

PEARL GTL

Oliemaatschappijen zoals Shell willen aan de nog steeds stijgende vraag naar benzine en diesel kunnen blijven voldoen én ze willen de eindige olievoorraad zoveel mogelijk beschikbaar houden als grondstof in plaats van als brandstof. Daarom zoeken ze naar mogelijkheden om aardgas en met steenkool geproduceerd syngas om te zetten in vloeibare brandstoffen: gas to liquid, GTL.

Lees in bron M5_6A_2PearlGTL een stukje van een artikel over de door Shell in Qatar gebouwde Pearl GTL fabriek en beantwoord daarna onderstaande vragen.

De reiniging van aardgas van zwavelverbindingen kan gerealiseerd worden met een basisprincipe dat bedacht is door Claus. In het Clausproces wordt waterstofsulfide door reactie met zuurstof omgezet in zwavel en water.

a. Beschrijf deze reactie met een vergelijking.

In het artikel is sprake van terugwinning van zwavel in zuivere vorm.

b. Wat wordt in deze context bedoeld met zwavel “in zuivere vorm”?

c. Leg uit waarom het ontzwavelde aardgas met een ondermaat en niet met een overmaat zuurstof verbrand wordt.

d. Beschrijf deze onvolledige verbranding met een reactie-vergelijking.

Uit de vormingswarmte van methaan en koolstofmonooxide kun je berekenen dat er bij deze reactie per mol methaan $0,335 \cdot 10^5$ J aan warmte-energie vrijkomt.

e. Laat zien hoe je deze reactiewarmte kunt berekenen.

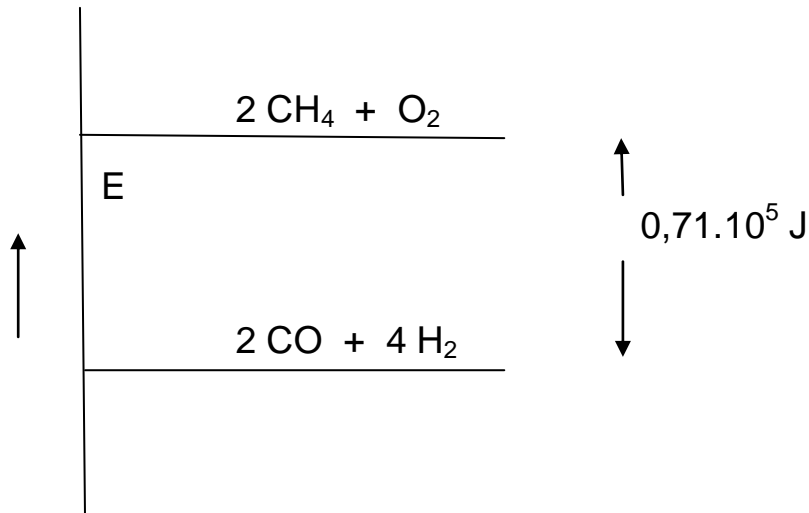
Op de volgende bladzijde staat het energiediagram voor de reactie getekend.

f. Hoe zie je in het diagram dat de reactie exotherm is?

Controleer aan de hand van dit diagram je antwoord op vraag d.

g. Klopt het?

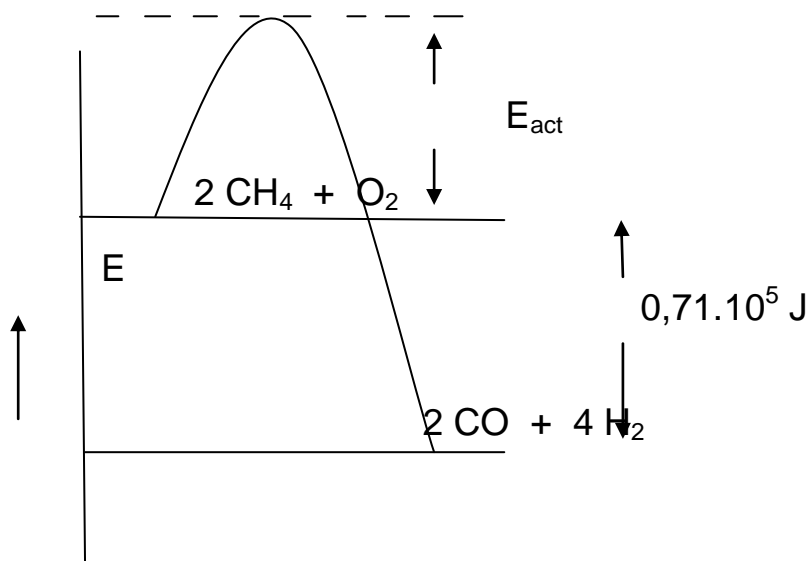
h. Leg uit waarom in het diagram $0,71 \cdot 10^5$ J als reactiewarmte vermeld staat en niet $0,355 \cdot 10^5$ J zoals berekend bij vraag e.



Hoewel de reactie exotherm is moet toch tot $1300 \text{ }^\circ\text{C}$ verwarmd worden.

- i. Hoe wordt de energie genoemd die nodig is om de reactie op gang te brengen?

In het energiediagram wordt dat wel eens al volgt weergegeven:



Als de reactie eenmaal op gang is gebracht zorgt de hoge temperatuur er ook voor dat de reactie snel(ler) verloopt.

- j. Leg op microniveau uit hoe een hogere temperatuur de reactiesnelheid kan verhogen.

De reactiesnelheid kan ook verhoogd worden door gebruik te maken van een katalysator.

- k. Hoe kun je in het energiediagram weergeven dat de reactie gekatalyseerd wordt?
- l. Volgens welke twee groene-chemie-uitgangspunten moet de reactie met een katalysator groener genoemd worden dan de reactie zonder katalysator?

Syngas kan ook geproduceerd worden uit steenkool en stoom. Men spreekt dan van kolenvergassing. Bij deze bereidingswijze van syngas kan ook biomassa bij de steenkool gemengd worden.

- m. Beschrijf de vorming van syngas uit koolstof en water met een reactievergelijking.
- n. Leg aan de hand van BINAS-tabel 57 uit of deze reactie endo- dan wel exotherm is.

In de Shellfabriek in Qatar wordt syngas gebruikt als grondstof voor de productie van de vloeibare hoofdbestanddelen van benzine en diesel: GTL. Een voorbeeld van zo'n bestanddeel is het koolwaterstof octaan met chemische formule C_8H_{18} . In het artikel worden bij de beschrijving van dit proces macro- en microniveau-termen door elkaar gebruikt.

- o. Herschrijf de zinsnede "Het verrassende is ... grote, lange moleculen" met gebruikmaking van alleen microniveau-termen.
- p. Herschrijf de zinsnede "Het verrassende is ... grote, lange moleculen" met gebruikmaking van alleen macroniveau-termen.

Bij het Fischer-Tropschproces ontstaan onvermijdelijk ook ongewenste nevenproducten die voorgesteld worden met heel grote, zware moleculen.

Een voorbeeld van zo'n stof is hexadecaan met molecuulformule $C_{16}H_{34}$. (Dat soort stoffen zit trouwens ook in aardolie.) Om er het gewenste product octaan van te maken worden ze gekraakt, soms in de aanwezigheid van waterstof (hydrocracking).

- q. Leg uit dat door hydrocracking de productie van octaan uit syngas groener wordt gemaakt. Verwijs daarbij naar een van de groene-chemie-uitgangspunten.
- r. Beschrijf het ontstaan van octaan uit hexadecaan bij een waterstofkraakreactie met een reactievergelijking.

De vergelijking van r kan op macroniveau en op microniveau geïnterpreteerd worden.

- s. Beschrijf aan de hand van de vergelijking van r op microniveau wat er bij deze kraakreactie gebeurt.
- t. Bereken aan de hand van de reactievergelijking van r hoeveel liter waterstof (bij 25 °C) nodig is om op die manier 1,0 ton octaan te maken.

Hydrocracking draagt meer bij aan een groenere octaanproductie naarmate de atoomeconomie ervan hoger is.

- u. Hoe groot is de atoomeconomie van octaanproductie uit hexadecaan middels hydrocracking?

Toetsanalyse

- a. Geef in onderstaand kolomschema in de tweede kolom voor de vragen uit de toets aan of het volgens jou een A-, B-, C- of D-vraag betreft. (Doe je dat digitaal of maak je een afdruk op papier?)

Onderaan tref je voorbeeldantwoorden aan. Daar staat ook bij of wij het een A-, B-, C- of D-vraag vinden.
Vergelijk jouw codering met de voorbeeldcodering.

- b. Schrijf in de derde kolom de code A, B, C of D volgens het antwoordmodel.
- c. Schrijf in de vierde kolom per vraag de waardering (maximaal twee punten per vraag) die je jezelf geeft na vergelijking van jouw antwoord met het voorbeeldantwoord: 2 als je eigen antwoord helemaal goed is, 1 als het half goed is, 0 als er niet of weinig van klopt.
- d. Schrijf in de vijfde kolom heel kort op hoe het volgens jou komt (de oorzaak) dat je de betreffende vraag niet (helemaal) goed beantwoord hebt. (Formuleringen van) voorbeelden van oorzaken tref je aan in bron M5_6A_1Toetsanalyse.

1	2	3	4	5	6
vraag	code volgens jou	code volgens antw. model	waardering 1,2 of 3	oorzaak	remedie
6A.2a					
6A.2b					
6A.2c					

6A.2d					
6A.2e					
6A.2f					
6A.2g					
6A.2h					
6A.2i					
6A.2j					
6A.2k					
6A.2l					
6A.2m					
6A.2n					
6A.2o					
6A.2p					
6A.2q					
6A.2r					
6A.2d					
6A.2t					
6A.2u					
6A.3a					
6A.3b					
6A.3c					
6A.3d					

e. Schrijf in de zesde kolom hoe je de volgende keer de gemaakte fout kunt voorkomen (de remedie). (Formuleringen van voorbeelden van remedies tref je aan in bron M5_6A_1Toetsanalyse.

Door het maken van deze analyse en vooral door het bestuderen van de laatste kolom zou voor jou duidelijk moeten zijn wat jij vanaf nu (anders) moet (gaan) doen.

f. Schrijf onder de kolommen in het kort op wat jij vanaf nu (anders) gaat doen bij het leren van scheikunde.

Misschien vind je het nodig om in verband met de resultaten van de diagnostische toets en de toetsanalyse contact met je begeleider op te nemen?

g. Vind jij het nodig om contact op te nemen?

Codering en voorbeeldantwoorden

- B a. $2 \text{H}_2\text{S} + \text{O}_2 \rightarrow 2 \text{S} + 2 \text{H}_2\text{O}$
- A b. (Enkelvoudige) stof zwavel (en niet een verbinding/samen-
gestelde stof met element S)
- B c. Als overmaat zuurstof zou worden gebruikt zou methaan
volledig verbranden (tot CO_2 en H_2O) (en dan zou er geen
syngas $\text{H}_2 + \text{CO}$ ontstaan)
- B d. $2 \text{CH}_4 + \text{O}_2 \rightarrow 2 \text{CO} + 4 \text{H}_2$
- C e. Om 2 mol methaan te ontleden is $2 \times 0,75 \cdot 10^5 \text{ J}$ nodig (zie
BINAS-tabel 57) en bij de vorming van 2 mol
koolstofmonoxide komt $2 \times 1,105 \cdot 10^5 \text{ J}$ vrij; per mol methaan
komt dus
 $(2,21 - 1,50) \cdot 10^5 / 2 = 0,335 \cdot 10^5 \text{ J}$ vrij
- B f. De stoffen die ontstaan staan lager in het energiediagram en
hebben dus minder chemische energie dan de stoffen die
verdwijnen; het verschil komt bij de reactie vrij in de vorm van
warmte-energie.
- D g. ?
- A h. In het diagram staat de reactiewarmte per 2 mol methaan en bij
e is de reactiewarmte berekend per mol.
- A i. Activeringsenergie
- A j. Een hogere temperatuur (= macroniveau) wordt op microniveau
voorgesteld met sneller bewegende methaan- en zuurstof-
moleculen; daardoor zijn er per tijdseenheid meer effectieve
botsingen tussen die moleculen en dat betekent (op
macroniveau) een grotere reactiesnelheid.
- B k. De stippellijn ligt dan lager, het niveau van de
activeringsenergie ligt dan lager (want door een katalysator
wordt de activeringsenergie verlaagd).
- A l. (BINAS-tabel 97F:) uitgangpunten 6 en 9
- A m. $\text{C} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2$
- B n. (zie BINAS-tabel 57:) Voor de ontleding van 1 mol waterdamp
is meer energie nodig ($2,42 \cdot 10^5 \text{ J}$) dan er bij de vorming van 1
mol koolstofmonoxide vrijkomt ($1,105 \cdot 10^5 \text{ J}$), dus de reactie is
endotherm
- C o. Het verrassende is dat waterstofmoleculen en koolmonoxide-
moleculen in de aanwezigheid van katalyserende kobaltdeeltjes
met elkaar kunnen reageren tot de grote, lange moleculen ..
- C p. Het verrassende is dat waterstof en koolmonoxide in de
aanwezigheid van een specifieke kobaltkatalysator met elkaar
kunnen reageren tot stoffen met in de formule een hoge index
bij element C.
- B q. Door hydrocracking wordt de vorming van ongewenst
hexadecaan verhinderd, dus minder afval, dus groener volgens
uitgangspunt 1.
- C r. $\text{C}_{16}\text{H}_{34} + \text{H}_2 \rightarrow 2 \text{C}_8\text{H}_{18}$
- B s. Uit 1 hexadecaanmolecuul en 1 waterstofmolecuul worden 2
octaanmoleculen gevormd.

- C t. $1,0 \text{ ton octaan is } 1,0 \cdot 10^6 / (8 \times 12 + 18 \times 1) = 0,0088 \cdot 10^6 \text{ mol}$; in de reactievergelijking zie je dat er dus ook $0,0088 \cdot 10^6 \text{ mol}$ waterstof nodig is; bij $25 \text{ }^\circ\text{C}$ is dat $0,0088 \cdot 10^6 \times 24,5 = 2,2 \cdot 10^5 \text{ liter}$; of: $0,0088 \cdot 10^6 \text{ mol waterstof heeft een massa van } 0,0088 \cdot 10^6 \times 2 = 0,0176 \cdot 10^6 \text{ g}$, dat is (zie TUE-tabel 8) $0,0176 \cdot 10^6 / 0,08 = 0,22 \cdot 10^6 \text{ liter}$.
- B u. Aan de reactievergelijking kun je zien dat de massa van alle stoffen die verdwijnen terecht komt in het gewenste product octaan, dus de atoomeconomie is 100%; of m.b.v. de formule uit BINAS-tabel: $((2 \times 114) / (226 + 2)) \times 100\% = (228 / 228) \times 100\% = 100\%$