

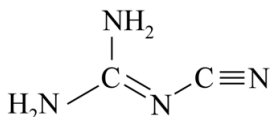
Tenzij anders vermeld, is er sprake van standaardomstandigheden:

$T = 298 \text{ K}$ en $p = p_0$.

DCDA

Dicyaandiamide (DCDA, zie figuur 1) is een wit kristallijn poeder. Het is onder andere een bouwsteen in de synthese van medicijnen.

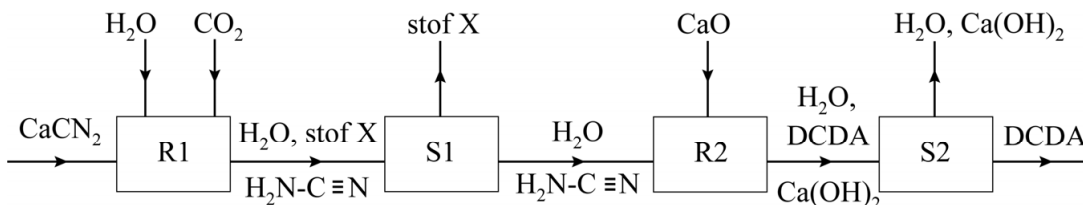
figuur 1



DCDA

In figuur 2 is het industriële productieproces van DCDA vereenvoudigd met een blokschema weergegeven. Calciumcyaanamide (CaCN_2), water en koolstofdioxide worden reactor 1 (R1) ingeleid. Calciumcyaanamide is een sterke base. In R1 reageren calciumcyaanamide, koolstofdioxide en een overmaat water tot het zwakke zuur cyaanamide ($\text{H}_2\text{N}-\text{C}\equiv\text{N}$) en de vaste stof X. Stof X wordt in scheidingsruimte 1 (S1) verwijderd. Hierbij wordt het mengsel in S1 op kamertemperatuur gehouden.

figuur 2



- 2p 1 Geef de vergelijking van de reactie die optreedt in R1. Gebruik formules voor alle stoffen en neem aan dat uitsluitend cyaanamide en de vaste stof X ontstaan.
- 2p 2 Voer de volgende opdrachten uit:
- Geef aan welke scheidingsmethode geschikt is om stof X uit het mengsel in S1 te verwijderen.
 - Leg hierbij uit welk verschil in stoffeigenschap van cyaanamide en stof X deze scheiding mogelijk maakt.

De waarde van de K_z van cyaanamide is $5,42 \cdot 10^{-11}$. De concentratie van de cyaanamide-oplossing die R1 verlaat, is 250 g L^{-1} .

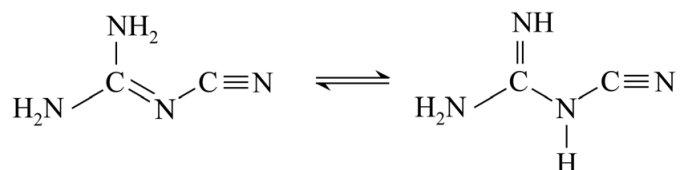
- 4p **3** Bereken de pH van deze cyaanamide-oplossing. Gebruik de K_z . Neem aan dat de pH van de cyaanamide-oplossing uitsluitend wordt bepaald door cyaanamide.

DCDA is een dimeer van cyaanamide. In reactor 2 (R2) reageert cyaanamide door een dimerisatie-reactie tot DCDA. Bij de dimerisatie van cyaanamide treedt het stikstofatoom in de NH_2 -groep van cyaanamide op als nucleofiel deeltje. Cyaanamide is een amfolyt. Dat betekent dat de stof ook als base kan reageren. Als de pH te laag is, neemt de NH_2 -groep van cyaanamide een H^+ -ion op. De gevormde groep kan dan niet meer als nucleofiel deeltje reageren en daardoor kan geen dimerisatie van cyaanamide tot DCDA meer plaatsvinden. Na de reactie laat men DCDA in scheidingsruimte 2 (S2) uitkristalliseren en wordt DCDA als vaste stof afgescheiden.

- 3p **4** Voer de volgende opdrachten uit:
- Geef de lewisstructuur van cyaanamide en van het deeltje dat ontstaat als cyaanamide een H^+ -ion heeft opgenomen.
 - Leg uit dat het stikstofatoom van de NH_2 -groep niet meer nucleofiel is als deze groep een H^+ -ion heeft opgenomen.

In oplossingen van DCDA treedt omkeerbare structuurisomerisatie op. Dit evenwicht is weergegeven in figuur 3.

figuur 3



Het is onmogelijk om een van de twee structuurisomeren zuiver te verkrijgen. In het massaspectrum van DCDA zijn daarom fragment-ionen van beide isomeren herkenbaar. Behalve de piek van het molecuul-ion (M^+) zijn twee kenmerkende pieken aanwezig:

- Bij $m/z = 43$ bevindt zich een piek die maar van één structuurisomeer in figuur 3 afkomstig kan zijn.
- Bij $m/z = 68$ bevindt zich een piek die van beide structuurisomeren afkomstig kan zijn.

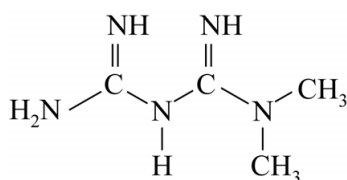
De fragment-ionen worden gevormd doordat in het molecuul-ion slechts één enkele binding wordt verbroken. Op de uitwerkbijlage is figuur 3 twee keer weergegeven.

2p **5** Voer de volgende opdrachten uit op de uitwerkbijlage:

- Omcirkel bij **a** in de juiste isomeer het fragment dat de piek bij $m/z = 43$ veroorzaakt.
- Omcirkel bij **b** in elke isomeer het fragment dat een piek bij $m/z = 68$ veroorzaakt.

DCDA dient onder andere als beginstof voor de synthese van metformine. Zie figuur 4. Metformine wordt vooral voorgeschreven als medicijn bij de behandeling van diabetes mellitus type 2 (suikerziekte). Metformine kan met behulp van een bepaald reactietype in één stap worden gemaakt uit DCDA en één andere beginstof. In deze reactie is metformine het enige product.

figuur 4



metformine

2p **6** Voer de volgende opdrachten uit:

- Teken de structuurformule van deze andere beginstof.
- Geef de naam van het reactietype.