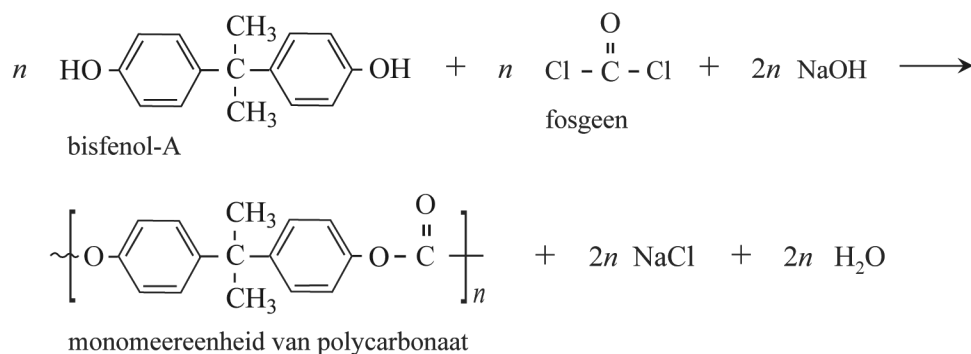


Tenzij anders vermeld, is er sprake van standaardomstandigheden:
 $T = 298 \text{ K}$ en $p = p_0$.

Groene chemie met dimethylcarbonaat

Polycarbonaat is een veelgebruikte kunststof die wordt verwerkt in de omhulsels van elektronische apparatuur en in auto's. Begin deze eeuw werd het grootste deel van alle polycarbonaat nog geproduceerd door middel van de condensatie-polymerisatie van bisfenol-A en fosgeen. De totaalvergelijking van alle reacties in dit productieproces van polycarbonaat is in figuur 1 vereenvoudigd weergegeven.

figuur 1



Bij dit productieproces worden de beginstoffen gemengd volgens de molverhoudingen in figuur 1. De molaire massa's van de stoffen uit figuur 1 zijn in de tabel gegeven.

tabel

stof	molaire massa (g mol ⁻¹)
bisfenol-A	228
fosgeen	98,9
NaOH	40,0
monomeereenheid polycarbonaat	254
NaCl	58,4
H ₂ O	18,0

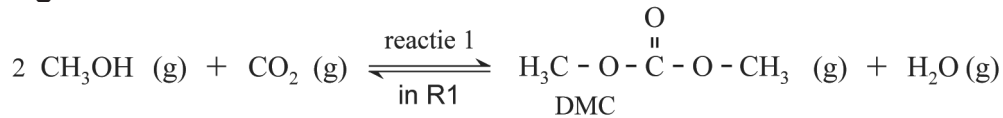
Dit productieproces heeft een rendement van 92%.

2p 1 Bereken de E-factor van dit productieproces van polycarbonaat.

Bij dit proces komt een grote hoeveelheid afval vrij. In een studie is een nieuw productieproces onderzocht dat minder afval veroorzaakt. In het onderzochte proces wordt eerst dimethylcarbonaat (DMC) uit methanol gevormd.

Op de uitwerkbijlage bij vraag 7 is het blokschema van het nieuwe proces onvolledig weergegeven. In figuur 2 is reactie 1 gegeven, dit is de reactie die in reactor 1 (R1) verloopt.

figuur 2



De reactiewarmte van de reactie naar rechts is $+0,67 \cdot 10^5 \text{ J}$ per mol DMC. De vormingswarmte van $\text{CH}_3\text{OH} (\text{g})$ bedraagt $-2,02 \cdot 10^5 \text{ J mol}^{-1}$.

3p **2** Bereken de vormingswarmte van DMC.

Om een zo hoog mogelijke omzettingssnelheid te bereiken, is in het onderzoek gebruikgemaakt van een katalysator voor reactie 1.

Op de uitwerkbijlage is in diagram 1 het energiediagram van de vorming van DMC zonder katalysator onvolledig weergegeven.

Daarnaast is in diagram 2 het energiediagram van de vorming van DMC mét katalysator onvolledig weergegeven. In beide diagrammen ontbreken de energieniveaus van de geactiveerde toestand en die van de reactieproducten. Beide diagrammen zijn op dezelfde schaal weergegeven.

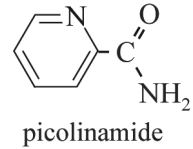
3p **3** Laat zien welke invloed de katalysator heeft op reactie 1, door op de uitwerkbijlage in beide energiediagrammen de ontbrekende energieniveaus met bijbehorende bijschriften te tekenen.

2p **4** Geef de evenwichtsvoorwaarde voor reactie 1. Gebruik DMC als aanduiding voor dimethylcarbonaat.

In R1 wordt ook continu de stof cyanopyridine toegevoegd. Deze stof reageert met het in reactie 1 gevormde water. De toevoer van cyanopyridine is zo afgesteld dat geen water R1 verlaat.

2p **5** Leg uit dat het toevoegen van de stof cyanopyridine het rendement van de vorming van dimethylcarbonaat verhoogt.

In R1 reageert 1 mol cyanopyridine met 1 mol water, waarbij uitsluitend 1 mol picolinamide wordt gevormd. De structuurformule van picolinamide is hiernaast weergegeven.



In scheidingsruimte 1 (S1) wordt het reactiemengsel gescheiden door middel van destillatie. De overmaat CO_2 en methanol wordt als twee aparte stofstromen gerecirculeerd naar R1. De overige stoffen worden gescheiden in afzonderlijke stromen, te weten DMC, cyanopyridine en picolinamide. In R1 ontstaan ook NH_3 en andere bijproducten, die de fabriek verlaten als afval.

De cyanopyridine en picolinamide hebben de hoogste kookpunten van de aanwezige stoffen. Het picolinamide verlaat S1 aan de onderzijde omdat het een hoger kookpunt heeft dan cyanopyridine.

4p **6** Voer de volgende opdrachten uit:

- Teken de structuurformule van cyanopyridine.
- Verklaar dat het kookpunt van picolinamide hoger is dan dat van cyanopyridine. Gebruik hierbij begrippen op microniveau.

Het in R1 ontstane picolinamide wordt in reactor 4 volledig omgezet tot water en cyanopyridine. De cyanopyridine wordt hergebruikt, terwijl het water als afvalstroom de fabriek verlaat.

In R4 zijn de omstandigheden zo gekozen dat de reactieproducten als gescheiden stofstromen vrijkomen.

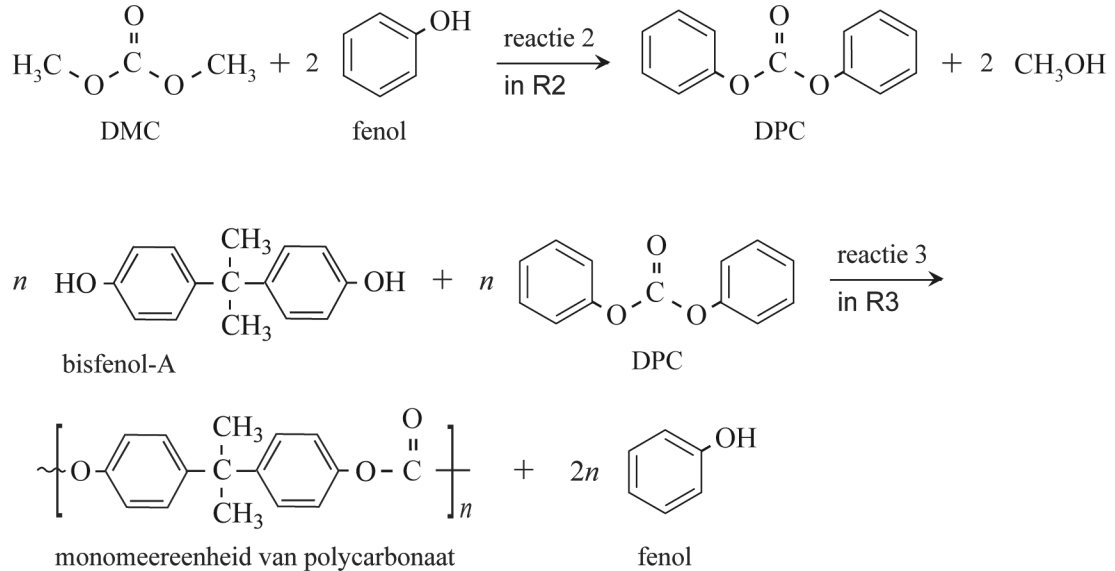
In het blokschema op de uitwerkbijlage ontbreken R4 en de stofstromen van cyanopyridine, picolinamide en water.

3p **7** Maak het blokschema op de uitwerkbijlage compleet.

- Teken R4.
- Teken de ontbrekende stofstromen van cyanopyridine, picolinamide en water. Houd daarbij rekening met hergebruik van stoffen.
- Je hoeft niets aan te geven tussen R1 en S1.
- Geef de stoffen in het schema weer met de volgende cijfers:
 - 1 cyanopyridine
 - 2 picolinamide
 - 3 water

De stroom van DMC uit S1 wordt doorgevoerd naar reactor 2 (R2). In R2 verloopt reactie 2, waarbij het tussenproduct DPC wordt gevormd. In reactor 3 (R3) wordt uiteindelijk via reactie 3 het polycarbonaat gevormd. In figuur 3 zijn beide reacties weergegeven.

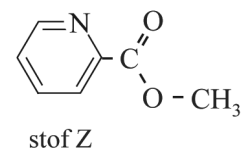
figuur 3



Reactie 2 en reactie 3 verlopen met een rendement van 100%. In het proces bevinden zich de scheidingsruimten S2 en S3. In S2 wordt het methanol gescheiden van het DPC en in S3 wordt het fenol gescheiden van het polycarbonaat.

Het methanol afkomstig uit S1 en S2 wordt gerecicleerd naar R1. In een van de nevenreacties in R1 ontstaan ammoniak en stof Z.

De structuurformule van stof Z is hiernaast weergegeven.



De stofstromen van methanol naar R1 zijn in het blokschema bij vraag 7 onvolledig weergegeven. Bij scheidingsprocessen treedt geen verlies van methanol op.

- 3p **8** Leid af met behulp van de reacties die optreden in R1 en R2 of de recirculatie van methanol van S1 en S2 naar R1 een gesloten systeem is, of dat er in het proces netto methanol wordt verbruikt.