

## 7 Duurzaamheid

### Fossiele brandstoffen

De belangrijkste *fossiele brandstoffen* zijn *steenkol*, *aardgas* en *aardolie*. Ze worden gebruikt voor de productie van warmte, elektrische energie en grondstoffen voor de chemische industrie (zoals kunststoffen en medicijnen). Aardolie wordt in een aantal fracties van stoffen gescheiden door *gefractioneerde destillatie*. Minder bruikbare fracties worden door *kraken* en *reformen* omgezet in brandstoffen en grondstoffen voor de chemische industrie. Katalysatoren spelen daarbij een grote rol.

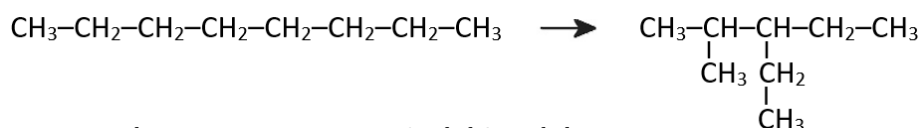
### Kraken en reformen

*Kraken* is een proces waarbij grote moleculen worden afgebroken tot kleinere moleculen, die veel waardevoller zijn. Deze kleinere moleculen zijn bijvoorbeeld geschikt als grondstof voor de fabricage van kunststoffen.



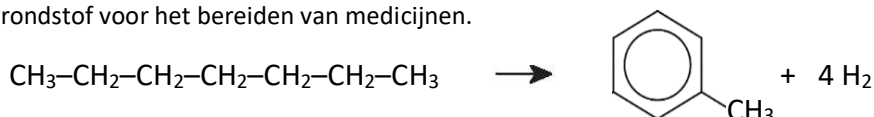
*Bij het kraken van octaan kan o.a. pentaan en propaan ontstaan. De keten kan ook op andere plaatsen breken, waardoor er een mengsel van allerlei kleinere koolwaterstofmoleculen ontstaat.*

*Reformen* is een proces waarbij moleculen van vorm veranderen. Bijv. onvertakte koolwaterstofmoleculen worden veranderd in vertakte moleculen. Deze vertakte moleculen zijn geschikt als benzine.



*reactie van de omzetting van octaan in 3-ethyl-2-methylpentaan*

Ook kunnen onvertakte alkanen veranderen in moleculen die een benzeenring bevatten. Deze moleculen zijn o.a. geschikt als grondstof voor het bereiden van medicijnen.



*reactie van de omzetting van heptaan in methylbenzeen en waterstof*

### Milieuproblemen fossiele brandstoffen

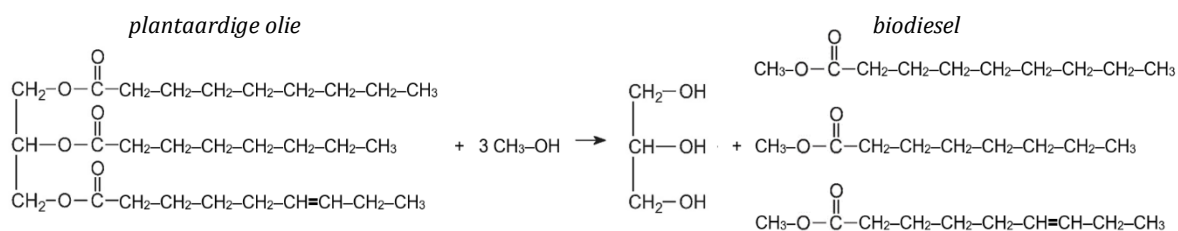
Bij verbranding van fossiele brandstoffen ontstaan  $\text{CO}_2$ ,  $\text{SO}_2$  en  $\text{NO}_x$ . *Koolstofdioxide* levert een grote bijdrage aan het versterkte *broeikaseffect*. Vermindering daarvan kan door energiebesparing of door opslag. *Zwavel dioxide* en *stikstofoxiden* zijn giftig en veroorzaken verzuring van het milieu.

### Biobrandstoffen

*Bio-ethanol*, *biogas (methaan)* en *biodiesel* zijn *biobrandstoffen* die worden gemaakt van *biomassa*. Biomassa is materiaal afkomstig van bomen en planten.

Bio-ethanol en biogas worden verkregen door *vergisting* van biomassa (voedselgewassen (mais), organisch restafval (maisstengels), houtsnippers, mest). Hierbij wordt de biomassa afgebroken door bacteriën en schimmels.

Biodiesel wordt via *omestering* verkregen uit plantaardige olie (vooral koolzaadolie of gebruikt frituurvet):



*omestering: tri-ester van glycerol en verzuren + methanol → glycerol + drie esters van methanol en vetzuren*

## Duurzaamheid

Definitie van de Verenigde Naties "Duurzaamheid is de ontwikkeling die aansluit op de behoeften van het heden zonder het vermogen van de toekomstige generaties om in hun eigen behoeften te voorzien in gevaar te brengen"  
Duurzaam betekent in het kort: goed voor mens, dier en milieu, voor nu en later.

## Duurzame energie

Duurzame energie is energie uit bronnen die niet opraken en daarmee de voorraad aardolie sparen, weinig luchtverontreiniging veroorzaken en waarbij weinig CO<sub>2</sub> vrijkomt.

Biobrandstoffen zijn duurzamer dan fossiele brandstoffen omdat de voorraad biomassa in principe niet eindig is.

Ook ontstaan er bij de verbranding minder schadelijke stoffen.

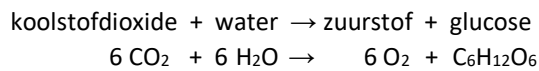
De hoeveelheid CO<sub>2</sub> die vrijkomt bij het verbranden van biobrandstof is gelijk aan de hoeveelheid CO<sub>2</sub> die de planten tijdens hun leven hebben opgenomen (fotosynthese).

Daarom dragen ze veel minder bij aan het broeikaseffect.

Nog duurzamer zijn *windenergie* en *zonne-energie*.

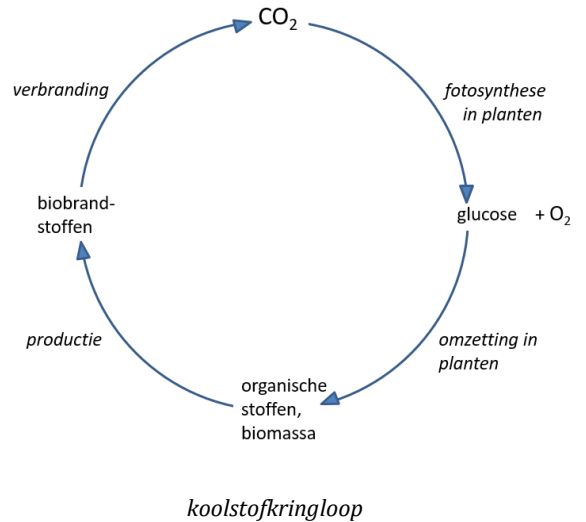
## Fotosynthese

In de bladeren van planten vindt *fotosynthese* plaats. Dat is 'n proces waarbij zonlicht wordt omgezet in chemische energie (die is opgeslagen in glucose). Bij de fotosynthese wordt koolstofdioxide vastgelegd en zuurstof geproduceerd:



## Elementkringloop

De koolstofkringloop is de *elementkringloop* van het element koolstof. Je ziet in de kringloop in welke stoffen de C-atomen terecht komen bij allerlei processen. Zie de uitgebreide koolstofkringloop in tabel 93F.



## Stofkringloop

De kringloop van een stof als plastic is een voorbeeld van een *stofkringloop*. Deze stofkringloop is het meest duurzaam als het plastic dat verwerkt is in een product na gebruik van dit product weer voor 100% kan worden *gerecycled* in de oorspronkelijke grondstof voor het maken van dezelfde kwaliteit plastic. Dit principe wordt "*cradle to cradle*" genoemd, ofwel "van wieg tot wieg". Bij het ontwerpen van een product wordt er rekening mee gehouden dat alle grondstoffen die ervoor nodig zijn na gebruik van het product weer volledig terug te winnen zijn zonder kwaliteitsverlies.

## Groene chemie

*Groene chemie* of *duurzame scheikunde* is een nieuwe richting in het chemisch denken.

## Principes groene chemie

Groene chemie is het toepassen van duurzame ontwikkelingen in de chemische industrie. De productieprocessen zijn gebaseerd op de principes van groene chemie (tabel 97F).

In de groene chemie wordt gezocht naar een proces waarbij de *atoomeconomie* en het *rendement* zo hoog mogelijk zijn. Er wordt dan efficiënter gebruik gemaakt van grondstoffen en er zijn minder bijproducten (afval).

**Atomeconomie** is het *theoretische* massapercentage atomen van de beginstoffen dat (volgens de reactievergelijking) in het gewenste eindproduct komt. Zie tabel 37H (formule) en 97F (omschrijving).

$$\text{atoomeconomie} = \frac{\text{molecuulmassa gewenst product (volgens r.v.)}}{\text{molecuulmassa beginstoffen (volgens r.v.)}} \times 100\%$$

**Het rendement** is de praktische opbrengst (of werkelijke opbrengst) als percentage van de theoretische maximale opbrengst. Zie tabel 37H (formule) en 97F (omschrijving).

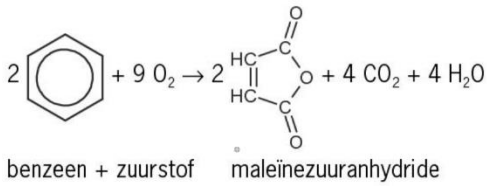
$$\text{rendement} = \frac{\text{massa praktische opbrengst}}{\text{massa theoretische opbrengst (volgens r.v.)}} \times 100\%$$

Als een reactie via meerdere stappen verloopt, moeten de rendementen van elke stap vermenigvuldigd worden om het rendement van de totaalreactie te berekenen.

*Bijv: rendement van stap 1 is 25 % en rendement van stap 2 is 45%. Totaalrendement is  $0,20 \times 0,45 = 0,11$  ofwel 11 %.*

### Rekenvoorbeeld

Maleïnezuuranhydride is een belangrijk tussenproduct in de fabricage van geneesmiddelen, pigmenten en geur- en kleurstoffen. DSM is een grote producent van deze stof en maakt het volgens onderstaande reactie:



- Bereken de atomeconomie van deze reactie.
- Bereken het rendement als uit 100 kg benzeen, 85 kg maleïnezuuranhydride ontstaat.
- Leg uit of de productie van maleïnezuuranhydride een duurzaam proces is. Gebruik in je uitleg het rendement en de atomeconomie.

- a** De molecuulmassa van het gewenste product (maleïnezuuranhydride) is:

$$4 \times 12,01 + 3 \times 16,00 + 2 \times 1,008 = 98,056 \text{ u}$$

De molecuulmassa's van de beginstoffen zijn: 78,114 u (benzeen) en 32,00 u (zuurstof).

$$\text{Atomeconomie} = \frac{m_{\text{gewenst product}}}{m_{\text{beginstoffen}}} \times 100\% = \frac{2 \times 98,056 \text{ u}}{2 \times 78,114 \text{ u} + 9 \times 32,00 \text{ u}} \times 100\% = 44,15\%$$

- b** Reken benzeen om naar mol.

$$100 \text{ kg benzeen} = 100 \cdot 10^3 \text{ g benzeen.}$$

Molaire massa van benzeen is 78,114 g mol<sup>-1</sup>.

gram benzeen	100.10 <sup>3</sup>	1
mol benzeen	?	78,114

$$? = 1,28 \cdot 10^3 \text{ mol benzeen}$$

Molverhouding C<sub>6</sub>H<sub>6</sub> : C<sub>4</sub>H<sub>2</sub>O<sub>3</sub> = 2 : 2

Er ontstaat dus 1,28 · 10<sup>3</sup> mol C<sub>4</sub>H<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

Omrekenen naar aantal kg C<sub>4</sub>H<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. De molaire massa C<sub>4</sub>H<sub>2</sub>O<sub>3</sub> is 98,056 g mol<sup>-1</sup>.

mol C <sub>4</sub> H <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	100.10 <sup>3</sup>	1
gram C <sub>4</sub> H <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	?	78,114

$$? = 1,26 \cdot 10^5 \text{ g C}_4\text{H}_2\text{O}_3$$

$$\text{Rendement} = \frac{\text{praktische opbrengst}}{\text{theoretische opbrengst}} \times 100\% = \frac{85 \text{ kg}}{126 \text{ kg}} \times 100\% = 67\%$$

- c** Deze productie is niet erg duurzaam, omdat ze een lage atomeconomie en een matig rendement heeft. Dat betekent dat er maar weinig van de massa van de beginstoffen terugkomt in het gewenste product en dat niet alle beginstoffen worden omgezet in reactieproduct. Het proces levert daardoor veel afval op.

### Chemisch evenwicht

Als bij een chemische reactie een van de beginstoffen volledig wordt omgezet, is er sprake van een *aflopende reactie*. Na afloop van de reactie is deze beginstof dus niet meer aanwezig.

Bij een *chemisch evenwicht* is er sprake van een *omkeerbare reactie*; ook de teruggaande reactie verloopt.

Kenmerken van een chemisch evenwicht:

- De heen en teruggaande reactie blijven verlopen, maar met gelijke snelheid.
- Alle beginstoffen en reactieproducten zijn aanwezig in het evenwichtsmengsel.
- De concentraties van alle beginstoffen en reactieproducten blijven constant.

De tijd tussen het begin van de reactie en het intreden van de evenwichtstoestand, noem je de *insteltijd*.

### Concentratiebreuk

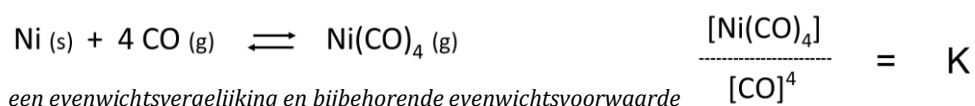
Voor elke evenwichtsreactie kun je een *concentratiebreuk* opstellen:

- De concentraties van de stoffen na de pijl komen (met elkaar vermenigvuldigd) in de teller, de concentraties van de stoffen voor de pijl in de noemer.
- De coëfficiënten worden exponenten. Tabel 37B.
- Vaste stoffen en vloeistoffen (oplosmiddel) staan niet in de concentratiebreuk ofwel de concentraties worden op 1 gesteld. Ofwel alleen gassen en opgeloste stoffen komen in de concentratiebreuk voor.

### Evenwichtsvoorwaarde

In de evenwichtstoestand is de waarde van de concentratiebreuk constant. Deze waarde noemen we de *evenwichtsconstante K*.

De *evenwichtsvoorwaarde* luidt: concentratiebreuk = K. De waarde van K is alleen afhankelijk van de temperatuur.

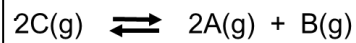


## Rekenen aan evenwichten

Bij het rekenen aan evenwichten maak je vaak gebruik van een overzichtstabel en/of van de evenwichtsvoorwaarde.

### Rekenvoorbeeld

Er wordt 2,00 mol van stof C in een reactievat van 2,00 dm<sup>3</sup> gebracht ( $t_0$ ).  
Er stelt zich het volgende evenwicht in, waarbij dan 74 % van C is omgezet ( $t_{ev}$ ).



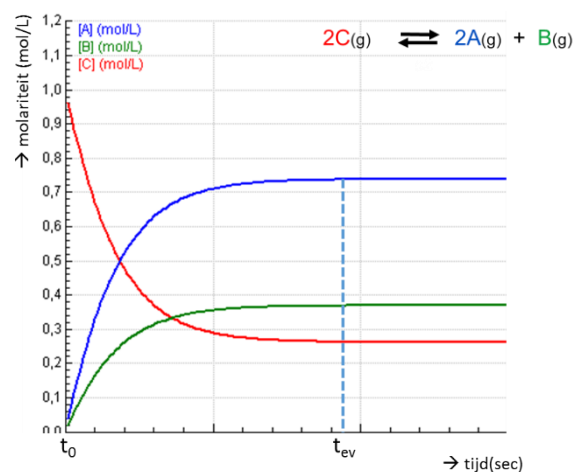
Bereken de evenwichtsconstante.

Overzichtstabel:

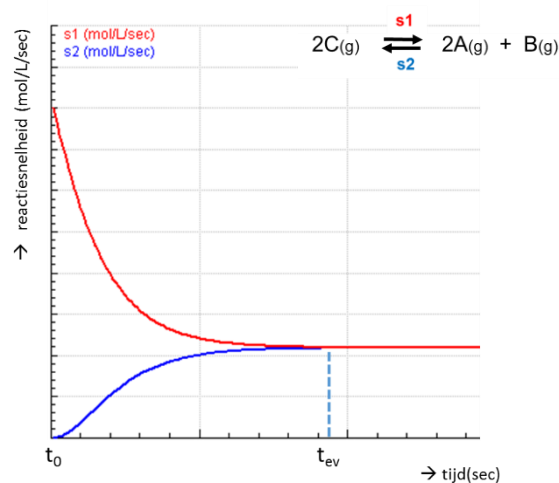
	[C]	[A]	[B]
Begin ( $t_0$ )	1,00	--	--
Omgezet	- 0,74	+ 0,74	+ 0,37
Evenwicht ( $t_{ev}$ )	0,26	0,74	0,37

Evenwichtsvoorwaarde: 
$$K = \frac{[A]^2 \times [B]}{[C]^2} = \frac{(0,74)^2 \times 0,37}{(0,26)^2} = 3,0$$

Je kunt bij dit rekenvoorbeeld in een grafiek schetsen hoe de concentraties van de stoffen verlopen tegen de tijd:



Ook kun je de grafiek schetsen van de beide reactiesnelheden tegen de tijd.



## Beïnvloeding van de ligging van een chemisch evenwicht

De verhouding van de concentraties van de stoffen voor en na de evenwichtspijlen wordt de *ligging van een evenwicht* genoemd.

De *ligging van een evenwicht kan beïnvloed worden* door de concentratiebreuk te veranderen óf door de evenwichtsconstante K te veranderen. Aan de evenwichtsvoorwaarde, waarbij de breuk gelijk is aan K, wordt dan niet meer voldaan. Er stelt zich vervolgens opnieuw een evenwicht in. Het evenwicht verschuift naar links of naar rechts. De ligging van het evenwicht is dan veranderd.

- De concentratiebreuk kan veranderd worden door één concentratie te veranderen. Dat kan door een van stoffen toe te voegen of weg te halen. De evenwichtsconstante K verandert daardoor niet. Er dan is geen evenwicht meer, want er wordt niet voldaan aan de evenwichtsvoorwaarde.
- De concentratiebreuk kan ook veranderd worden door alle concentraties te veranderen. Dat kan door het volume te veranderen door bijv. verdunnen (bij een oplossing) of samenpersen (bij een gasmengsel).
- De evenwichtsconstante K kan veranderd worden door de temperatuur te veranderen. De concentratiebreuk verandert daardoor niet. Er is dan dus geen evenwicht meer.

Je moet aan de hand van de evenwichtsvoorwaarde kunnen beredeneren hoe een chemisch evenwicht verschuift bij het toevoegen/weghalen van een van de stoffen, bij volume vergroten/verkleinen of bij temperatuur verhogen/verlagen:

- Kijk of de breuk groter/kleiner wordt óf kijk of de K groter of kleiner wordt.
- Kijk of de breuk dan weer groter of kleiner moet worden om weer gelijk te worden aan K.
- Kijk of daarvoor de reactie naar links of naar rechts tijdelijk de overhand heeft.

### Voorbeeld

Als bij een bepaalde temperatuur in een reactievat koolstofmonoxidegas aan nikkelpoeder wordt toegevoegd stelt zich het volgende evenwicht in:



De ligging van dit evenwicht kan bijvoorbeeld worden beïnvloed door CO toe te voegen, het gasmengsel samen te persen of de temperatuur te verhogen. Aan de hand van de evenwichtsvoorwaarde wordt

$$\frac{[\text{Ni(CO)}_4]}{[\text{CO}]^4} = K$$

beredeneerd hoe de ligging in deze gevallen veranderd:

- Toevoegen van CO:
  - De [CO] neemt toe dus de breuk wordt kleiner (K verandert niet).
  - De breuk moet weer groter worden om weer gelijk te worden aan K.
  - Dat kan doordat de reactie naar rechts tijdelijk in het voordeel is, waardoor de teller toeneemt en de noemer afneemt. Het evenwicht verschuift naar rechts.
- Gasmengsel samenpersen:
  - Alle concentraties nemen toe dus de breuk wordt kleiner (exponent 4 in de noemer!).
  - De breuk moet weer groter worden om weer gelijk te worden aan K.
  - Dat kan doordat de reactie naar rechts tijdelijk in het voordeel is, waardoor de teller toeneemt en de noemer afneemt. Het evenwicht verschuift naar rechts.
- Temperatuur verhogen: Gegeven: bij hogere temperatuur is de K kleiner.
  - De breuk blijft op dat moment hetzelfde. K wordt kleiner.
  - De breuk moet ook kleiner worden om gelijk te worden aan de kleinere K.
  - Dat kan doordat de reactie naar links tijdelijk in het voordeel is, waardoor de teller afneemt en de noemer toeneemt. Het evenwicht verschuift naar links. De reactie naar links is dan de endotherme reactie.

Algemene regels:

- Als je een stof toevoegt (weghaalt) die links in de evenwichtsvergelijking staat, verschuift het evenwicht naar rechts (links). Een evenwicht wordt *aflopend* als een van de stoffen voortdurend uit het evenwichtsmengsel wordt verwijderd.
- Als het volume wordt vergroot (verkleind) verschuift het evenwicht naar de kant met de meeste (minste) deeltjes. N.B. Als er voor en na de pijlen evenveel deeltjes zijn, verschuift het evenwicht dus niet. (De breuk veranderd dan niet en blijft dus gelijk aan K).
- Als de temperatuur wordt verhoogd (verlaagd) verschuift het evenwicht naar de endotherme (exotherme) kant.
- Verandering van de hoeveelheid stof die niet in de concentratiebreuk voorkomt, zoals een vaste stof, heeft geen invloed op de ligging van het evenwicht.
- Toevoegen van een katalysator heeft geen invloed op de ligging van een evenwicht. Wel is de insteltijd korter.