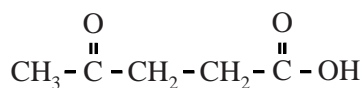


Afvalhout als grondstof

Caprolactam is een belangrijke grondstof waar onder andere nylon van wordt gemaakt. Tot nu toe werd caprolactam geproduceerd uit aardolie. Vanwege de toekomstige schaarste van aardolie wordt er gezocht naar hernieuwbare grondstoffen voor caprolactam. Een nieuwe ontwikkeling betreft de toepassing van afvalhout als grondstof voor caprolactam. Een belangrijk tussenproduct hierbij is levulinezuur ($C_5H_8O_3$). De structuurformule van levulinezuur is hieronder weergegeven.



levulinezuur

De stappen die verlopen bij de omzetting van afvalhout tot uiteindelijk caprolactam zijn hieronder verkort weergegeven.



Voor de productie van levulinezuur wordt een batch bereid van pulp (gemalen afvalhout), geconcentreerd zwavelzuur en water. Het ontstane reactiemengsel bevat 21 massa% afvalhout en 3,0 massa% zwavelzuur. Een batch bevat 200 kg reactiemengsel.

- 2p 1 Bereken het volume in L geconcentreerd zwavelzuur dat nodig is per batch. Maak gebruik van de volgende gegevens:
- Geconcentreerd zwavelzuur bevat 98,0 massa% zwavelzuur.
 - Geconcentreerd zwavelzuur heeft een dichtheid van $1,832 \text{ kg L}^{-1}$.

Een vereenvoudigd en onvolledig blokschema voor de productie van levulinezuur is op de uitwerkbijlage bij vraag 4 weergegeven. Het proces bestaat uit een aantal stappen:

- In een mengkamer M wordt de batch bereid, waarna het reactiemengsel naar reactor R1 wordt geleid.
- In R1 wordt de cellulose uit de pulp eerst omgezet tot onder andere disachariden zoals maltose. Hieruit worden vervolgens levulinezuur, methaanzuur en water gevormd. Er ontstaan tevens bijproducten. Onder de gebruikte omstandigheden verdampt het ontstane methaanzuur en wordt het afgevoerd uit R1.

Het zwavelzuur treedt in R1 op als katalysator.

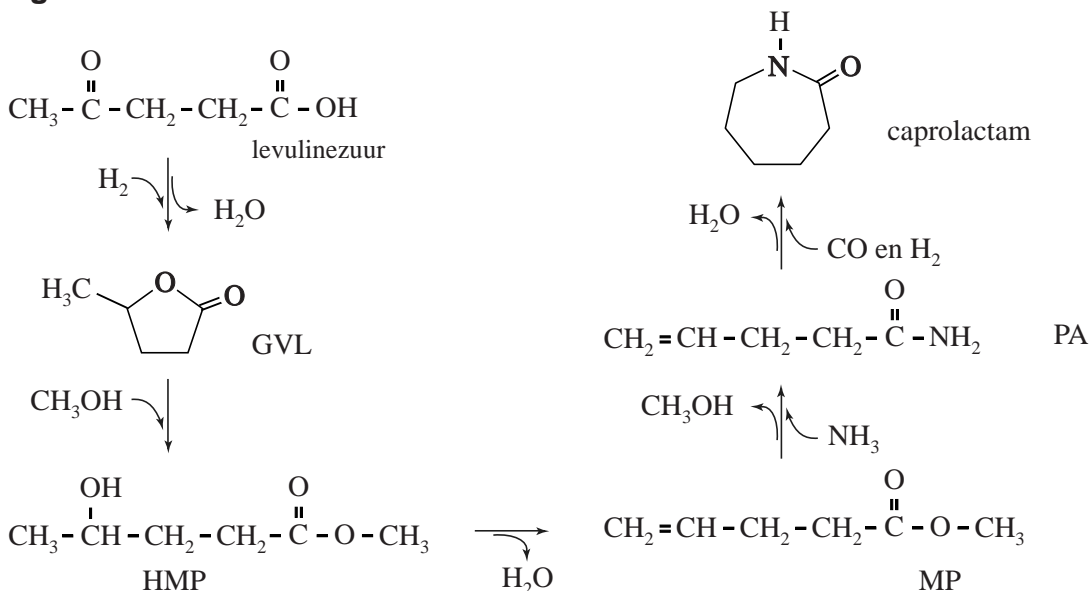
- 3p 2 Geef de vergelijking van de omzetting van maltose tot levulinezuur, methaanzuur en water.
- Gebruik molecuulformules.
 - Gebruik Binas-tabel 67F of ScienceData-tabel 13.1.d.

- Vervolgens wordt de in R1 ontstane suspensie gescheiden in scheidingsruimte 1 (S1). Het vaste afval met daarin alle pulpresten en een deel van het water en zwavelzuur wordt afgevoerd. De rest van het mengsel wordt naar scheidingsruimte 2 (S2) gevoerd.
- In S2 wordt 4-methyl-pentaaan-2-on (MIBK) aan het filtraat toegevoegd.
Levulinezuur en alle bijproducten van de reactie in R1 lossen op in het MIBK en de rest van het zwavelzuur en water niet.
- Het deel van het mengsel met daarin levulinezuur wordt doorgevoerd naar scheidingsruimte 3 (S3).
- In S3 wordt levulinezuur afgescheiden van MIBK en de bijproducten door middel van gefractioneerde destillatie. De bijproducten verlaten S3 aan de onderzijde. De stof met het laagste kookpunt komt boven uit S3.

- 3p 3 Leg uit op microniveau welke stof een lager kookpunt heeft: MIBK of levulinezuur.
- 4p 4 Maak het blokschema op de uitwerkbijlage compleet.
- Noteer ontbrekende pijlen en ontbrekende stoffen bij de pijlen.
 - Houd daarbij rekening met hergebruik van stoffen.

De uiteindelijke omzetting van levulinezuur tot caprolactam is in de figuur weergegeven.

figuur



De omzetting van de stof GVL tot HMP wordt gekatalyseerd door H^+ -ionen. Het O-atoom van de ketongroep van GVL neemt hierbij eerst een H^+ -ion op. Hierbij wordt een deeltje X gevormd. De Lewisstructuur van het deeltje X is op de uitwerkbijlage onvolledig weergegeven. Het deeltje Y is een grensstructuur van deeltje X.

Vervolgens valt het O-atoom van methanol als nucleofiel aan op deeltje Y, waarbij HMP ontstaat.

In het deeltje Y komt een atoom voor waarbij niet wordt voldaan aan de oktetregel.

- 2p 5 Maak op de uitwerkbijlage de grensstructuur van beide deeltjes af. Geef formele lading(en) aan.

Het totale rendement van de omzettingen van levulinezuur tot caprolactam is nog laag.

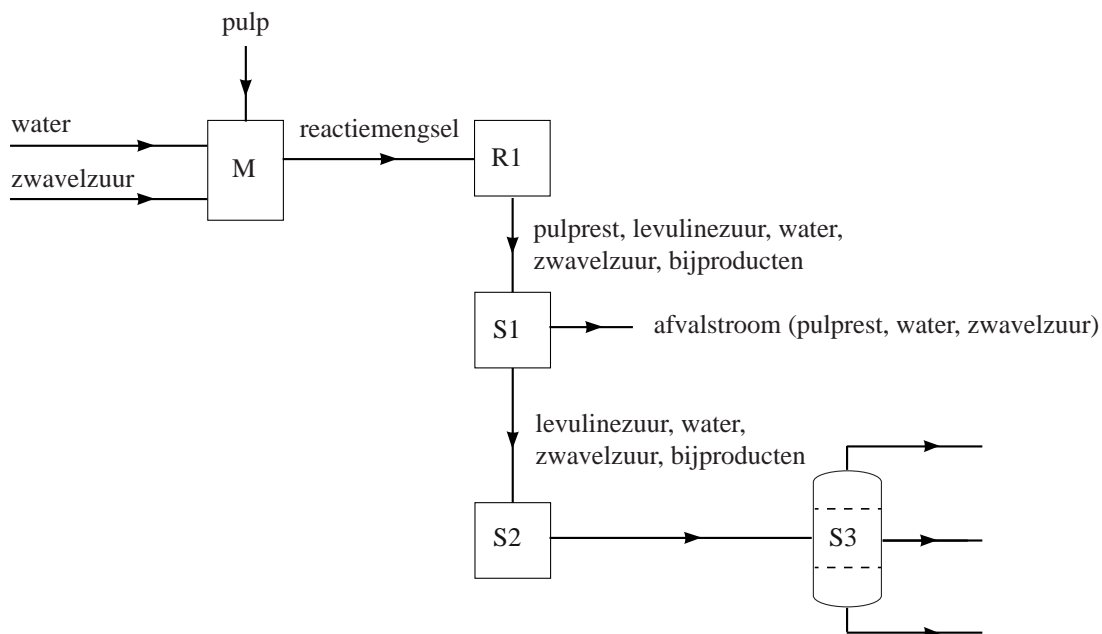
- 3p 6 Geef met behulp van de figuur de totaalvergelijking voor de omzetting van levulinezuur tot caprolactam. Gebruik molecuulformules.
- 2p 7 Bereken de atomeconomie van de omzetting van levulinezuur tot caprolactam volgens de figuur.

Deze productie van caprolactam is ontworpen zodat afvalhout nuttig kan worden gebruikt als hernieuwbare grondstof. Toch kan het proces als geheel nog niet groen worden genoemd op basis van de uitgangspunten van de groene chemie.

- 2p 8 Geef twee argumenten voor de stelling dat deze productie van caprolactam nog niet groen kan worden genoemd.
- Baseer je argumenten op de uitgangspunten 7, 8 en/of 12.
 - Gebruik Binas-tabel 97F of ScienceData-tabel 38.6.

uitwerkbijlage

4



5

