

Groene chemie

Leerdoelen

- Je kunt de atoomeconomie berekenen bij een gegeven reactievergelijking.
- Je kunt de E-factor berekenen als de reactievergelijking en het rendement bekend zijn.
- Je kunt uitleggen hoe je een proces duurzamer kunt maken door gebruik te maken van de 12 uitgangspunten van de groene chemie.

In binas 37H/ScienceData 1.7.7 en 97F/ScienceData 38 staan de formules van de groene chemie en de 12 uitgangspunten van de groene chemie. In binas 97A staan gegevens over het gevaar van stoffen zoals de grenswaarde, in 97B/ScienceData 38.1 staan de gevarensymbolen en in 97E/ScienceData 38.3 de gevarensymbolen.

Atoomeconomie = $\frac{\text{massa gewenst product}}{\text{massa beginstoffen}} \times 100 \%$

Bij de atoomeconomie kijk je alleen naar de reactievergelijking en niet hoe goed het in de praktijk lukt.

Rendement = $\frac{\text{werkelijke opbrengst}}{\text{theoretische opbrengst}} \times 100 \%$.

Let er op dat de theoretische en werkelijk opbrengst in dezelfde eenheid staan, bijvoorbeeld gram.

E-factor = $\frac{(\text{massa beginstoffen} - \text{werkelijke massa product})}{\text{werkelijke massa product}}$

De E-factor is het aantal gram afval dat ontstaat per gram gewenst product, het is een getal en geen percentage zoals de atoomeconomie en het rendement.

Netto CO₂ uitstoot versterkt het broeikaseffect.

In een verbrandingsmotor kunnen zuurstof en stikstof uit de lucht reageren tot NO_x, wat kan zorgen voor smog en verzuring. Ook zwaveldioxide, dat ontstaat bij de verbranding van brandstoffen met zwavel erin, zorgt voor smog en verzuring. Fosfaationen die terechtkomen in het oppervlaktewater zorgen ervoor dat algen heel hard groeien en de rest van het leven verdringen, dat heet eutrofiëring.

[Uitlegfilmpje groene chemie](#)



[uitleg atoomeconomie E-factor](#)



[uitleg rendement](#)



[Voorbeeldexamenopgave](#)

[nog een examenopgave](#)



[groene](#)



[chemie quiz](#)



Opgave 1

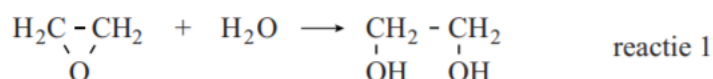
Uit ethanol en butaanzuur ontstaat een ester.

- Geef de reactievergelijking in structuurformules.
- Bereken de atomeconomie. Geef je antwoord in vier significante cijfers.
- Bereken de E-factor als het rendement 75 % is.
- Bereken het rendement als uit 10 mL ethanol ($T=293\text{ K}$) en een overmaat butaanzuur 16 gram van de ester ontstaat.

Opgave 2

Monoëthyleenglycol (afgekort als MEG) wordt veel gebruikt als antivries en als grondstof voor PET, het materiaal waarvan frisdrankflessen en fleecedekleding wordt gemaakt.

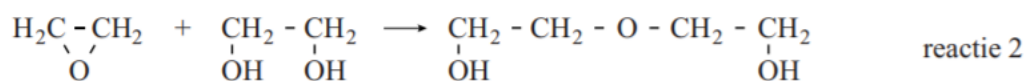
MEG wordt op grote schaal in de industrie geproduceerd volgens het zogenoemde MASTER-proces. Hierbij laat men in een continu proces etheenoxide met water reageren (reactie 1).



etheenoxide

MEG

Als belangrijkste bijproduct ontstaat hierbij diëthyleenglycol (DEG) door de volgende reactie (reactie 2):



etheenoxide

MEG

DEG

Om de vorming van DEG te beperken wordt etheenoxide met een grote overmaat water in een reactor gebracht. De massaverhouding

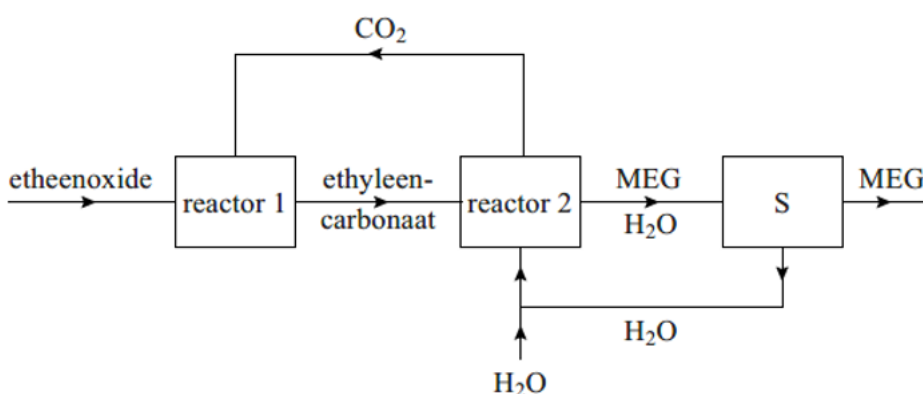
etheenoxide : water is 1 : 9. Het rendement van de omzetting van etheenoxide tot MEG bedraagt dan 90%.

- a Leg uit, met behulp van het botsende-deeltjes-model, wat er gebeurt met de snelheid van reactie 2 bij het gebruik van een grote overmaat water.

De overmaat water en het gevormde DEG worden door middel van destillatie verwijderd uit het mengsel dat de reactor verlaat. Het water wordt teruggevoerd in het proces. Het DEG wordt opgeslagen en verkocht. De fabrieksinstallaties die nodig zijn voor de scheiding en de opslag vormen een belangrijke financiële kostenpost.

- b. Noem nog een financiële kostenpost die de scheiding met zich meebrengt. Licht je antwoord toe.

Sinds enige jaren wordt in enkele nieuwe fabrieken MEG geproduceerd volgens een continu proces waarbij geen grote overmaat water nodig is. De massaverhouding etheenoxide : water bedraagt slechts 1 : 1. Het rendement van de omzetting van etheenoxide tot MEG bedraagt meer dan 99%. Een vereenvoudigd blokschema van dit zogenoemde OMEGA-proces is hieronder weergegeven.



In reactor 1 wordt uitsluitend ethyleencarbonaat ($C_3H_4O_3$) gevormd volgens de volgende reactie: $C_2H_4O + CO_2 \rightarrow C_3H_4O_3$

In scheidingsruimte S vindt een destillatie plaats.

De informatie over het MASTER-proces en het OMEGA-proces in deze opgave kan vergeleken worden volgens de twaalf uitgangspunten die gehanteerd worden in de groene chemie. Op enkele punten valt deze vergelijking in het voordeel uit van het OMEGA-proces.

De atomeconomie behoort niet tot deze punten.

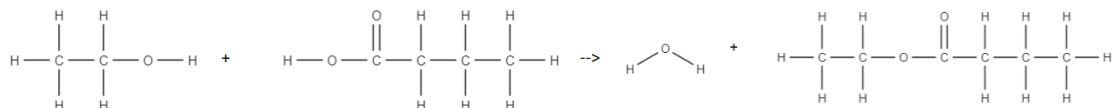
- c Leg uit dat de atomeconomie niet behoort tot de bedoelde punten.
d Noem twee uitgangspunten die gehanteerd worden in de groene chemie en in het voordeel uitvallen van het OMEGA-proces.

- Maak gebruik van Binas-tabel 97F.
- Licht elk genoemd uitgangspunt toe.

Antwoorden

Opgave 1

a.



b. De massa van de ester is $6 \times 12,01 + 12 \times 1,008 + 2 \times 16,00 = 116,156 \text{ u}$

De massa van de beginstoffen is $2 \times 12,01 + 6 \times 1,008 + 16 + 4 \times 12,01 + 8 \times 1,008 + 2 \times 16,00 = 134,17 \text{ u}$.

Atoomeconomie = $116,156 / 134,17 \times 100 \% = 86,57 \%$.

c. De werkelijke opbrengst is $0,75 \times 116,156 = 87,12$

De massa van de beginstoffen is 134,17 (zie b)

E-factor = $(134,17 - 87,12) / 87,12 = 0,54$

d. $10 \text{ mL} \times 0,80 \text{ g/mL} = 8,0 \text{ gram ethanol}$

$8,0 / 46,068 = 0,174 \text{ mol ethanol}$

Uit 1 mol 1 ethanol kan 1 mol ester ontstaan, dus kan er 0,174 mol ester ontstaan.

De molaire massa van de ester is (zie b) 116,156 g/mol.

$0,174 \text{ mol} \times 116,56 \text{ g/mol} = 20,2 \text{ gram ester}$ kan er ontstaan, dat is de theoretische opbrengst.

Rendement is $16 \text{ gram} / 20,2 \text{ gram} \times 100 \% = 79 \%$.

Opgave 2

- De concentraties van etheenoxide en MEG worden kleiner (bij gebruik van een grote overmaat water). Daardoor neemt het aantal (effectieve) botsingen (per seconde) tussen (moleculen van) etheenoxide en MEG af. Dus de snelheid van reactie 2 neemt af
- Energie, want voor destillatie moet een/het mengsel worden verwarmd. (En energie kost geld.)
- In beide processen komen (bij de vorming van MEG uit etheenoxide met water) alle atomen van de beginstoffen terecht in het reactieproduct. Dus de atomeconomie is (in beide processen) 100%.
- Nummer 1 / Preventie, want er ontstaat minder bijproduct / geen DEG / minder koolstofdioxide (bij de destillatie). – Nummer 3, want minder/kleinere destillatie-installaties betekent minder materiaal om deze te maken. – Nummer 6 / Energie-efficiënt ontwerpen. Er hoeft minder water door destillatie te worden gescheiden van MEG. / Er is minder energie nodig voor de destillatie.



[Uitlegfilmpje opgave 2](#)