

Diesel uit houtafval

Bij de verwerking van hout tot bijvoorbeeld papier komt veel afvalwater vrij. In een onderzoek is gekeken of het mogelijk is om op industriële schaal dieselachtige koolwaterstoffen te produceren op basis van dit afvalwater. Afvalwater van de papierindustrie bevat een hoog gehalte xylose-oligomeren. Een xylose-oligomeer is een sacharide met de formule $H-(C_5H_8O_4)_n-OH$ met $3 \leq n \leq 20$.

Xylose ($C_5H_{10}O_5$) kan worden voorgesteld als een eenheid (α)D-glucose, waarbij de CH_2-OH -groep op C-atoom nummer 5 is vervangen door een H-atoom.

In een xylose-oligomeer zijn de xylose-eenheden aan elkaar verbonden door middel van de OH-groepen aan de C-atomen met nummers 1 en 4.

- 3p 14 Geef een gedeelte uit het midden van een xylose-oligomeer in structuurformule weer. Dit gedeelte moet zijn ontstaan uit twee eenheden xylose.

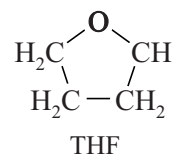
- Gebruik de notatie die ook in het informatieboek wordt gehanteerd.
- Gebruik Binas-tabel 67F1 of ScienceData-tabel 13.1d.

De onderzoekers hebben op basis van het onderzoek een productieproces ontworpen. Op de uitwerkbijlage bij vraag 19 is het vereenvoudigde blokschema voor dit proces onvolledig weergegeven. Het proces start met de volledige hydrolyse van de xylose-oligomeren tot xylose. Hiertoe worden in reactor 1 (R1) zoutzuur en een oplossing van xylose-oligomeren geleid. Beide oplossingen worden zo gedoseerd, dat aan het begin van de reacties het gehalte xylose-oligomeren 2,1 massa% is. Er is dan 3,1 mol HCl aanwezig per mol xylose-eenheden.

- 4p 15 Bereken de pH van het reactiemengsel ($T = 298 \text{ K}$).
- De dichtheid van de gebruikte xylose-oplossing is $1,08 \cdot 10^3 \text{ g L}^{-1}$.
 - De molaire massa van een xylose-eenheid is 132 g mol^{-1} .
 - Neem hier aan dat nog geen xylose is ontstaan.

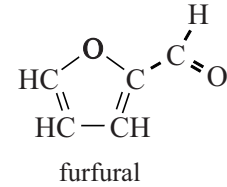
Aan het mengsel wordt tevens THF toegevoegd.

De structuurformule van THF is hiernaast weergegeven. Omdat de oplosbaarheid van THF in water laag is, ontstaan in R1 twee vloeistoflagen.



- 3p 16 Voer de volgende opdrachten uit:
- Leg uit op microniveau waardoor THF oplosbaar is in water.
 - Leg uit dat deze oplosbaarheid laag is.

In R1 verloopt ook de omzetting van xylose tot furfural en bijproducten. De structuurformule van furfural is hiernaast weergegeven.

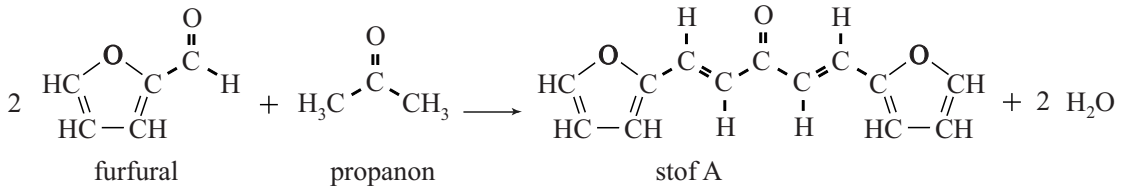


In R1 ontstaat 1 mol furfural uit 1 mol xylose. Het gevormde furfural lost op in de THF-laag, waardoor volgreacties van furfural met water worden beperkt.

Na afloop van de reacties wordt natriumchloride toegevoegd aan het reactiemengsel. Hierdoor wordt THF volledig onoplosbaar in water en kan in scheidingsruimte 1 (S1) de THF-laag volledig worden gescheiden van de waterlaag. De waterlaag met daarin zoutzuur, natriumchloride en bijproducten wordt opgeslagen.

De THF-laag met daarin alleen furfural wordt doorgevoerd naar reactor 2 (R2). In R2 wordt aan het mengsel dat afkomstig is uit S1 één mol propanon per twee mol furfural toegevoegd en een overmaat natronloog.

In R2 worden furfural en propanon volledig omgezet tot stof A. De vergelijking voor deze omzetting is hieronder weergegeven.



De vorming van stof A verloopt via een aantal tussenstappen. Twee stappen uit het reactiemechanisme zijn op de uitwerkbijlage weergegeven. In stap 2 wordt stof B gevormd.

Hierbij neemt een OH^- -ion eerst een H^+ -ion op van het organische deeltje dat in het kader is weergegeven. Het OH^- -ion treedt in stap 2 op als katalysator.

2p 17 Voer de volgende opdrachten uit:

- Geef op de uitwerkbijlage in het kader alle niet-bindende elektronenparen weer.
- Geef met pijlen weer hoe elektronenparen worden verplaatst tijdens stap 2.

In scheidingsruimte 2 (S2) wordt de THF-laag met daarin uitsluitend stof A volledig afgescheiden van de vloeistoflaag met daarin het natronloog. Omdat het natronloog geen organische stoffen bevat, kan het worden hergebruikt in het proces. Om de reactie in R2 telkens onder gelijke omstandigheden te laten verlopen, moet het natronloog in een ruimte Z worden bewerkt voordat het wordt teruggevoerd in R2.

2p 18 Leg uit welke bewerking in ruimte Z wordt uitgevoerd zodat het natronloog uit S2 geschikt is voor hergebruik.

Het mengsel van THF en stof A wordt doorgevoerd naar reactor 3 (R3). In R3 reageert stof A volledig met waterstof tot tridecaan ($C_{13}H_{28}$) en water. Het ontstane tridecaan is onvertakt.

Het mengsel afkomstig uit R3 wordt ten slotte in scheidingsruimte 3 (S3) gescheiden in drie stromen: tridecaan, water en THF.

Het tridecaan kan worden gebruikt als toevoeging aan diesel of een andere brandstof.

- 4p **19** Maak het blokschema op de uitwerkbijlage compleet.
- Noteer ontbrekende pijlen en stoffen bij de pijlen. Houd daarbij rekening met hergebruik van stoffen.
 - Wanneer bij een stofstroom al stofnamen zijn vermeld, hoeft niets te worden aangegeven.
- 3p **20** Geef de totaalvergelijking voor de vorming van tridecaan uit xylose. Gebruik molecuulformules.
- 2p **21** Bereken de atomeconomie van deze vorming van tridecaan uit xylose.