



Hoe kleiner hoe fijner

Keuzeopdracht scheikunde 5vwo

Verdiepende opdracht over de verdelingsgraad op nanoschaal

Voorkennis: Reactiesnelheid en evenwichten

Oriëntatie

Deze *verdiepingsopdracht* gaat over *verdelingsgraad van een stof*:

Welke effecten treden op als de verdelingsgraad zo groot is dat er nog maar een beperkt aantal moleculen bij elkaar zitten?

Niet iedereen zal met deze opdracht even ver komen. Zorg ervoor dat je in ieder geval een 'product' maakt (zie afronding).

Bij de scheikundelessen over reactiesnelheid heb je geleerd dat vaste stoffen beter reageren naarmate ze fijner verdeeld zijn, denk aan stofexplosies! Het reactieoppervlak wordt steeds groter naarmate de deeltjes kleiner worden. Vooral de verhouding oppervlak-volume blijkt bepalend voor het gedrag van vaste stoffen tijdens reactie.

Je gaat je in deze opdracht hier verder in verdiepen. In het bijzonder ga je kijken naar nanomaterialen. Doe dat in een groepje van twee of drie leerlingen.

Eerst doe je twee gestructureerde opdrachten, *Katalyse* en *Onverwachte smeltpunten*. Daarna volgt een open opdracht waarin je het antwoord op een eigen vraag kunt zoeken.

In het onderdeel *Katalyse* staat de volgende vraag centraal: stel dat een stof uit piepkleine kristallen bestaat, die je steeds kleiner maakt, tot de afmeting van enige nanometers, wat is dan het effect op de reactiesnelheid, op de katalytische eigenschappen van het materiaal? Je weet al dat wanneer de verdelingsgraad van stoffen die met elkaar reageren groter wordt, de reactie sneller zal verlopen. In deze opdracht ga je dit effect berekenen, zodat je een indruk krijgt van de grootte ervan.

Het onderdeel *Onverwachte smeltpunten* gaat over een ander effect. Het blijkt dat wanneer de verdelingsgraad van een stof zo groot is dat je in het gebied van nanokristallen komt (diameter kleiner dan 100 nm), dat een stof zich (op het eerste gezicht) onverwacht kan gaan gedragen. Zo kunnen bijvoorbeeld smeltpunten gaan verschuiven. .

Vraag 1. Oriënterende vragen

- Leg uit waarom een reactie sneller verloopt bij een grotere verdelingsgraad.
- Wat is smelten eigenlijk als we het over nanokristallen hebben?

Katalyse

Hier fris je je kennis van katalyse op. Het gaat over het effect van de verdelingsgraad op de reactiviteit van een stof, in het bijzonder de reactiviteit van een katalysator. Katalyse is een onmisbare technologie met een enorm maatschappelijk en economisch belang. Door katalyse verbruikt de industrie bijvoorbeeld minder energie en grondstoffen, en nemen afvalstoffen en schadelijke uitstootgassen af.

Niet alleen in de industrie zijn katalysatoren onmisbare ingrediënten van het productieproces, jijzelf zou ook niet kunnen bestaan zonder katalysatoren. Praktisch alle biologische processen verlopen alleen met een katalysator.

Vraag 2. Opfrisvragen over katalyse

a. Leg uit welke voordelen katalyse heeft en waarom?

Er wordt vaak onderscheid gemaakt tussen homogene en heterogene katalyse.

- b. Leg uit wat het verschil tussen heterogene en homogene katalyse is en waarom het van belang gevonden wordt om dit onderscheid te maken?
- c. Geef een voorbeeld van een biologische katalysator en van het proces waarbij die katalysator betrokken is.
-

Bij de volgende opdracht ga je aan de hand van een voorbeeld-proces het effect berekenen van een grotere verdelingsgraad van de katalysator op de reactiesnelheid van het proces.

Vraag 3. Hydrogenering van koolwaterstoffen

Palladium wordt gebruikt als katalysator bij hydrogenering van koolwaterstoffen. Bekijk Figuur 1. Neem aan dat blok I en II palladium kristallen zijn met een grootte van respectievelijk 5x5x5 nm en 10x10x10 nm. Een derde, vergelijkbaar kristal heeft een grootte van 1000x1000x1000 nm.

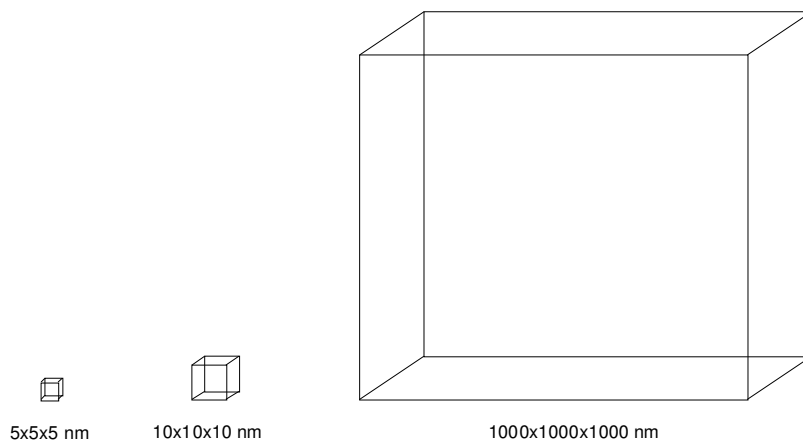
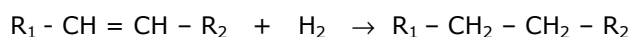


fig. 1 Drie palladiumkristallen van 5x5x5 nm, 10x10x10 nm en 1000x1000x1000nm

Je kunt hydrogenering als volgt weergeven



waarbij R_1 en R_2 staan voor de rest van het molecuul, meestal koolwaterstofketens.

- a. Leg uit welk van de drie kristalgroottes de hoogste katalytische activiteit per gram zou vertonen bij de hydrogenering van koolwaterstoffen.
- b. Stel dat er per vierkante nanometer palladium één hydrogenering per uur plaats vindt. In het reactorvat gaat één liter ruwe aardolie, met 10^{13} dubbele bindingen die gehydrogeneerd moeten worden. Hoe lang duurt de hydrogenering bij de drie verschillende kristalgroottes?

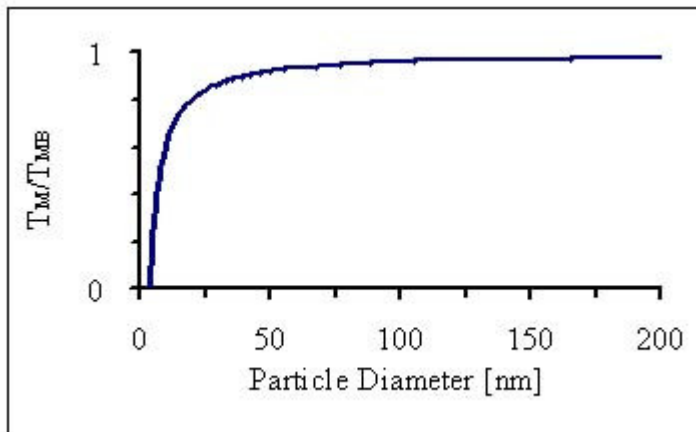
Gegevens: de dichtheid van palladium is $12 \times 10^3 \text{ kg m}^{-3}$. Het reactorvat waarin de hydrogenering plaatsvindt wordt gevuld met 500 gram palladiumkristallen.

Onverwachte smeltpunten

Sommige fysische eigenschappen kunnen drastisch veranderen als je geen *bulkmetaal* [materiaal met macro-afmetingen dat wil zeggen: (veel) groter dan 300 nm], maar een fijn verdeeld poeder in handen hebt. De deeltjesgrootte van dat poeder moet wel klein genoeg zijn, grofweg minder dan 100 nm. In deze opdracht zien jullie dat goud-nanokristallen onverwachte smeltpunten hebben. Zulke onverwachte smeltpunten kunnen ook bij andere nanomaterialen optreden.

Vraag 4. Smeltpunten experimenteel bepaald

Bekijk de volgende grafiek. Op de y-as staat uitgezet de verhouding T_M/T_{MB} . T_{MB} staat voor het smeltpunt van bulk goud, T_M staat voor het smeltpunt van een nanokristal.



Figuur 1. Experimenteel bepaalde smeltcurve voor goud nanokristallen.

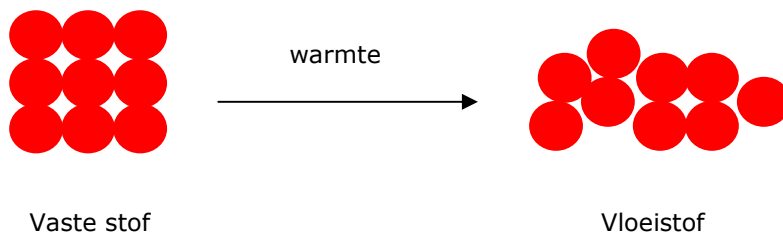
Bron: en.wikipedia.org/wiki/Melting_point_depression

- Leg uit waarom de verhouding T_M/T_{MB} van 0 tot 1 loopt? Waarom staat er geen eenheid bij?
- Zoek het smeltpunt van goud op. Bereken zo nauwkeurig mogelijk het smeltpunt van:
 - goud dat bestaat uit deeltjes met een diameter van 200 nm
 - goud dat bestaat uit deeltjes met een diameter van 100 nm
 - goud dat bestaat uit deeltjes met een diameter van 25 nm.
- Welke conclusies kun je nu trekken over het smeltpunt van goud-nanokristallen op grond van de informatie in deze grafiek?

In de volgende opdracht ga je een verklaring zoeken voor je antwoord bij opdracht 2c.

Vraag 5. Het smeltproces

In Figuur 2 is de faseovergang smelten schematisch weergegeven.



Figuur 2. schematische weergave van smelten op atoom-niveau

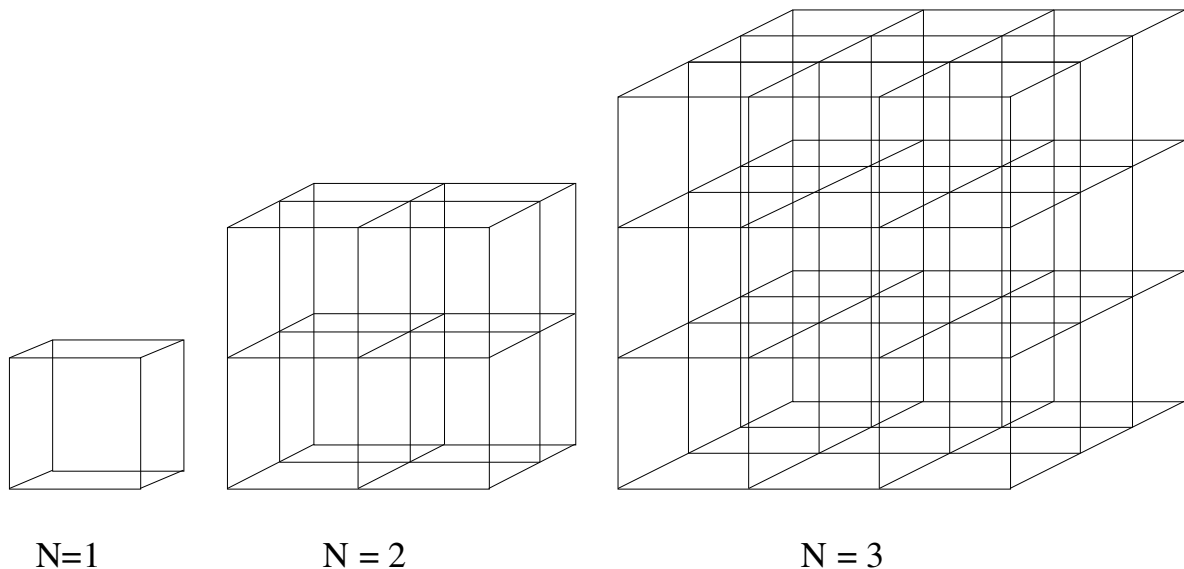
- Beschrijf in woorden het smeltproces op atoom-niveau.
- Waarom heeft (bulk, dus geen nanokristallen) goud een hoger smeltpunt dan water? En waarom hoger dan zilver?
- Waar hangt de bindingssterkte tussen deeltjes blijkbaar vanaf?

Het antwoord bij 5c helpt je nog niet om de smeltpunten van de nanokristallen uit opdracht 2 te verklaren. Blijkbaar is er nog iets anders aan de hand.

Vraag 6. Smeltpunt en verhouding oppervlak/inhoud

We gaan nu onderzoeken hoe de verhouding oppervlakte/inhoud van een stof verandert als de deeltjesgrootte afneemt.

In goud zijn de atomen gestapeld volgens een kubuspatroon. Hieronder zien jullie schematische weergaven van goudkristallen. Elk klein blokje stelt een goudatoom voor.



figuur 4 Kubusmodel stapeling goudatomen

- Bovenstaand plaatje is een eenvoudig model. Dit heeft zijn gebreken. Geef een voorbeeld van zo'n gebrek
- Hoeveel atomen zitten er in totaal in een goudkristal met $N=1$, $N=2$, $N=3$, of $N=n$?
- Hoeveel van deze atomen bevinden zich **niet** aan het oppervlak, dus binnenin het kristal bij $N=2$, $N=3$; $N=n$?
- De diameter van 1 goudatoom is ongeveer 0.3 nm. Hoe groot (ribbelengte) is dus een kristal met $N=1$, $N=2$, $N=3$ of $N=N$?
- Maak nu in EXCEL een grafiek, waarbij je op de x-as de grootte van het kristal uitzet, en op de y-as het percentage van de bouwstenen dat aan de buitenkant van het kristal zit, dus aan het oppervlak.
Tips:
 - Maak 5 kolommen, met N , N_{tot} , N_{opp} , $N_{\text{opp}\%}$, grootte; $N_{\text{opp}\%}$ is de verhouding oppervlakte/volume.
 - Gebruik als formules N^3 voor N_{tot} , en $N^3-(N-2)^3$ voor N_{opp} (zie waarom?)
- Vergelijk deze grafiek met Figuur 1. Wat is je conclusie?

Vervolgonderzoek

Suggesties om verder uit te zoeken:

Zoek nu zelf één of meer interessante voorbeelden van verschijnselen waarbij een grote oppervlakte-volume verhouding van stoffen leidt tot opvallend, onverwacht, vreemd gedrag . Kies zo mogelijk een voorbeeld dat actueel is en dat veel mensen aanspreekt.

Of, ontwerp een demonstratieproef waarbij een grote oppervlakte-volume verhouding van deeltjes tot onverwachte gevolgen leidt. Overleg dan wel met de TOA.

Of, als je graag programmeert, probeer het computermodelletje uit opdracht 2.3 eens te verfijnen, aan te passen (bijv bolletjes ipv kubussen) en ga na of jouw model in overeenstemming is met de experimentele feiten.

Afronding

Maak een *product* waarmee je aan je medeleerlingen of andere geïnteresseerden kunt laten zien wat je onderzocht hebt. Zo'n product kan bijvoorbeeld een poster zijn waarop je smeltcurve voor nano-deeltjes uitlegt of het resultaat van je vervolgonderzoek presenteert.

Bedenk goed wat je publiek volgens jullie (tenminste) geleerd moet hebben als ze kennis hebben genomen van jullie product. Besteed aan die 'boodschap' de meeste aandacht. Je kunt bijvoorbeeld een vraag bedenken die een medeleerling moet kunnen beantwoorden als hij/zij jullie product heeft bestudeerd.