------|----------|----------|----------|----------|
| H <sub>2</sub>  | 18       | 72       | 0        | 72       |
| N <sub>2</sub>  | 6        | 24       | 0        | 24       |
| NH <sub>3</sub> | 0        | 12       | 12       | 0        |

3 H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub> en NH<sub>3</sub> zijn alle drie moleculaire stoffen. H<sub>2</sub> en N<sub>2</sub> hebben een laag kookpunt, want de vanderWaalsbindingen zijn zwak (kleine moleculen).

Ammoniak heeft daarentegen NH-groepen en kan daardoor waterstofbruggen vormen. Hierdoor ligt het kookpunt van ammoniak beduidend hoger dan dat

van waterstof en stikstof. Vandaar dat in de condensor het ammoniak wel condenseert en de overige twee gassen niet.

- 4 Argument 8: Manier twee maakt gebruik van minder reactiestappen  
 Argument 3: Manier een gebruikt het giftige blauwzuur (Binas 96A) en dat doet manier twee niet.



- 6 De beginstoffen hebben beide een OH-groep, kunnen dus waterstofbruggen vormen met water, dus zijn hydrofiel en lossen op in water. Het product heeft geen OH-groepen en is hydrofoob en lost niet op in water.

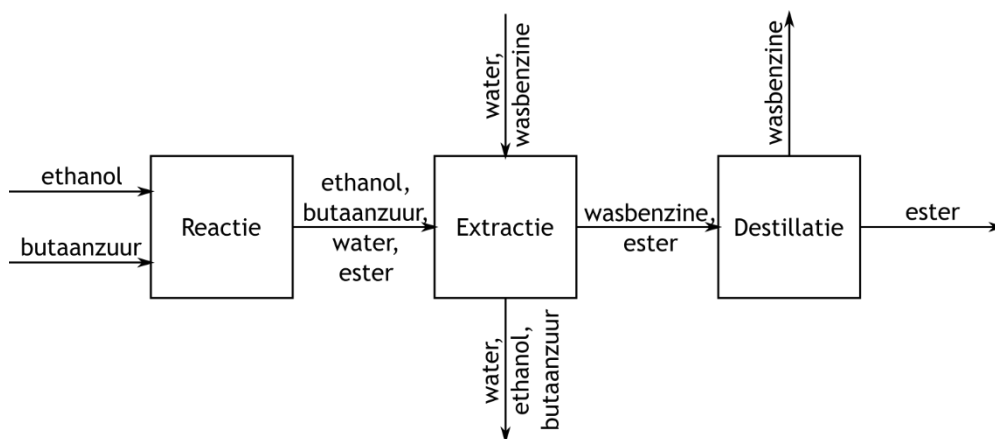
De bovenste laag in de scheitrechter is wasbenzine, de onderste laag is water (de dichtheid van water is groter dan die van wasbenzine). Wasbenzine is apolair, water polair.

De bovenste laag (wasbenzine) bevat het apolaire, hydrofobe product.  
 De onderste laag (water) bevat de polaire, hydrofiele beginstoffen.

- 7 Verschil in oplosbaarheid. De ene stof lost wel op in water, de ander niet.  
 Dit heet *extractie*.

- 8 Het is een mengsel van vloeistoffen: *destillatie*

- 9 Blokschema:



- 10 Eerst kijken over er sprake is van een overmaat/ondermaat, dus beginstoffen omrekenen naar mol:



$$\rho = 0,80 \text{ g} \cdot \text{mL}^{-1}$$

$$m = \rho \cdot V = 0,80 \cdot 20 = 16 \text{ g}$$

$$M = 46,068 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$n = \frac{m}{M} = \frac{16}{46,068} = 0,35 \text{ mol}$$



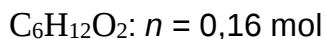
$$\rho = 0,9577 \text{ g} \cdot \text{mL}^{-1}$$

$$m = \rho \cdot V = 0,9577 \cdot 15 = 14 \text{ g}$$

$$M = 88,12 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$n = \frac{m}{M} = \frac{14}{88,12} = 0,16 \text{ mol}$$

Volgens de reactievergelijking (zie opgave 1) reageren butaanzuur en ethanol in de molverhouding 1 : 1, dus is ethanol in overmaat. De ondermaat bepaalt hoeveel product er kan ontstaan, dus er kan maximaal 0,16 mol ester ontstaan. Dit omrekenen naar gram en vergelijken met de werkelijke opbrengst:



$$M = 116,16 \text{ g/mol}$$

$$m = n \cdot M = 0,163 \cdot 116,16 = 19 \text{ g}$$

$$\text{Rendement} = \frac{\text{werkelijke opbrengst}}{\text{theoretische opbrengst}} \times 100\% = \frac{16,83}{19} \times 100\% = \underline{\underline{89\%}}$$

11  $AE = \frac{549,28}{123,88 + 425,4} \cdot 100\% = \underline{\underline{100,0\%}}$

12  $AE = \frac{137,32}{153,32 + 12,01} \cdot 100\% = \underline{\underline{83,06\%}}$

- 13 Alle atomen van de beginstoffen komen in het product terecht. Er zijn geen bijproducten.

- 14 Tom mag 8,0 mmol product verwachten (geen overmaat):

$$\text{FeS: } n = 8,0 \text{ mmol} = 0,0080 \text{ mol}$$

$$M = 87,91 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$$

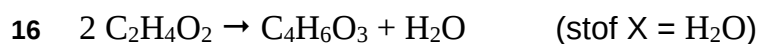
$$m = n \cdot M = 0,0080 \cdot 87,91 = 0,70 \text{ g}$$

Tom krijgt echter maar 0,68 g, dus het rendement is  $\frac{0,68}{0,70} \cdot 100\% = \underline{\underline{97\%}}$

15  $m_{\text{beginstoffen}} = 8 \cdot 55,85 + 8 \cdot 32,06 = 703,28 \text{ u}$

$$m_{\text{werk.opbr}} = 0,97 \cdot 703,28 = 682,18 \text{ u}$$

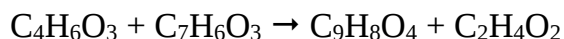
$$E = \frac{703,28 - 0,97 \cdot 703,28}{0,97 \cdot 703,28} = \underline{\underline{0,031}}$$



17 Er wordt water afgesplitst: condensatie

18 Carbonzuren en esters

19 In molecuulformules:



$$AE = \frac{180,154}{102,088 + 138,118} \cdot 100\% = \underline{\underline{75,00\%}}$$

20  $E = \frac{240,206 - 0,90 \cdot 180,154}{0,90 \cdot 180,154} = \underline{\underline{0,48}}$