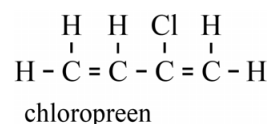


Chloropreenfabriek

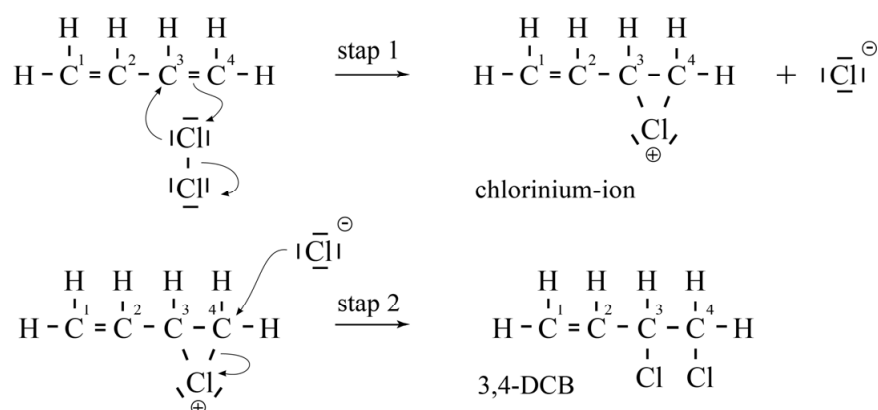
Chloropreen is de beginstof voor de productie van neopreen. Neopreen is een synthetisch rubber. De structuurformule van chloropreen is hiernaast weergegeven.



Chloropreen wordt in een aantal stappen gemaakt.

De eerste stap is de additie-reactie van buta-1,3-dieen met chloor. Daarbij ontstaat onder andere 3,4-dichloorbut-1-een (3,4-DCB). Het mechanisme voor de vorming van 3,4-DCB is weergegeven in mechanisme 1.

mechanisme 1

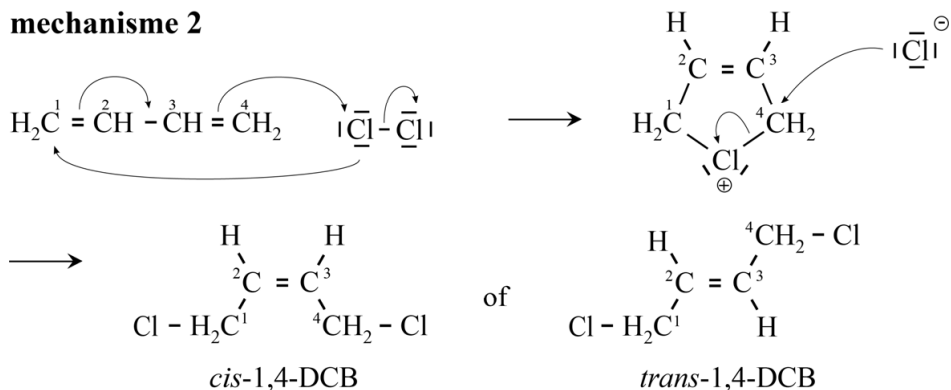


In stap 1 van mechanisme 1 wordt een cyclisch chlorinium-ion gevormd. Van dit ion kunnen ook twee niet-cyclische structuurisomeren worden gevormd. Op de uitwerkbijlage is de Lewisstructuur van een niet-cyclische structuurisomeer weergegeven, dit is structuurisomeer 1.

De andere niet-cyclische structuurisomeer is structuurisomeer 2. Van dit deeltje kunnen twee grensstructuren worden gegeven. Deze grensstructuren zijn op de uitwerkbijlage onvolledig weergegeven. In beide grensstructuren heeft telkens één C-atoom geen volledig oktet. Met behulp van de grensstructuren van structuurisomeer 2 kan worden verklaard dat in stap 2 behalve 3,4-DCB ook 1,4-DCB (1,4-dichloorbut-2-een) wordt gevormd.

- 2p 6 Maak op de uitwerkbijlage beide grensstructuren van structuurisomeer 2 compleet.
- Geef het Cl-atoom en de ontbrekende elektronenparen weer.
 - Geef de formele lading(en) weer.

Van het gevormde 1,4-DCB bestaan twee stereo-isomeren, namelijk *cis*-1,4-DCB en *trans*-1,4-DCB. Een leerling doet een voorstel voor het mechanisme voor het ontstaan van 1,4-DCB. Dit voorstel is in mechanisme 2 weergegeven.

mechanisme 2

Het blijkt dat het gevormde 1,4-DCB voor 19% uit de *cis*-vorm en voor 81% uit de *trans*-vorm bestaat.

- 2p 7 Leg uit dat mechanisme 2 geen verklaring biedt voor de waargenomen verhouding van de stereo-isomeren bij de vorming van 1,4-DCB uit chloor en buta-1,3-dieen.

Op de uitwerkbijlage bij vraag 10 is het onvolledige blokschema van de productie van chloropreen weergegeven. In reactor 1 (R1) reageert buta-1,3-dieen met chloor. Het mengsel van 1,4-DCB en 3,4-DCB wordt na een scheidingsstap (S1) als vloeistofmengsel naar reactor 2 (R2) gevoerd. In R2 treedt evenwicht 1 op.



De temperatuur in R2 ligt tussen 125 °C en 150 °C. De temperatuur is zo gekozen dat eenvoudig een zo hoog mogelijke opbrengst aan 3,4-DCB kan worden bereikt.

Bij de druk in R2 is het kookpunt van 3,4-DCB 119 °C. De kookpunten van *cis*-1,4-DCB en *trans*-1,4-DCB liggen boven 152 °C.

- 2p 8 Voer de volgende opdrachten uit:
- Geef de evenwichtsvoorwaarde voor evenwicht 1. Houd hierbij rekening met de omstandigheden die heersen in R2.
 - Leg uit dat onder deze omstandigheden een zo hoog mogelijke opbrengst aan 3,4-DCB kan worden bereikt.

In reactor 3 (R3) reageert ten slotte 3,4-DCB met natronloog tot chloropreen en een oplossing van natriumchloride. Op de uitwerkbijlage is het mechanisme van deze reactie onvolledig weergegeven.

- 3p 9 Voer op de uitwerkbijlage de volgende opdrachten uit:
- Maak de reactievergelijking compleet.
 - Geef de niet-bindende elektronenparen en formele lading(en) weer.
 - Geef met pijlen weer hoe elektronenparen worden verplaatst tijdens de reactie.

Het gehele productieproces is hieronder samengevat.

- Chloor en buta-1,3-dieen worden als gas in R1 geleid, waar 3,4-DCB en 1,4-DCB en nevenproducten worden gevormd. De omzetting van chloor en buta-1,3-dieen in R1 is niet volledig.
- Het mengsel afkomstig uit R1 is vloeibaar en wordt naar scheidingsruimte 1 (S1) geleid. In S1 wordt stikstof door het mengsel geblazen waardoor het ongereageerde chloor en buta-1,3-dieen uit de vloeistofstroom worden verwijderd. Het gasmengsel van stikstof, chloor en buta-1,3-dieen wordt boven uit S1 teruggeleid naar R1. Om ophoping van stikstof in het systeem te voorkomen wordt een deel van deze recycle-stroom afgetapt.
De vloeistofstroom uit S1 wordt naar R2 geleid.
- In R2 wordt 1,4-DCB onvolledig omgezet tot 3,4-DCB. Uit R2 komen twee stofstromen. De ene stroom, met uitsluitend 3,4-DCB, wordt doorgevoerd naar R3.
- De andere stroom uit R2 bevat 1,4-DCB en de nevenproducten. Deze stroom wordt doorgevoerd naar een destilleerkolom (S2) waar het 1,4-DCB wordt afgescheiden en teruggeleid naar R2.
De nevenproducten worden als vloeistofstroom afgevoerd.
- In R3 reageert ten slotte 3,4-DCB met een overmaat natronloog tot chloropreen en een oplossing van natriumchloride. Het chloropreen verlaat R3 als gasstroom.

4p **10** Maak het blokschema op de uitwerkbijlage compleet.

- Teken S2.
- Teken de ontbrekende pijlen en noteer de ontbrekende stoffen bij de pijlen.
- Geef de stofstromen in het schema weer met de volgende cijfers:

1	buta-1,3-dieen	6	natriumchloride-oplossing
2	chloor	7	natronloog
3	chloropreen	8	nevenproducten
4	3,4-DCB	9	stikstof
5	1,4-DCB		
- Cijfers voor de verschillende stofstromen kunnen meerdere malen voorkomen.

Het rendement van de omzetting van buta-1,3-dieen tot 3,4-DCB in R1 en R2 bedraagt in totaal 70%. Het rendement van de omzetting van 3,4-DCB tot chloropreen in R3 bedraagt 93%.

Het molair volume van een gas onder de heersende omstandigheden is $2,45 \cdot 10^{-2} \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1}$.

5p **11** Bereken hoeveel m^3 chloor minimaal nodig is voor de productie van 1,0 ton chloropreen. Een ton is 10^3 kg .
Geef de uitkomst in het juiste aantal significante cijfers.