

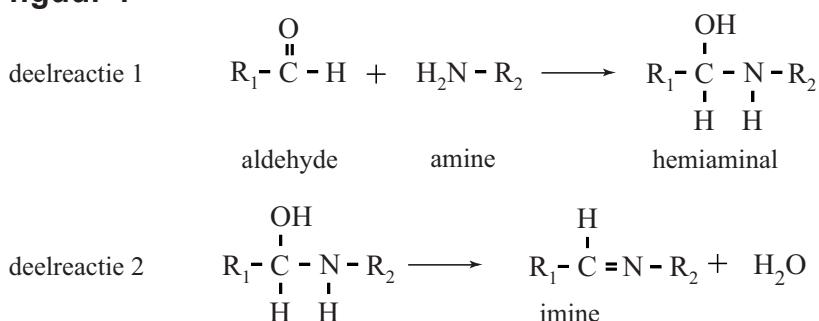
## Reactiemechanisme zichtbaar gemaakt

Chemische reacties die uit verschillende deelreacties bestaan, verlopen vaak zo snel dat tussenproducten niet waarneembaar zijn.

Wetenschappers van de Universiteit van Tokio hebben een poreus materiaal ontwikkeld, waarin de moleculen van een stof kunnen worden ‘opgesloten’. In dit materiaal verlopen de betrokken deelreacties zo traag dat de structuur van de moleculen van de tussenproducten onderzocht kan worden.

De onderzoekers hebben deze aanpak gebruikt om de reactie die in figuur 1 is weergegeven te onderzoeken. In deze reactie wordt uit een aldehyde en een amine een zogeheten imine gevormd. Van deze reactie was al bekend dat deze in twee deelreacties verloopt. Het tussenproduct was echter nog nooit waargenomen.

**figuur 1**



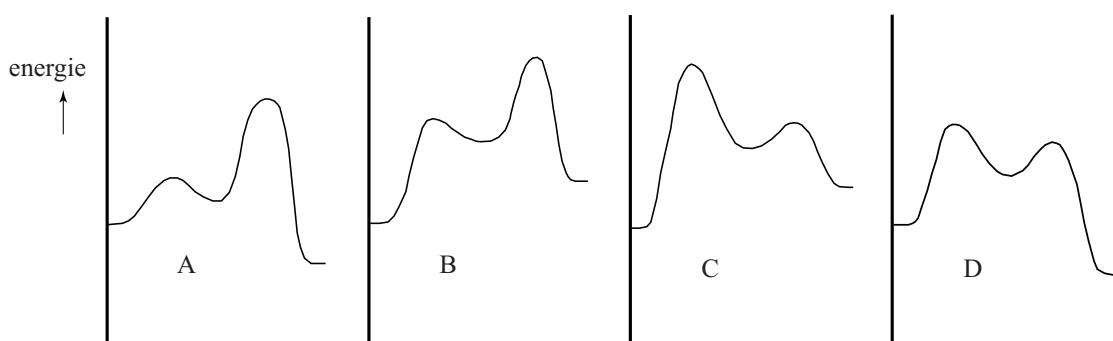
R<sub>1</sub> en R<sub>2</sub> staan in figuur 1 voor koolstofketens. De stof met de algemene benaming hemiaminal is het tussenproduct.

- 3p 12 Geef de structuurformule van het gevormde imine dat via deelreacties 1 en 2 ontstaat uit de stoffen propanal en 2-propaanamine.

Omdat deelreactie 2 veel sneller verloopt dan deelreactie 1, bestaat het hemiaminal heel kort en was daardoor moeilijk aan te tonen. De totale reactie (deelreactie 1 en 2 samen) is exotherm.

In figuur 2 zijn vier energiediagrammen voor reactiemechanismen die uit twee deelreacties bestaan, schematisch weergegeven.

**figuur 2**



- 2p 13 Leg uit welk energiediagram uit figuur 2 het beste past bij het reactiemechanisme van de vorming van een imine.

Om de reactie te onderzoeken maakten de onderzoekers een poreus materiaal, opgebouwd uit grote moleculen die elk één NH<sub>2</sub> groep bevatten. De NH<sub>2</sub> groepen bevinden zich in holtes van het materiaal. Ze brachten het materiaal in contact met ethanal, waardoor hemiaminal-groepen werden gevormd. Omdat de hemiaminal-groepen zich in de holtes van het materiaal bevinden, worden ze afgeschermd van de omgeving en kan deelreactie 2 pas bij hogere temperatuur verlopen. De onderzoekers volgden de volgende vijf stappen.

- 1 Het poreuze materiaal werd bij een temperatuur van 215 K in contact gebracht met ethanal. Hierbij verliep deelreactie 1 volledig.
- 2 De temperatuur werd vervolgens verlaagd tot 90 K.
- 3 Het gevormde tussenproduct werd geanalyseerd met behulp van röntgenonderzoek.
- 4 Na het onderzoek werd de temperatuur verhoogd tot 270 K. Hierbij verliep deelreactie 2 volledig.
- 5 Het gevormde eindproduct werd geanalyseerd met behulp van röntgenonderzoek.

Dat in stap 1 inderdaad een hemiaminal gevormd was, kon aannemelijk worden gemaakt met behulp van röntgenonderzoek. Met röntgenonderzoek kan namelijk de grootte van bindingshoeken tussen atoombindingen worden onderzocht.

Uit het röntgenonderzoek in stap 3 bleek dat de bindingshoeken van het hiernaast omcirkelde C atoom met R<sub>1</sub>-C=O-H andere atomen tijdens de reactie waren veranderd.

Uit het röntgenonderzoek in stap 5 bleek dat deze bindingshoeken opnieuw waren veranderd. De onderzoekers zagen hierin een aanwijzing dat na stap 1 het hemiaminal aanwezig was.

- 2p 14 Leg uit waarom deze veranderingen van bindingshoeken rond het omcirkelde C atoom een aanwijzing zijn voor de vorming van het hemiaminal. Noem in je antwoord de grootte van de bindingshoeken rond het omcirkelde C atoom:
- vóór de vorming van het hemiaminal;
  - nadat het hemiaminal is gevormd;
  - nadat er een imine is gevormd.

Het aantonen van het hemiaminal in stap 3 was een doorbraak voor de Japanse onderzoekers. Toch vonden ze het noodzakelijk om ook stap 4 en 5 uit te voeren.

- 2p 15 Leg uit voor stap 4 én voor stap 5 waarom deze stappen noodzakelijk zijn om vast te kunnen stellen dat het aangetoonde hemiaminal een tussenproduct is in de vorming van een imine.