Toets hfst 14 20-11-2015

Veel succes

TDA

Organische verbindingen waarvan de moleculen NO2 groepen bevatten, worden nitroverbindingen genoemd. Nitroverbindingen kunnen reageren met waterstof. De NO2 groep wordt daarbij omgezet tot een NH2 groep. Zo kan nitromethaan met waterstof worden omgezet tot methaanamine:

CH3 ─ NO2 (g) + 3H2 (g) → CH3 ─ NH2 (g) + 2H2O (l) reactie 1

Reactie 1 is een sterk exotherme reactie

1 3p Bepaal met behulp van de vormingsenergieën de reactiewarmte van deze reactie.
De vormingsenergie van nitromethaan is -0,81 • 105 J/mol

Reactie 1 verloopt in drie opeenvolgende stappen, die hieronder zijn weergegeven:

stap 1: CH3 ─ NO2 + H2 → CH3 ─ N = O + H2O

stap 2: de additiereactie van waterstof met CH3 ─ N = O

stap 3: de vorming van CH3 – NH2

2 3p Geef de reactievergelijkingen van de stappen 2 en 3. Noteer hierin de organische stoffen in structuurformules. Noteer je antwoord als volgt:

reactievergelijking van stap 2: …

reactievergelijking van stap 3: …

3 2p Bereken de atoomeconomie van reactie 1

De reactie van nitroverbindingen met waterstof wordt in de industrie onder andere toegepast bij de bereiding van de stof die wordt aangeduid met de afkorting TDA.

De structuurformule van TDA is hieronder weergegeven:

TDA is een belangrijke grondstof voor polyurethanen. Polyurethanen worden onder andere toegepast in matrassen, sportschoenen en PUR schuim.

Bij de industriële bereiding van TDA wordt een grondstof gebruikt die wordt aangeduid met de afkorting DNT. Deze bereiding verloopt volgens reactie 2:

 

Reactie 2 is evenals reactie 1 exotherm. Het warmte-effect van dit soort reacties wordt (vrijwel) uitsluitend veroorzaakt door de omzetting van NO2 groepen tot NH2 groepen.

 Het is in de industrie gebruikelijk om hoeveelheden stof niet in mol uit te drukken maar in kg of in ton.

4 3p Leg uit of de hoeveelheid warmte die vrijkomt bij de bereiding van een kg TDA volgens reactie 2 groter of kleiner is dan of (ongeveer) gelijk is aan de hoeveelheid warmte die vrijkomt bij de bereiding van een kg methaanamine volgens reactie 1.

De researchafdeling van een chemisch bedrijf heeft een nieuw continu proces ontworpen om TDA te bereiden volgens reactie 2. Hieronder is dit nieuwe proces in een blokschema weergegeven.



R = Reactor S = Scheider W = Warmtewisselaar

Om veiligheidsredenen moet de temperatuur in de reactor laag worden gehouden. Om dit te realiseren wordt steeds een kleine hoeveelheid DNT aan een mengsel van TDA en water toegevoegd. Dit mengsel wordt samen met de waterstof in de reactor gepompt.

Het mengsel van TDA en water treedt op als warmtebuffer. Het neemt de warmte op die bij de reactie vrijkomt en staat deze weer af in de warmtewisselaar. Een klein deel van het mengsel van TDA en water wordt bij afgevoerd; het grootste gedeelte wordt teruggeleid in de reactor.

Bij een bepaalde opzet van dit continue proces wordt per minuut 25,0 g DNT gemengd met een kg van het mengsel van TDA en water.

5 5p Bereken hoeveel gram van het mengsel van TDA en water dat uit de warmtewisselaar komt, bij per minuut moet worden afgevoerd bij A. Ga er bij de berekening vanuit dat de molverhouding TDA : water in dit continue proces gelijk blijft.

 **Vetalcoholen**

Shampoos bevatten zogenoemde synthetische zepen. Een voorbeeld van een (synthetische) zeep die in shampoos voorkomt, is natriumlaurylsulfaat (C12H25OSO3─ Na+)
Laurylwaterstofsulfaat wordt bereid uitgaande van laurylalcohol (C12H­­25OH). Alcoholen met 10 of meer C atomen per molecuul, zoals laurylalcohol, worden vetalcoholen genoemd. Vetalcoholen kan men bereiden uitgaande van bijvoorbeeld kokosolie. Kokosolie bestaat uit glyceryltri esters van carbonzuren die ongeveer 12 C atomen per molecuul bevatten. Een voorbeeld van zo'n glyceryltri-ester is:

De industriële bereiding van vetalcoholen is een continu proces dat als volgt in een (nog onvolledig) blokschema 1 kan worden weergegeven:

**

 Blokschema 1

In reactor 1 reageren de glyceryltri esters met methanol dat in overmaat wordt toegevoerd:

 glyceryltri esters + methanol → methylesters + glycerol

In reactor 2 reageren de gevormde methylesters met waterstof die in overmaat wordt toegevoerd. Een voorbeeld van een reactie die daarbij optreedt, is:

In reactor 2 ontstaan ook kleine hoeveelheden van zogenoemde wasesters. Een voorbeeld van zo'n wasester is:

De ontstane wasesters worden na afscheiding teruggeleid naar reactor 2 waar ze worden omgezet in vetalcoholen. Het hele, continue proces kan als volgt schematisch worden weergegeven:

6 3p  Maak het blokschema 1 compleet door het plaatsen van lijnen. Zet bij de nieuwe lijnen ook bijschriften.

1 CH­3─NO2 (g) → C (s) + 1,5 H2 (g) + 0,5 N2 (g) + O2 (g) ∆ E = 0,81 • 105 J / mol

 H2 (g) → H2 (g) ∆E = 0

3 C (s) + 2,5 H2­ (g) + 0,5N2 (g) → CH3─NH2 ∆E = -0,23 • 105 J/ mol

 H2 (g) + 0,5 O2 (g) → H2O (l) ∆E = -2,42 • 105 J/ mol

 ∆Ereactie = 0,81 • 105 + -0,23 • 105 + (2 • -2,420020• 105) = -5,14 • 105 J

2 reactievergelijking van stap 2: CH3 ─ N = O + H2 → CH3 ─ NH ─ OH

3 reactievergelijking van stap 3: CH3 ─ NH ─ OH + H2 → CH3 ─ NH2 + H2O

3 M (nitromethaan) = 12,01 + 3 • 1,008 + 14,01 + 2 • 16,00 = 61,04 g / mol

 M (methaanamine) = 12,01 + 3 • 1,008 + 14,01 + 2 • 1,008 = 31,06 g / mol

2 M(H2) = 2,016
 atoom economie = • 100 = • 100 = 46,30 %

4 3 Bij reactie 2 worden 2 NO2 groepen vervangen dus zal de warmte die vrijkomt bij 1 mol bij reactie 2 2x zo groot zijn. De mol massa van DNT is echter meer dan 2x zo groot dan bij nitromethaan. Dus het aantal mol dat in een kg DNT zit is meer dan 2x zo klein als bij methaanamine. Dus zal er uitgaande van 1k g minder energie vrijkomen bij reactie 2 dan bij reactie 1.

5 5 M(DNT) = 7 ∙ 12,01 + 4 ∙ 16,00 + 2 ∙ 14,01 + 6 ∙ 1,008 = 182, 1 1

M(TDA) = 7 ∙ 12,01 + 2 ∙ 14,01 + 10 ∙ 1,008 = 12,2

25,0 g ≙ = 0,137 mol DNT 1 Wil het TDA zich niet ophopen in het proces moet alle gevormde TDA afgevoerd worden

Alle DNT wordt omgezet in TDA

Dus er moet 0,137 mol TDA afgevoerd worden

verhouding TDA : H2O moet steeds 1 : 4 (volgens de reactie) zijn omdat anders de verhouding niet gelijk blijft dus 0,137 • 4 • 18,02 g water 1

dus er moet 4 ∙ 0,137 = 0,549 mol H2O afgevoerd worden

Dat is 0,137 ∙ 122,2 + 0,549 ∙ 18,02 = 26,6 g mengsel moet worden afgevoerd 1

6 3

**TDA**

**Maximumscore 3**

**1**􀂆 Een voorbeeld van een juiste berekening is:

– (– 0,81·105) + (– 0,23·105) + 2 × (– 2,86·105) = – 5,14·105 (J mol–1).

• juiste verwerking van de vormingswarmte van nitromethaan: – (– 0,81·105) (J mol–1) **1**

• juiste verwerking van de vormingswarmte van methaanamine: + (– 0,23·105) (J mol–1) **1**

• juiste verwerking van de vormingswarmte van water: + 2 × (– 2,86·105) (J mol–1) en juiste

sommering **1**

Indien als enige fout alle plus- en mintekens zijn verwisseld **2**

Indien in een overigens juist antwoord de factor 105 niet is opgenomen **2**

**Maximumscore 3**

**2** 􀂆 reactievergelijking van stap 2: CH3 ─ N = O + H2 → CH3 ─ NH ─ OH

 reactievergelijking van stap 3: CH3 ─ NH ─ OH + H2 → CH3 ─ NH2

• juiste reactievergelijking van stap 2 **1**

• in de reactievergelijking van stap 3: de formule van het reactieproduct van stap 2 voor de

pijl en CH3– NH2 na de pijl **1**

• in de reactievergelijking van stap 3: H2 voor de pijl en H2O na de pijl **1**

*Opmerking*

*Wanneer in een overigens juist antwoord het reactieproduct van stap 2 is weergegeven als*

*CH3– NHOH, dit goed rekenen.*

**Maximumscore 3**

**4** 􀂆 Een juiste uitleg leidt tot de conclusie dat de hoeveelheid warmte die vrijkomt bij de

bereiding van een kg TDA volgens reactie 2 kleiner is dan de hoeveelheid warmte die

vrijkomt bij de bereiding van een kg methaanamine volgens reactie 1.

• notie dat bij de vorming van een mol TDA volgens reactie 2 twee keer zoveel NO2

groepen reageren als bij de vorming van een mol methaanamine volgens reactie 1 (dus zal de

hoeveelheid warmte die per mol vrijkomt in reactie 2 (ongeveer) twee maal zo groot zijn als

in reactie 1) **1**

• de massa van een mol DNT is meer dan twee maal zo groot als de massa van een mol

methaanamine **1**

• conclusie **1**

of

• in methaanamine komt één NO2 groep per C atoom voor en in DNT is dat één NO2 groep

per drie C atomen **1**

• dus per kg methaanamine zijn er meer NO2 groepen dan per kg DNT **1**

• conclusie **1**

*Opmerking*

*Wanneer een juiste conclusie is gebaseerd op een juiste berekening, dit goed rekenen.*

**Maximumscore 5**

**17** 􀂆 Een juiste berekening leidt afhankelijk van de berekeningswijze tot de uitkomst 26,6 of 26,7

(gram per minuut).

• berekening van de massa van een mol DNT (bijvoorbeeld via Binas-tabel 104 (4e druk) of

99 (5e druk)): 182,1 g **1**

• berekening van het aantal mol DNT dat per kg vloeistofmengsel de reactor wordt ingeleid:

25,0 (g) delen door de massa van een mol DNT **1**

• omrekening van het aantal mol DNT dat per kg vloeistofmengsel de reactor wordt ingeleid

naar het aantal mol waterstof dat daarmee reageert: vermenigvuldigen met 6 **1**

• omrekening van het aantal mol waterstof dat met het ingeleide DNT reageert naar het

aantal g waterstof: vermenigvuldigen met de massa van een mol waterstof (bijvoorbeeld via

Binas-tabel 104 (4e druk) of 99 (5e druk): 2,016 g) **1**

• berekening van de massa in g van het mengsel van TDA en water dat bij moet worden

afgevoerd: de som van het aantal g DNT dat per kg vloeistofmengsel de reactor wordt

ingeleid en het aantal g waterstof dat daarmee reageert **1**

of zie uitwerkingen