Dit branchemagasin fra TechMedia A/S

Dansk Kemi

Nummer 1 - Februar 2020 / 101. årgang

Kemisk Forening - Kemiingeniørgruppen

Lever cannabisprodukter op til varedeklarationen?

Afdækning af syrekorrosion i maritime dieselmotorer

Fremtidig phosphatmangel truer

dialabxpo.dk

STYRK DIT NETVÆRK OG SKAB NYE RELATIONER

På diagnostik- og laboratoriebranchens mødested

DiaLabXpo

MCH Messecenter Herning
29. sept. - 1. okt. 2020

Messe for diagnostik- og laboratoriebranchen

INDHOLD

1 **Forside:**
Ikke alle cannabisholdige produkter har en retvisende varedeklaration. Læs mere side 6.

5 **Verdensmål nr. 4: Kvalitetsuddannelse**
Det overordnede mål er, at alle, uanset køn, i 2030, skal have lige adgang til kvalitetsuddannelse til en overkommelig pris.

6 **Kan vi stole på varedeklarationerne på cannabisprodukter?**
Der er stor forskel på kvaliteten af varedeklarationen for de forskellige typer cannabisprodukter. Olierne med cannabidiol (CBD) har det deklarerede indhold, men det har hamp-te ikke.

9 **Syrekorrosion i store maritime dieselmotorer**
Optimal smøring af cylinderforingerne i dieselmotorer er nødvendig for at opretholde en god beskyttelse mod korrosive angreb fra den svovlholdige bunkerolie.

12 **Computerbaseret design af organiske coatings**
En metode til at reducere ressourceforbrug i praktisk formulering og til at identificere mere miljøvenlige erstatninger for uønskede råvarer i organiske coatings.

15 **NMR-spektroskopi og det periodiske system**
^{1}H og ^{13}C NMR-spektroskopi anvendes rutinemæssigt i organisk kemi, men næsten alle grundstoffer i det periodiske system har en spin-isotop, som kan studeres med NMR-spektroskopi.

19 **Vi får et problem**
Verdens ressourcer af phosphat varer ikke evigt. Derfor er der behov for politisk lederskab.

22 **Ny opdagelse om skadelige partikler**
Forskere fra Københavns Universitet har opdaget et overraskende fænomen i den proces, hvori visse gasmolekyler danner sundhedsskadelige partikler.

24 **Boganmeldelse af lagerøl**
Hvordan du smager og brygger verdens mest populære øl.

26 **Smagssekskanten brugt til dressinger**
Dressing, dip, spread eller sauce – hvad er forskellen?

31 **Sidste nyt fra IDA Kemi**

TechMedia

Naverland 35
2600 Glostrup
Telefon 43 24 26 28
info@techmedia.dk
www.techmedia.dk

Redaktion:
Katrine Meyn (ansvarshavende)
km@techmedia.dk
Lektor Søren Kiil
sk@kt.dtu.dk
Ph.d. Kristian B. Krogh
kbk@novozymes.com
Professor Henrik Skov
hsk@envs.au.dk
Maria Bech Poulsen
mabp@envs.au.dk

ISSN 0011-6335 (tryk)
ISSN 1902-360x (online)

Ledelse:
Adm. direktør Peter Christensen
Direktør Rikke Marott Schelde
Direktør Susanne Eine

Redaktionskomité:
Professor Anne S. Meyer (formand)
Professor, dr. scient. Mikael Bols
Professor Morten J. Bjerrum (Kemisk Forening)
Lektor, dr. phil. Carl Th. Pedersen
Lektor, ph.d. Peter Szabo (Kemiingeniørgruppen)
Professor, forskningschef Lars Wiebe
Lektor, civilingeniør, ph.d. Merete Norsker Bergsøe
Vibeke Richter Foërsom (Næstformand, Kemilærerforeningen)
Konsulent Nikolai Stubkjær Nilsen Procesindustrien
Seniorforsker, ph.d. Peter Have Rasmussen
Gruppeleder, EHS, FMC site Rønland
Inge Margrethe Jensen
Fagkonsulent Mette Malmqvist

Bladsekretær
Heidi Thode
Tlf. 43 24 26 62
ht@techmedia.dk

Annoncer:
Jesper Bækmark
Tlf. 43 24 26 77
jb@techmedia.dk

Annonceproduktion:
Marianne Dieckmann
Tlf. 43 24 26 82
md@techmedia.dk

Hjemmeside:
www.kemifokus.dk

Layout: Trine Plass
Tryk: PE Offset A/S

Trykt på miljøvenligt papir med vegetabilske miljøfarver.

Abonnement:
Ændring/opsigelse sendes til:
abonnement@techmedia.dk
Bestil abonnement direkte på:
www.techmedia.dk

Oplag: 4.196
Online læsere: 2.138

Citater fra artikler i Dansk Kemi skal ske med tydelig kildeangivelse. Enhver form for gengivelse af artikler, herunder illustrationer, forudsætter udgiverens skriftlige tilladelse.
Redaktionen kan ikke påtage sig ansvaret for materiale, der indsendes uopfordret.

UK: Huson European Media -
Tel.: (+44) 1932-564999
USA, New York: Huson International Media
Tel.: +1 212 268 3344
USA, California: Huson International Media
Tel.: +1 408 879 6666
Germany: Huson International Media
Tel.: (+49) 89-9500-2778

Scan og hent Dansk Kemi's medieinformation 2020 her!
Hent QR Scanner, hvor du normalt henter apps.

LEDER

Hvem er meningsdannerne?

> Fysikere og kemikere bør være massivt repræsenteret blandt opinionsdannerne, blandt andet for at få udviklet egnede batterier

Det er almindeligt, at pressen i en af de sidste udgaver i året laver en oversigt over, hvem der har sat dagsordenen i det forløbne år. Overskriften i Politikens debatsektion i år fra den 28. december lyder: ”De satte dagsordenen i 2019”.

Bladrer man et par sider videre i bladet, er overskriften på siden: ”Her er debattens superliga”.

Man bliver her præsenteret for billederne af 60 personer forsynet med en kort beskrivelse og et tal, der skal give udtryk for, hvor højt de står på ranglisten over opinionsdannere. Politiken har bedt 34 dommere fra medie-, forlags- og uddannelsesverdenen om at give karakter til 100 udvalgte meningsdannere og debattører, heraf præsenteres de 60 højest placerede i bladet.

Det interessante er nu, hvor kommer disse debattører og meningsdannere fra i samfundet? Det viser sig ikke overraskende, at det store flertal er politikere. Meningsdannelse og debat er jo deres job. En anden stor gruppe er nogle med tilknytning til pressen, journalister, redaktører og tv-folk. Enkelte litterære forfattere har også sneget sig ind.

En gruppe, der glimrer ved sit totale fravær, er naturvidenskabsfolk af enhver observans. Når man ellers ser, hvad der optager pressen, det gælder både den trykte som den digitale presse, er det klimaet. Når vi skal finde ud af, hvad skal vi gøre for at mindske de problematiske udslag af den livsform, vi har valgt, er det klart, at de problemer, vi står overfor, ikke løses af ”debattens superliga”.

En stor del af de problemer, vi står overfor, er jo udløst af forureningen fra energiproduktionen, det være både den stationære som den mobile. Størstedelen af denne energiproduktion foregår ved hjælp af fossilt brændsel, olie eller kul, som begge bidrager kraftigt til CO_2-produktionen og dermed klimaforandringerne.

En umiddelbar energikilde, der ikke direkte bidrager til forureningen, er jo atomspaltningen, men den giver så et alvorligt forureningsproblem på lang sigt med opbevaring af spaltningsprodukterne. Fusionsreaktorer giver ikke dette problem; men er ikke så udviklede endnu og meget dyre at konstruere, så dem kan vi ikke satse på på kort sigt. Vi må derfor satse på en mere intensiv udnyttelse af vind-, sol- og havbølgeenergi. De er alle tre forureningsfrie; men lider alle af den skavank, at de ikke er konstante. Man må derfor kunne opbevare energien, når der er for meget af den, som oftest i form af elektricitet, og her er vi langt fra målet. Vores batterier er alt for dårlige til opbevaring af store energimængder. Vi har derfor brug for, at fysikere og kemikere er massivt repræsenteret blandt opinionsdannerne, blandt andet for at få udviklet egnede batterier.

Dette er blot et enkelt eksempel på naturvidenskabens centrale placeringer. Ser vi på Politikens liste over debattens superliga, er vi langt fra målet.

Carl Th. Pedersen, cthp@sdu.dk

AGA skifter navn til Linde

I januar 2020 ændrede AGA sit firmanavn til Linde. AGA har været en del af Linde siden år 2000, og det har været koncernens navn i de nordiske lande og Baltikum.

AGA fortsætter dog som produktnavn for virksomhedens propan, danskvandsprodukter og gasudstyr.

Navneskiftet fandt formelt sted i januar 2020. Virksomhedens synlige aktiver såsom produktionsfaciliteter, bygninger, køretøjer, gastanke, udstyr med mere vil overgå til det nye design i løbet af en overgangsperiode.

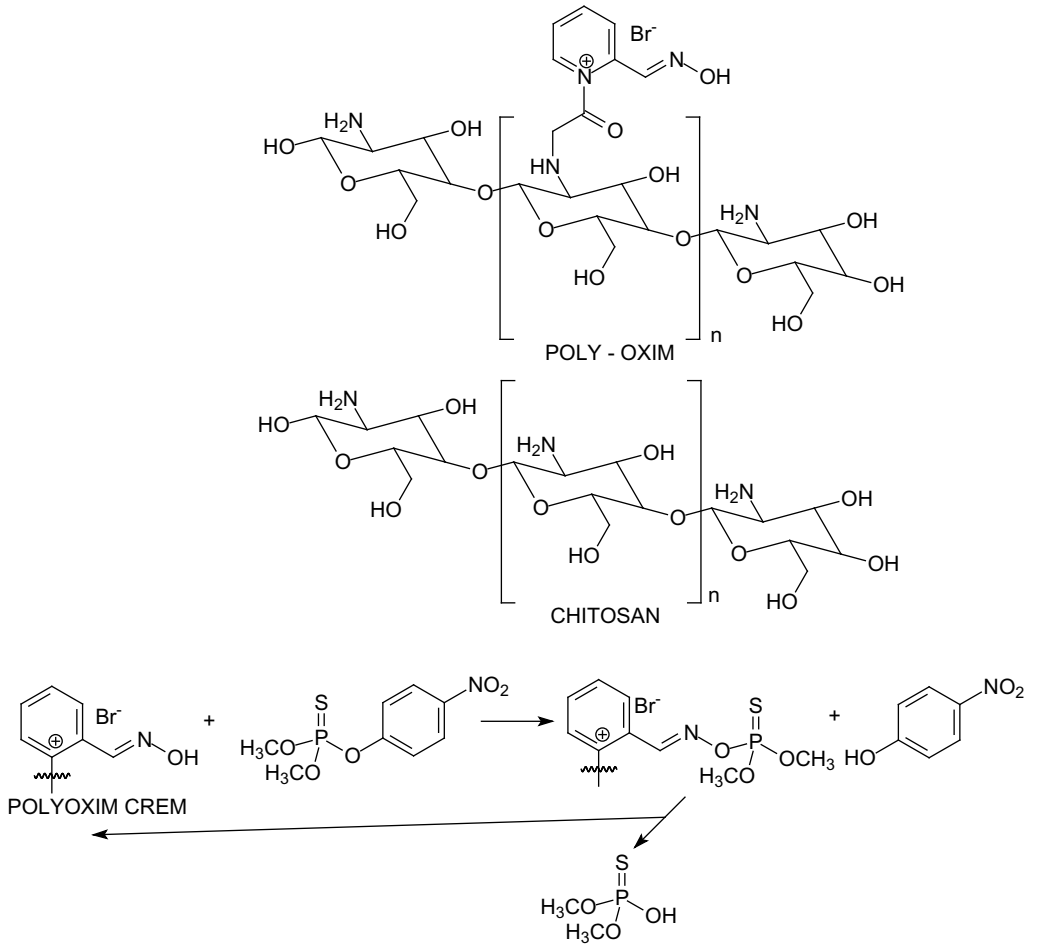
Nyt om …

… Beskyttelsescreme mod pesticider

Brugen af organophosphat pesticider i landbruget kan give alvorlige neurologiske problemer hos dem, der er beskæftiget med dem. Organophosphaterne er såkaldte acetylcholinesterase hæmmere. Acetylcholinesterase nedbryder acetylcholin, en vigtig neurotransmitter. Hæmningen af esterasen kan medføre ødelæggelse af nerver og lammelser. Oximer kan nedbryde organophosphaterne og dermed afgifte dem. Indiske forskere har kombineret en pyridinaldehyd oxim med polysaccharidet chitosan og har hermed fået et stof, der kan doseres som en creme, der på huden kan spalte organophosphaterne, inden de optages i organismen.

Carl Th.

Prevention of Pesticide-induced neuronal dysfunction and mortality with nucleophilic poly-Oxime topical gel.*Science Advances* 2018 **4**eaau1780, DOI: 10.1126/sciadv.aau1780.



4 KVALITETS-UDDANNELSE

Verdensmål nr. 4:

Kvalitets-uddannelse

Foto: Annie Spratt, Unsplash.

Relaterede verdensmål:

- Mål 1: Afskaf fattigdom
- Mål 2: Stop sult
- Mål 3: Sundhed og trivsel
- Mål 5: Ligestilling mellem kønnene
- Mål 8: Anstændige jobs og økonomisk vækst
- Mål 13: Klimaindsats
- Mål 16: Fred, retfærdighed og stærke institutioner
- Mål 17: Partnerskab for handling

Mere end 100 millioner unge mennesker (heraf mere end 60 procent kvinder) mangler basale skolekundskaber. Det overordnede mål er, at i 2030 har alle, uanset køn, lige adgang til kvalitetsuddannelse til en overkommelig pris. At opnå en kvalitetsuddannelse er et af de mest effektive midler for en bæredygtig udvikling. Således opfattes Mål 4 som et af de vigtigste mål, da det danner basis for de øvrige verdensmål.

De store udfordringer findes blandt andet i det faktum, at adgangen til basale tjenester som rent vand og elektricitet forhindrer, ikke mindst pigerne, i at gå i skole, ligesom naturkatastrofer som oversvømmelser og tørke kan føre til, at børn i kortere eller længere tid udebliver fra skolen.

Det er nødvendigt at forbedre adgangen til de basale tjenester som for eksempel rent vand, herunder ikke mindst at bidrage til en fornuftig håndtering af kemikalier og affald, og herigennem frigøre tid til børnene, så de kan gå i skole. I denne sammenhæng skal nævnes, at den kemiske industri støtter kvalitetsuddannelse samtidig med at støtte livslang læring globalt. Sigtet er en kapacitetsopbygning med henblik på blandt andet at tage fat på problemstillingen inden for miljø- og bæredygtig udvikling, samt at skabe "grønne" og anstændige jobs og virksomheder, hvor en ekspertise i at maksimere de gavnlige anvendelser af kemi er en vigtig del.

Som eksempel kan nævnes DuPont, der årligt tildeler betragtelige midler til nye lovende forskerspirer, hvor programmets mål er at hjælpe unge forskningsstudenter uden fast ansættelse til at påbegynde deres forskningskarriere samtidig med at styrke gensidige gavnlige relationer og forskningspartnerskaber.

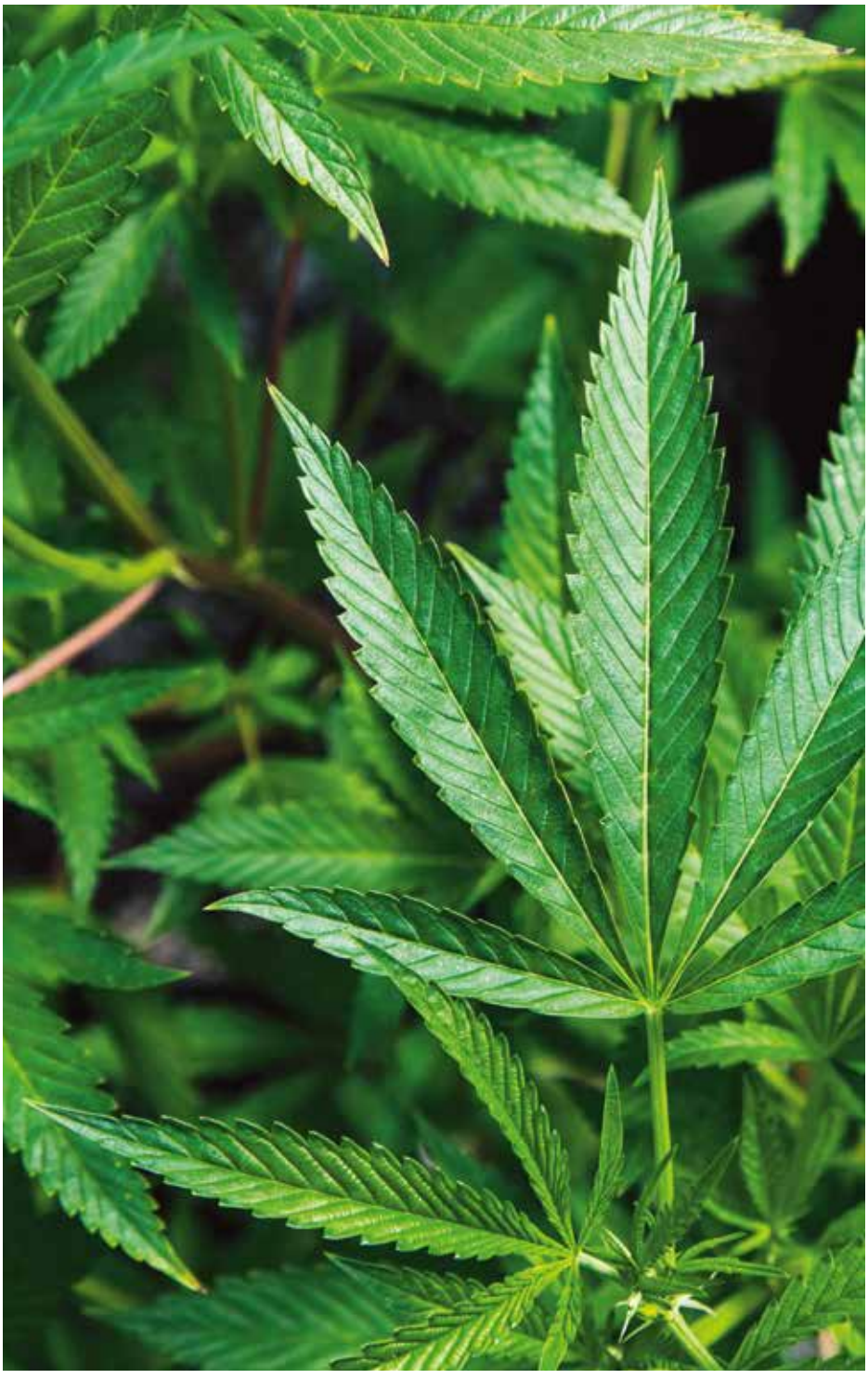
Vigtigheden af undervisning kan sammenfattes i *Malala Yousafzai's udsagn* "one child, one teacher, one pen and one book can change the world".

Lars Carlsen, lc@awarenesscenter.dk

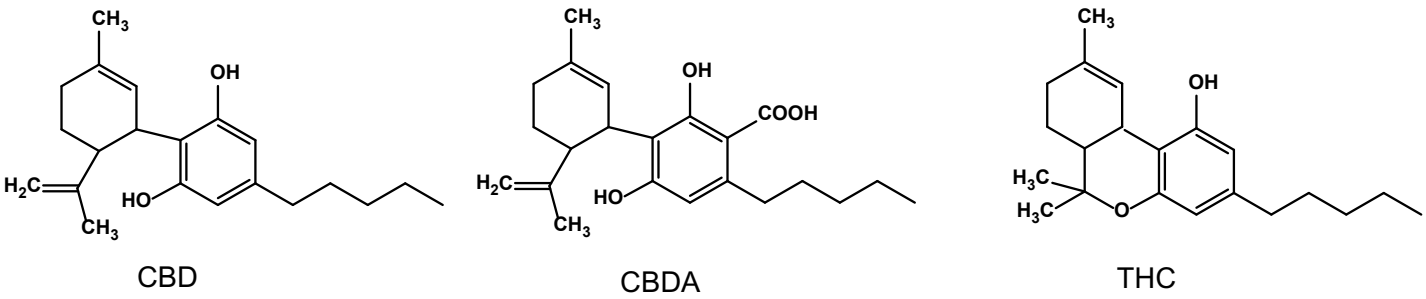
For detaljer om verdensmål 4, se:
https://sustainabledevelopment.un.org/sdg4

Kan vi stole på varedeklarationerne på cannabisprodukter?

Det varierer meget mellem de forskellige typer cannabisprodukter. Olierne med cannabidiol (CBD) har det deklarerede indhold, men hamp-te indeholder overvejende syreformen af CBD (CBDA), og stofferne kan ikke ekstraheres ved normal tebrygning. Tyggegummi indeholder den lovede mængde CBD, men kun en mindre del kan udtrækkes ved tygning.



Af Emil Høeg Andersen, Michael Lyngbæk Christensen, Sebastian Helboe Empacher, Anas Kamhieh og Torben Lund, Institut for Naturvidenskab og Miljø, Roskilde Universitet [1]



Figur 1. Strukturformler af Cannabidiol (CBD), Cannabidiolsyre (CBDA) og Tetrahydrocannabinol (THC).

Et stigende antal produkter baseret på cannabisplanten markedsføres som kosttilskud og lægemidler. Alene i USA var der i 2016 en omsætning på omkring 7 milliarder dollars inden for lovlige cannabisprodukter. Da cannabis mange steder er ved at blive legaliseret, forventes det, at omsætningen inden for cannabissektoren kommer til at vokse markant i de kommende år.

Den mest benyttede cannabisplante, *Cannabis Sativa L* (typisk plante anvendt i industrihamp), indeholder mere end 550 forbindelser, hvoraf 70-115 er cannabinoider [2]. De to hyppigst forekommende cannabinoider i *Sativa L* er cannabidiol (CBD) og cannabidiolsyre (CBDA), som udgør sammenlagt op til to procent af plantens tørvægt. CBD og CBDA, se figur 1, er ikke psykoaktive, hvilket vil sige, at de ikke har nogen effekt som rusmiddel. Tetrahydrocannabinol THC er derimod psykoaktivt og må ikke overskride en vægtprocent på 0,2 procent i cannabisprodukter [3]. En række kliniske forsøg har vist, at CBD kan være effektivt som kosttilskud eller lægemiddel mod en række forskellige lidelser ved blandt andet at virke smertelindrende, reducere muskelspasmer hos Parkinson-patienter og dæmpe kvalme ved kemoterapi. Cannabisprodukter markedsføres med et angivet indhold af CBD, men passer deklarationen på produktet med det faktiske indhold af CBD?

Den amerikanske Food and Drug Administration (FDA) har siden 2015 undersøgt indholdet i en lang række cannabisprodukter. Dette har resulteret i, at mange af producenterne har modtaget advarsler for vildledende markedsføring [4]. Også i Danmark markedsføres en lang række CBD-produkter. Vi har derfor valgt at analysere indholdet i en række produkter, som er frit tilgængelige på det danske marked. Dette har fået os til at stille følgende spørgsmål: Kan man stole på, at der er de indholdsstoffer i produkterne, som producenterne deklarerer?

Figur 2. Billede af de indkøbte CBD-produkter.

Indkøbte produkter

Vi indkøbte fem forskellige CBD-produkter fremstillet ud fra lovlige hampplanter, se figur 2:

- Te med 4% CBD fra Nordic Oil
- Pille med 50 mg CBD fra firmaet Endoca
- Olie med 15% CBD fra Endoca, olie med 2% CBD fra Nordic Oil
- E-cigaretvæske med 1% CBD fra Nordic Oil
- Tyggegummi med 15 mg CBD pr. stykke fra Endoca.

Eksperimentelt

Olierne, pillerne og E-væskeolien blev opløst i metanol, og en kop te blev brygget på kogende vand. Tebladene blev endvidere ekstraheret med metanol. En portion teblade blev opvarmet til

130°C i 60 minutter, og herefter blev en del ekstraheret med kogende vand og en anden del med metanol. Et stykke tyggegummi samt et stykke tygget tyggegummi blev behandlet med flydende kvælstof og ekstraheret med en blanding af metanol og toluen i forholdet 2:1. Alle prøver blev analyseret for CBD og CBDA med HPLC koblet til elektrospray massespektrometri (LC-MS). Standardkurver blev optaget med CBD fra Sigma-Aldrich og ren fremstillet CBDA isoleret fra industrihamp fra Møllerup Gods på Djursland.

Resultater

Produkt	Opløsnings-middel	Deklareret CBD-indhold	Målt indhold af CBD	Det faktiske indhold af CBDA
CBD-te	Metanol	40 mg/g	2 mg/g	24 mg/g
CBD-te	Vand	40 mg/g	0 mg/g	8 mg/g
CBD-te 130°C*	Metanol	40 mg/g	5 mg/g	0 mg/g
CBD-te 130°C*	Vand	40 mg/g	0 mg	0 mg/g
	-	-	-	-
CBD tyggegummi	Metanol +toluen	15 mg/stk.	12 mg/stk.	0 mg/stk.
CBD tygget tyggegummi	Metanol +toluen	-	7 mg/stk.	0 mg/stk.
	-	-	-	-
CBD Endoca olie	Metanol	15 mg/ml	8 mg/ml	0 mg/ml
CBD Nordic olie	Metanol	2 mg/ml	0,5 mg/ml	0 mg/ml
CBD E-væske	Metanol	1 mg/ml	0,6 mg/ml	0 mg/ml

*: Teen er dekarboxyleret ved opvarmning til 130°C i 60 minutter.

Tabel 1. Indhold af CBD og CBDA i de indkøbte hampprodukter.

Diskussion

Tyggegummi

I forsøgene med tyggegummi var det mest effektivt at ekstrahere med en blanding af 10 ml metanol og 5 ml toluen. I dette eksperiment var udbyttet 78 procent af det deklarerede indhold, svarende til 12 mg CBD pr. stk. Det virker derfor realistisk, at produktet indeholder de 15 mg CBD, som producenten har angivet. Derimod er det ved tygning kun muligt at ekstrahere under halvdelen af CBD'en i tyggegummiet.

Te

Vandet blev kogt og teen sat til at trække i fem minutter, ligesom almindelige forbrugere ville gøre. Her viste det sig, at det kogte vand ikke indeholdt CBD overhovedet og kun meget lidt CBDA. Med metanol kunne vi ekstrahere 2 mg/g CBD, hvilket er fem procent af det deklarerede indhold, samt 16 mg/g CBDA. Formentlig har producenten ikke skelnet mellem CBDA og CBD og ikke tjekket, om kogende vand kunne ekstrahere stofferne. Ved at opvarme tebladene til 130°C i 60 minutter omdannes CBDA-indholdet ved termisk dekarboxylering til CBD. Vi kunne efterfølgende med metanol udtrække 5 mg/g CBD, svarende til 13 procent af det deklarerede indhold. Konklusionen på vores teundersøgelse er, at forbrugeren intet CBD-udbytte får af at tilberede teen, som man normalt vil tilberede te.

Olier

Vi har analyseret to forskellige CBD-olier og en væske til E-cigaretter. Formentlig er disse produkter fremstillet ved først at ekstrahere et råprodukt med CBDA fra hampen og derefter behandle blandingen termisk, hvorved CBDA-indholdet omdannes til CBD. Herefter tilsættes det dannede CBD til hamp-olie. Vores analyser gav et CBD-indhold i olierne på mellem 28-58 procent af den deklarerede mængde. Ingen af olierne indeholdt CBDA, så disse produkter er alle blevet dekarboxyleret, hvilket også fremgår af deklarationen. Samlet set indeholdt olierne nogenlunde den rigtige mængde CBD og ingen CBDA. Olierne må derfor betragtes som gode produkter, der holder, hvad de lover, med et CBD-indhold, der svarer nogenlunde til det deklarerede indhold.

Konklusion

Vi har analyseret CBD og CBDA i fem forskellige cannabisprodukter ved hjælp af LC-MS. CBD-olierne indeholder stort set de deklarerede mængder CBD. Ved normal tebrygning med kogende vand kan man ikke ekstrahere CBD og kun meget ringe mængder CBDA. Fra et stykke tyggegummi kunne der ekstraheres nogenlunde den anførte mængde CBD med metanol og toluen, men kun en mindre del heraf kan ekstraheres fra tyggegummiet ved normal tygning. Vi kan konkludere, at det ikke er alle produkter, som lever op til det deklarerede indhold. Ifølge vores eksperimenter bør man som forbruger anvende CBD-olier, da de generelt indeholder de angivne indholdsstoffer og mængder.

E-mail:
Torben Lund: tlund@ruc.dk

Referencer

1. Artiklen er baseret på et 2. semesterprojekt på den naturvidenskabelige basisuddannelse på Roskilde Universitet i foråret 2019 med T. Lund som vejleder: E.H. Andersen, M.L. Christensen, S.H. Empacher, A. Kamhieh, "Undersøgelse af indholdsstoffer i cannabisprodukter", RUC 2019.
2. P.F. Whiting, R.F Wolff, S. Deshande er al. Cannabinoids for medical use: A systematic review and meta analysis, J. Am. Med. Assoc. 313 (2015) 2456-2473.
3. https://laegemiddelstyrelsen.dk/da/special/medicinsk-cannabis/borgere/aendringen-af-thc-graensen-fra-1-juli-2018/?fbclid=IwAR249cuxr-vDI0GBMW2kOVd5ZOAkdvaZ-8nmyHbVTbUDYpyIaMI7o4PqALQ.
4. US food & drug administration, 2015. Warning Letters and Test Results for Cannabidiol-Related Products. Online fra https://www.fda.gov/news-events/public-health-focus/warning-letters-and-test-results-cannabidiol-related-products?fbclid=IwAR2k-jQQsc5BHlXwcc3CdB--.

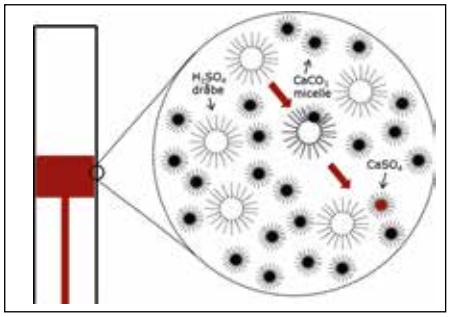
Syrekorrosion i store maritime dieselmotorer

For at opnå en højere brændselseffektivitet er der sket betydelige ændringer i skibsdrift og motordesign i de senere år. Det har betydet, at en optimal smøring af cylinderforingerne er nødvendig for at opretholde en god beskyttelse mod korrosive angreb fra den svovlholdige bunkerolie. Men hvordan fastlægges retningslinjer for optimal smøring i de komplekse to-takts dieselmotorer, og hvad er de bagvedliggende mekanismer for syrekorrosionen?

Af Kasper Hartvig Lyng Lejre[1], Henrik Christensen[2], Stefan Mayer[2], Peter Glarborg[1] og Søren Kiil[1]

[1] Institut for Kemiteknik, DTU
[2] MAN Energy Solutions

Den maritime transportsektor har gennemgået betydelige ændringer i de senere år. En af de mest markante er, at skibene nu kan sejle med reducerede hastigheder, hvorved de sparer brændstof i et marked med overskud af oceangående containerskibe. De nye forhold, i kombination med forbedrede motordesign og anlægsjusteringer, har resulteret i en stigende kondensering af vand og syre på cylinderforingerne i motorerne, hvilket fremmer en kombination af korrosion og slid (såkaldt "kold korrosion"). Som en konsekvens er levetiden af foringerne faldet betydeligt. Den kondenserende svovlsyre, H_2SO_4, stammer i øvrigt fra svovl bundet i brændslet.



Figur 1. Illustration af hvordan omvendte $CaCO_3$-holdige miceller kan neutralisere H_2SO_4-dråber i en smøreolieemulsion på cylinderforingen i en to-takts dieselmotor efter følgende reaktion: $H_2SO_4+CaCO_3 \rightarrow CaSO_4+CO_2+H_2O$. Efter [4].

For at modvirke korrosion, formuleres smøreolien med kalkholdige additiver, såkaldte omvendte miceller med en diameter på 5-10 nm [1], som vist i figur 1. Kalken, $CaCO_3$, neutraliserer svovlsyren under dannelse af gips.

Flere motorforbedringer, med henblik på at øge brændselseffektiviteten yderligere, er på vej, og indvirkningerne af disse på korrosivt slid er ukendte og vanskelige at forudsige. Derudover, drevet af tilgængelighed, pris og strengere udledningsreguleringer, vil forskellige brændsler kunne bringes i spil, både svovlfattige og svovlrige, som kan forbrændes i motoren med efterfølgende rensning af udstødningsgassen. De ændringer/forbedringer stiller yderligere krav til optimal smøring af motoren.

En samlet indsats

Forståelse og kvantificering af de underliggende mekanismer bag dannelse, kondensation og neutralisering af SO_2/H_2SO_4 samt det korrosive slid fra SO_2/H_2SO_4 i to-taktsmotorerne har været hovedfokus i det netop afsluttede SULCOR-projekt (se faktaboks). Ved brug af matematiske modeller og eksperimentelle undersøgelser er der fundet løsninger, som kan bidrage til at sikre en optimal smøreoliestrategi. I alt bidrog fire ph.d.-studerende og to postdocs til projektet.

Indeværende arbejde har bidraget med studier i, hvordan SO_2 og H_2SO_4 neutraliseres af kalkholdige omvendte miceller i smøreoliefilmen i en marin dieselmotor. Det indebar at designe og konstruere eksperimentelt udstyr og analysemetoder samt udvikle matematiske modeller. Detaljer fra forskningen kan findes i en ph.d.-afhandling [2] og i de tre artikler, der indtil videre er udgivet [3-5]. De udviklede værktøjer kan anvendes i modeller, som beskriver en komplet to-taktsmotor, se figur 2, side 10, herunder estimering af kondensationshastigheden af svovlsyre og korrosionshastigheden af cylinderforingsoverfladen af det ikke-omsatte SO_2/H_2SO_4 i smøreolieemulsionen med det formål at bestemme optimale smøringsstrategier.

Hvordan nedskaleres interaktionen mellem syredråber og kalkmiceller fra motorcylinder til laboratoriet?

Da det er meget vanskeligt at undersøge, hvad der sker på en cylinderforing i en marin dieselmotor under drift på grund af det vertikalt hurtiggående stempel ▶

SULCOR – Svovlsyrekorrosion i store maritime dieselmotorer

Partnere:

DTU Kemiteknik
DTU Mekanik
MAN Energy Solutions
Universität Rostock
Lunds Universitet
University of Southampton

Projektfokus:

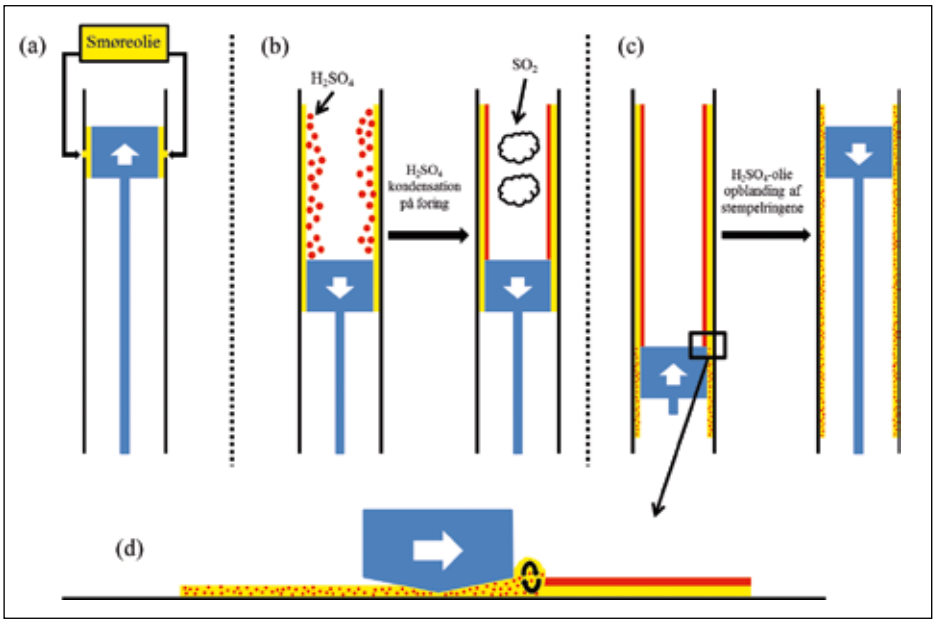
Forstå og formulere de mekanismer, som ligger bag dannelsen og kondensationen af svovlsyre i to-takts dieselmotorerne med henblik på at vise veje til at minimere korrosion og smøreolieforbrug.

Figur 2. En ottecylindret to-takts marin dieselmotor. Foto: Lektor Philip Loldrup Fosbøl. Gengivet med tilladelse.

(lukket system ved op til 260°C og 180 bar [6]), blev det fundet nødvendigt at designe forsøgsopstillinger til at kortlægge reaktionerne mellem syredråber og kalkmiceller i en smøreolie under kontrollerede betingelser. Ved samtidig opstilling af matematiske modeller for processen blev det muligt at relatere forsøgene fra de simple laboratorieopstillinger til fuldskala motorforhold.

I figur 3 er vores antagelse vist vedrørende opblanding af syredråber i smøreolie. Det foregår effektivt på grund af de forbipasserende stempelringe; en velomrørt hvirvel dannes foran stempelringene, figur 3d. Ydermere ses det, at ny syre og smøreolie hele tiden trækkes ind i hvirvlen og det formodes derfor, at reaktionen mellem syredråber og kalkmiceller i smøreolie i en motor kan beskrives ved brug af en velomrørt reaktor med kontinuerlig fødning af syredråber og smøreolie. Forsøgsopstillingen kan ses i figur 4.

Betragtes derimod reaktionen mellem SO_2 og kalkmiceller i smøreolien, så ses det i figur 3, at SO_2 først skal absorberes af smøreoliefilmen, før en reaktion kan finde sted. Derfor valgte vi en batchreaktor forsøgsopstilling til denne reaktion, figur 5. De anvendte analysemetoder var Fourier Transform Infrarød (FTIR) spektroskopi og en titreringsmetode til at kvantificere omdannelsen af kalk under de specifikke forsøgsbetingelser.



Figur 3. Illustration af (a) smøreoliedosering, (b) dannelse af H_2SO_4 og SO_2 under forbrændingen samt kondensering af H_2SO_4 på cylinderforingen, (c) opblanding mellem H_2SO_4 og smøreolie og (d) nærbillede af en stempelring (hvirvlen angiver, hvor opblandingen finder sted).

Resultater af forsøg og simuleringer

For H_2SO_4-$CaCO_3$ reaktionen i den velomrørte reaktor viste resultaterne, at det første trin i reaktionen er emulgering af H_2SO_4 i smøreolien efterfulgt af reaktion mellem de emulgerede H_2SO_4-dråber og de $CaCO_3$-omvendte miceller. For de undersøgte opholdstider blev det fundet, at reaktionen mellem H_2SO_4 og $CaCO_3$ var betydeligt reduceret, når et kritisk lavt indløbsmolforhold for $CaCO_3/H_2SO_4$ blev anvendt. En vis grad af omrøring viste sig at være nødvendig for at igangsætte og opretholde reaktionen. En fortynding af indgangskoncentrationen af H_2SO_4 førte til en reduceret omdannelse af $CaCO_3$, sandsynligvis på grund af tilsætningen af en stor mængde vand, hvilket resulterede i nedsat emulgering af H_2SO_4-dråberne. En matematisk model for processen kunne beskrive forsøgene i den velomrørte reaktor. En temperaturafhængig reaktionshastighed for reaktionen blev bestemt kvantitativt og den validerede matematiske model blev brugt til at forudsige omdannelse af H_2SO_4 i en smøreolie under betingelser, der er relevante for en fuldskalaapplikation. Beregningerne viste, at H_2SO_4 muligvis interagerer med cylinderforingsoverfladen, uafhængigt af hvor godt

Figur 4. Venstre: Billede af den velomrørte reaktoropstilling med indfødning af H_2SO_4 og smøreolie. Højre: Billede af reaktoren under et forsøg.

befugtet overfladen er. Det ses i figur 6, hvor koncentrationen af H_2SO_4 i smøreoliefilmen er vist for forskellige temperaturer; en højere temperatur resulterer i en højere omdannelse (lavere koncentration) af H_2SO_4 i smøreolien. De 260°C svarer til foringstemperaturen i toppen af cylinderen ved fuld motorlast. Selvom det meste af H_2SO_4 er omdannet ved denne temperatur, ifølge figur 6, så er det også i denne position, at det meste af svovlsyren kondenserer [7,8].

Ved undersøgelse af SO_2-$CaCO_3$ reaktionen i batchreaktoren blev det fundet, at $CaSO_3$ dannes til at begynde med, efterfulgt af $CaSO_4$ dannelse ved længere opholdstider og stigende temperatur. En matematisk model er blevet udledt og kinetiske parametre bestemt ved at tilpasse modellen til de eksperimentelle data. Batchreaktormodellen blev anvendt til beregning af $CaCO_3$ omdannelse i en smøreolieemulsion fra reaktion med SO_2 under de værst tænkelige betingelser, der er relevante for en fuldskalaapplikation. Simuleringerne viste, at forbruget af $CaCO_3$ fra reaktion med SO_2 er ubetydelig i en to-takts dieselmotor og at H_2SO_4-$CaCO_3$ reaktionen er langt hurtigere end SO_2-$CaCO_3$ reaktionen.

Konklusion

Det viste sig muligt at undersøge reaktionerne mellem SO_2-$CaCO_3$ og H_2SO_4-$CaCO_3$ i smøreolie under kontrollerede betingelser i to forskellige, nye forsøgsopstillinger. Matematiske modeller er blevet opstillet og efterfølgende brugt til at forudsige omsætningen af $CaCO_3$ omvendte miceller for betingelser relevant for en motorapplikation. Resultaterne har relevans for fremtidigt arbejde til udledning af en overordnet motormodel, som kan estimere det resulterende slid af cylinderforingen ved specifikke motorbetingelser. Den nye viden kan anvendes til at bestemme optimale motordesign og smøringsstrategier til yderligere formindskelse af smøreolie- og brændselsforbrug.

For en uddybende beskrivelse af emnet henvises til nedenstående referencer.

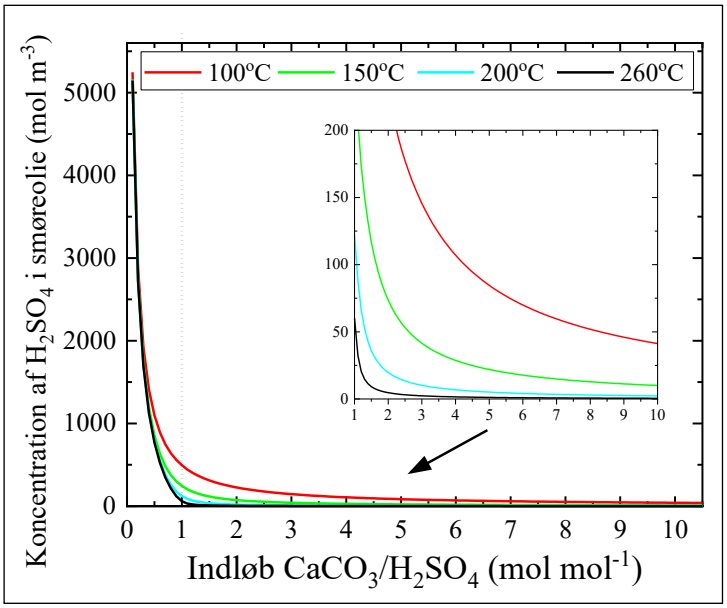
Tak til Innovationsfonden (4106-00028B) for støtte til forskningsarbejdet.

E-mail:
Søren Kiil, sk@kt.dtu.dk

Figur 5. Venstre: Billede af batchreaktoropstillingen, hvor følgende komponenter ses: varmekappe, stålreaktor, omrører, indfødningslinjer samt trykmåler. Højre: Billede af glasforing med en reageret smøreolieprøve. Foringen blev placeret inde i stålreaktoren og herefter opvarmet og tryksat med SO_2 og luft.

Referencer

1. CIMAC Working Group 8 "Marine Lubricants," "CIMAC Recommendation 31: The lubrication of two-stroke crosshead diesel engines." 2017.
2. K.H.L. Lejre, "Mechanisms of sulfur dioxide and sulfuric acid neutralization in lube oil for marine diesel engines. Ph.D. Afhandling," Danmarks Tekniske Universitet, DTU, Kgs. Lyngby, 2019.
3. K.H.L. Lejre, S. Kiil, P. Glarborg, H. Christensen, and S. Mayer, "Reaction of Sulfuric Acid in Lube Oil: Implications for Large Two-Stroke Diesel Engines," *in Proceedings of the ASME 2017 Internal Combustion Engine Division Fall Technical Conference,* 2017, vol. 1, pp. 1-10.
4. K.H.L. Lejre, P. Glarborg, H. Christensen, S. Mayer, and S. Kiil, "Mixed Flow Reactor Experiments and Modeling of Sulfuric Acid Neutralization in Lube Oil for Large Two-Stroke Diesel Engines," *Ind. Eng. Chem. Res.,* vol. 58, no. 1, pp. 138-155, Jan. 2019.
5. K.H.L. Lejre, P. Glarborg, H. Christensen, S. Mayer and S. Kiil, "Experimental Investigation and Mathematical Modeling of the Reaction between SO_2(g) and $CaCO_3$(s)-containing Micelles in Lube Oil for Large Two-Stroke Marine Diesel Engines," *Chem. Eng. J.,* er blevet accepteret til udgivelse. Jan. 2020.
6. L. García, S. Gehle, and J. Schakel, "Impact of Low Load Operation in Modern Low Speed 2-Stroke Diesel Engines on Cylinder Liner Wear Caused by Increased Acid Condensation," *J. JIME,* vol. 49, no. 1, pp. 100-106, 2014.
7. K.M. Pang, N. Karvounis, J.H. Walther, J. Schramm, P. Glarborg, and S. Mayer, "Modelling of temporal and spatial evolution of sulphur oxides and sulphuric acid under large, two-stroke marine engine-like conditions using integrated CFD-chemical kinetics," *Appl. Energy,* vol. 193, pp. 60-73, 2017.
8. N. Karvounis, K.M. Pang, S. Mayer, and J.H. Walther, "Numerical simulation of condensation of sulfuric acid and water in a large two-stroke marine diesel engine," *Appl. Energy,* vol. 211, pp. 1009-1020, Feb. 2018.



Figur 6. Simuleringsresultater som viser koncentration af H_2SO_4 i en smøreoliefilm som funktion af indløbsmolforhold mellem H_2SO_4 og $CaCO_3$ ved motorbetingelser (temperaturer mellem 100 og 260°C).

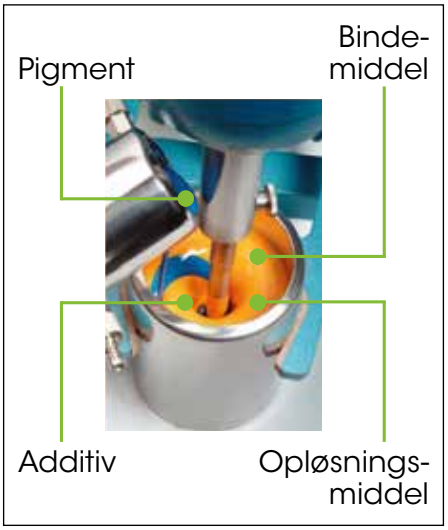
Computerbaseret design af organiske coatings

En metode til at reducere ressourceforbrug i praktisk formulering og til at identificere mere miljøvenlige erstatninger for uønskede råvarer i organiske coatings.

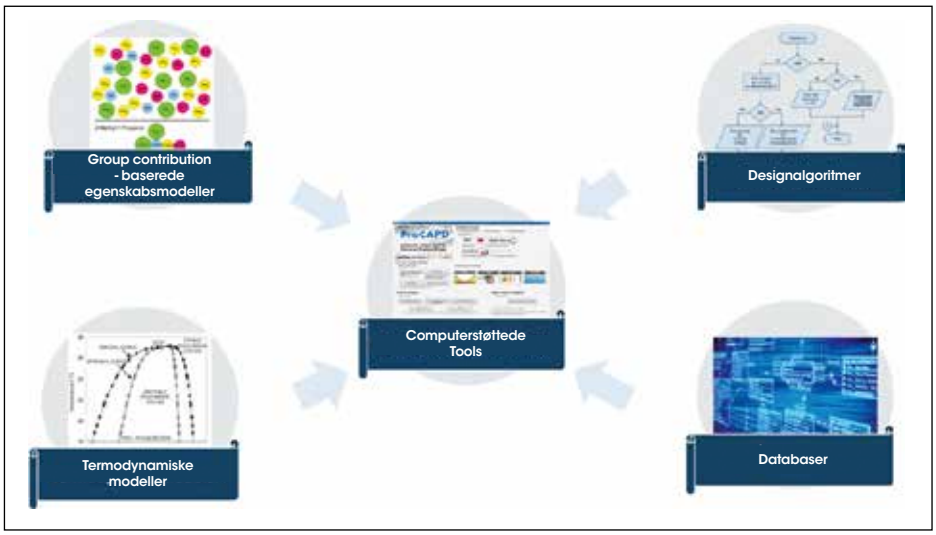
Af Spardha Jhamb[1,2], Xiaodong Liang[2], Kim Dam-Johansen[1] og Georgios M. Kontogeorgis[1,2]

[1] CoaST
[2] KT Consortium og CERE, DTU Kemiteknik

”Ansvarligt forbrug og produktion” er et af FN’s17 mål for bæredygtig udvikling [1]. Et af de områder, hvor man kan optimere forbrug af ressourcer samt finde bæredygtige alternativer til ingredienser, er ved design af formulerede produkter. Området er i dag typisk karakteriseret ved en empirisk tilgang til formuleringen, næsten uden brug af teoretiske værktøjer. I dette arbejde forsøger vi ved hjælp af computerbaseret design, dels at reducere antallet af eksperimenter der er krævet for en given udvikling, dels at udvikle værktøjer til at identificere mere miljøvenlige erstatninger for uønskede råvarer i formulerede, organiske coatings.



Figur 1. Hovedkomponenter i en typisk organisk coatingformulering.



Figur 2. Metoder og tools, der understøtter computerbaseret design af coatings. Se referencer [3-5] for mere information.

Organiske coatings anvendes på mange typer overflader, lige fra landbaserede og marine industrielle anlæg, over skibe til offentlig infrastruktur og private hjem. Coatingen kan give materialet, der er coatet, forbedret holdbarhed, nye funktionelle egenskaber og selvfølgelig farve og glans.

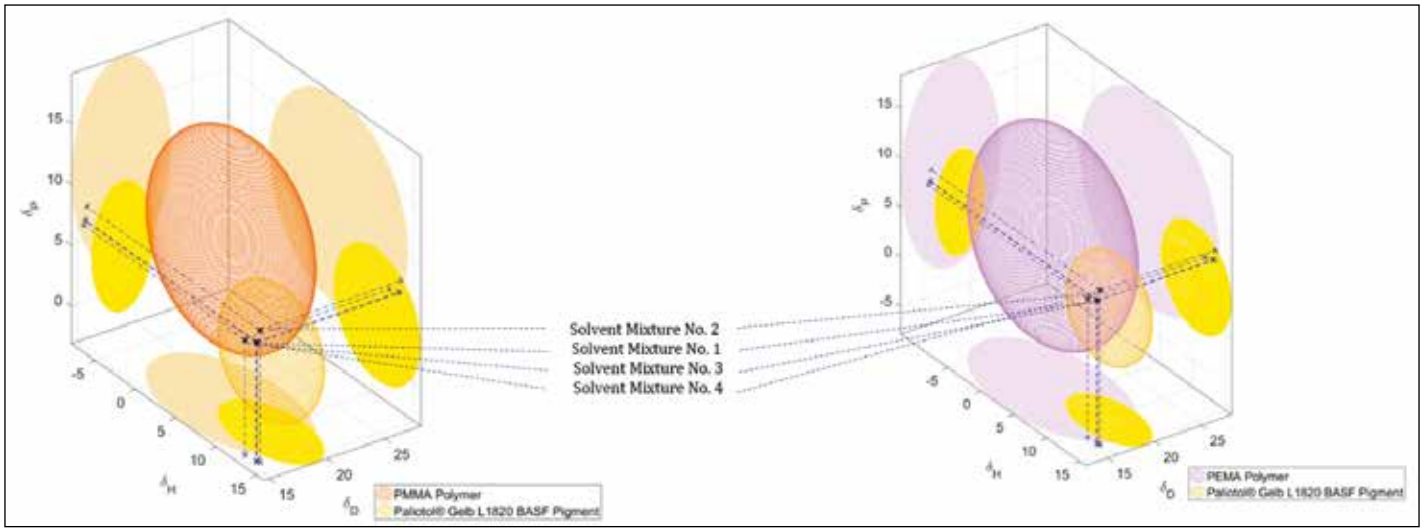
Typisk formulering af coatings

En organisk coating består typisk af fire hovedkomponenter: bindemiddel, opløsningsmiddel, pigmenter og additiver [2], figur 1. En polymer fungerer typisk som bindemidlet og tilvejebringer sterisk stabilisering af pigmentpartiklerne, et organisk opløsningsmiddel eller vand fungerer som viskositetsregulerende middel, og additiver kan anvendes til regulering af et utal af egenskaber ved formuleringen. Afhængig af anvendelsesområdet kan partikler anvendes dels som billigt fyldstof, dels til at give coatingen en særlig funktion. Mest kendt er farvepigmenter, men partikelfasen kan for eksempel også bruges til at ændre transportegenskaber i coatingen, til at hindre korrosion af substratet som coatingen beskytter, til kontrolleret frigivelse af aktive stoffer eller til at give coatingen katalytiske egenskaber.

Den typiske formulering af organiske coatings tager i dag udgangspunkt i erfaring, og de fleste nye coatings designes med udgangspunkt i eksisterende formuleringer, der modificeres med nye ingredienser.

Hvordan bruger man computer i formulering af coating?

Et alternativ til ren erfaringsbaseret formulering er at kombinere computerbaserede beregningsmetoder med eksperimenter. Metoden baserer sig på, at kvantitative egenskaber for de enkelte ingredienser defineres og alternative



Figur 3. Fire opløsningsmiddelblandinger til at sprede "Paliotol Yellow L1820 BASF"-pigmentet med to akrylpolymerer.

ingredienser screenes baseret på forskellige fysisk-kemiske beregningsmetoder – herunder gruppe-bidragsmetoder.

Det er målet, at antallet af mulige alternative ingredienser reduceres, og det eksperimentelle arbejde hermed reduceres betydeligt.

Conte et. Al [3] har foreslået formuleringsdesign baseret på fire trin:

1. Først oversættes de kvalitative kravspecifikationer til coatingen til egenskaber, der kan kvantificeres.
2. Derefter vælges de aktive ingredienser i formuleringen, dvs. pigmenter og bindemidlet.
3. I trin 3 designes opløsningsmiddelblandingen.
4. Til sidst vælges additiver.

For at understøtte denne metode anvendes et sæt algoritmer, et omfattende modelbibliotek og databaser, figur 2. Disse er tilgængelige via computerstøttede beregningsprogrammer som ICAS [4] og ProCAPD [5].

Design af opløsningsmidler til coatingformuleringer

Opløsningsmidler tegner sig for op mod en tredjedel af omkostningerne i organiske coatingformuleringer [6] og de er vigtige for coatingens egenskaber – både under påføring og tørring/hærdning [7]. Valg af opløsningsmiddel er således en vigtig del af formuleringen.

Anvendeligheden af den udviklede computerbaserede metode er testet i dette projekt igennem et eksempel, som involverer dispergering af pigmentpartikler. Designkriterier for opløsningsmidlet er anført i tabel 1. Fire opløsningsmiddelblandinger beregnes til at kunne være kandidater til at dispergere "Paliotol Yellow L1820 BASF"-pigmentet, når enten

Brugerbehov	Ønskede egenskaber	Designkriterier
opløser polymeren	opløsningsmidlets totale Hansen opløselighedsparameter ($\delta_{HSP,sol}$)	$\delta_{HSP,pol} - 3 < \delta_{HSP,sol}$ (MPa^{½}) $< \delta_{HSP,pol} + 3$
Lav viskositet	dynamisk viskositet (η_{298K})	$0.6 < \eta_{sol,298K}$ (cP) < 0.9
tilstrækkelig befugtning	molvolumen ($V_{m,298K}$), overfladespænding (σ_{298K})	$100 < V_{m,298K}$ (l·kmol^{-1}) <130; $26.5 < \sigma_{298K}$ (mN·m^{-1}) < 29.5
god stabilitet (til opløsningsmiddelblandinger)	Gibbs energi fra blanding (ΔG_{mix}), tangentplanafstand (TPD)	ΔG_{mix} / RT < 0; TPD > 0

Tabel 1. Designkriterier for computerbaseret design af opløsningsmiddel til spredning af "Paliotol Yellow L1820 BASF"-pigmentet.

No.	Mixture			x_1
1	2-ethyl hexanol (1)	+	2-propanol, 1-propoxy (2)	0,11
2	ethylen glycol monopropyl ether (1)	+	2-propanol, 1-propoxy (2)	0,38
3	2-Propanol, 1-propoxy- (1)	+	Ethanol, 2-butoxy-, (2)	0,7
4	2-Propanol, 1-propoxy- (1)	+	Ethanol, 2-butoxy-, acetat (2)	0,69

Tabel 2. Fire opløsningsmiddelblandinger til at sprede "Paliotol Yellow L1820 BASF"-pigmentet ved brug af den computerbaserede designmetode, der er beskrevet i artiklen.

polymethylmethacrylat (PMMA) eller polyethylmethacrylat (PEMA) anvendes som bindemiddel.

Resultatet vises i figur 3 og tabel 2.

Opløsningsmiddelkandidaterne er enten en blanding af "alkoholer og alkoxylerede alkoholer" eller "alkoxylerede alkoholer og glykolethere", tabel 1. Disse

klasser af organiske forbindelser bruges i formuleringen af akryllakker til autofinish [8]. Derfor vurderes resultaterne opnået fra den computerbaserede designmetode til at være fyldestgørende til at dispergere det valgte organiske pigment i de to akrylpolymerer.

Konklusion

Den computerbaserede metode gør det muligt for en formuleringskemiker at nå frem til en specifik liste over mulige opløsningsmiddelblandinger. Kemikeren kan derfor indskrænke antallet af kandidater blandt de tilgængelige opløsningsmidler. I praksis er anvendelsen af de computerstøttede design-algoritmer begrænset af tilgængeligheden, pålideligheden og nøjagtigheden af de anvendte fysisk-kemiske modeller til at forudsige egenskaberne. For eksempel er modeller for vand som opløsningsmiddel stadig for usikre til at kunne anvendes til computerbaseret design.

Fremtidsperspektiver

Anvendelsesområdet for computerbaseret formulering udvides konstant igennem udvikling af nye og stadig forbedrede modeller. Når de nødvendige modelparametre for nye komponenter er estimeret og pålideligheden af modellerne er verificeret, kan de relativt let tilføjes til modelbiblioteket. Der er dog stadig en del arbejde før nøjagtigheden af beregning af komplekse systemer bliver tilstrækkelig. Vi forventer, at fremtiden vil vise en kombination af fundamentale værktøjer baseret på fysisk-kemisk viden suppleret med maskinlæringsalgoritmer, der løbende kan inddrage eksperimentel erfaring.

E-mail:
Georgios M. Kontogeorgis: gk@kt.dtu.dk

Referencer
1. United Nations. Sustainable Development Goals (accessed Jul 25, 2019).
2. Turner, G.P.A. Introduction to Paint Chemistry and Principles of Paint Technology; 2011, DOI 10.1007/978-94-009-1209-0.
3. Conte, E.; Gani, R.; Ng, K.M. Design of Formulated Products: A Systematic Methodology. AIChE J. 2011, 57 (9), 2431-2449, DOI 10.1002/aic.12458.
4. Gani, R.; Hytoft, G.; Jaksland, C.; Jensen, A.K. An Integrated Computer Aided System for Integrated Design of Chemical Processes. Comput. Chem. Eng. 1997, 21 (10), 1135-1146, DOI 10.1016/S0098-1354(96)00324-9.
5. Kalakul, S.; Zhang, L.; Fang, Z.; Choudhury, H.A.; Intikhab, S.; Elbashir, N.; Eden, M.R.; Gani, R. Computer Aided Chemical Product Design – ProCAPD and Tailor-Made Blended Products. Comput. Chem. Eng. 2018, 116, 37-55, DOI 10.1016/j.compchemeng.2018.03.029.
6. Wu, D.T. Applications of Computers in Coatings Research and Development. J. Ind. Text. 1987, 17 (1), 22-40, DOI 10.1177/152808378701700104.
7. Wilson, S.K. The Levelling of Paint Films. IMA J. Appl. Math. (Institute Math. Its Appl. 1993, 50 (2), 149-166, DOI 10.1093/imamat/50.2.149.
8. Dow. Product Information Glycol Ethers for Automotive Coatings Applications Automotive OEM.

Foto: Freestockcenter, Freepik.com

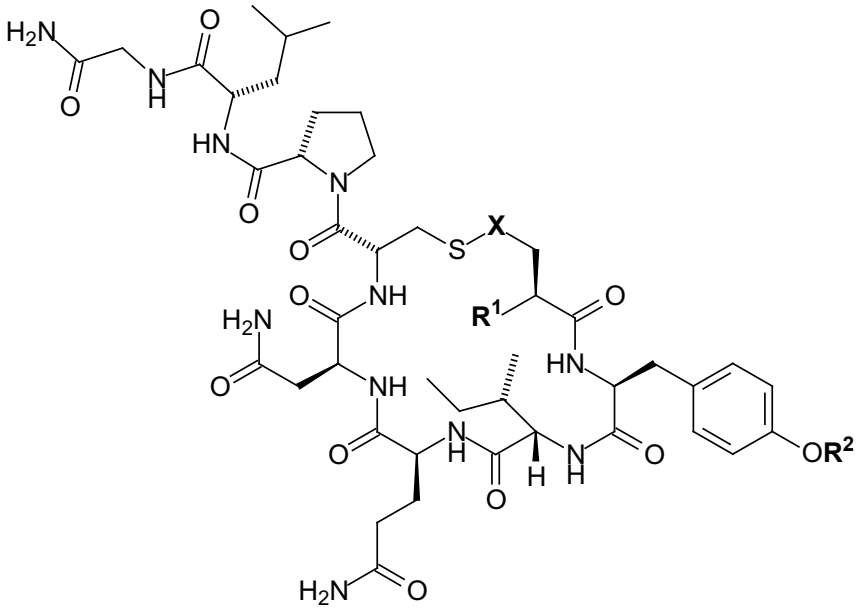
Nyt om …

… Blødninger ved fødsel

70.000 kvinder, heraf 99 procent i den 3. Verden, dør årligt af blødninger efter en fødsel. Disse blødninger kan hindres ved indgift af det naturlige hormon oxytocin. Oxytocin er imidlertid varmefølsomt og nedbrydes, hvis det opbevares ved for høj temperatur. En opbevaringstemperatur på 2-8°C anbefales, hvilket ofte vil være et problem i den 3. Verden. Det er imidlertid nu lykkedes at modificere oxitocin ved fremstilling af carbetocin, der kan opbevares tre år ved 30°C, uden at ændres. Carbetocin har samme virkning på blødningerne som oxytocin. Forskellen mellem de to stoffer ligger i substituenterne X, R^1 og R^2.

Carl Th.

Heat-Stable Carbetocin versus Oxytocin to Prevent Hemorrhage after Vaginal Birth, *New England Journal of Medicine*, august 2018, DOI: 10.1056/NEJMoa1805489.



Carbetocin : X = CH_2, R^1 = H, R^2 = CH_3

Oxytocin : X = S, R^1 = NH_2, R^2 = H

NMR-spektroskopi og det periodiske system

^{1}H og ^{13}C NMR-spektroskopi anvendes rutinemæssigt i organisk kemi, men næsten alle grundstoffer i det periodiske system har en spin-isotop, som kan studeres med NMR-spektroskopi.

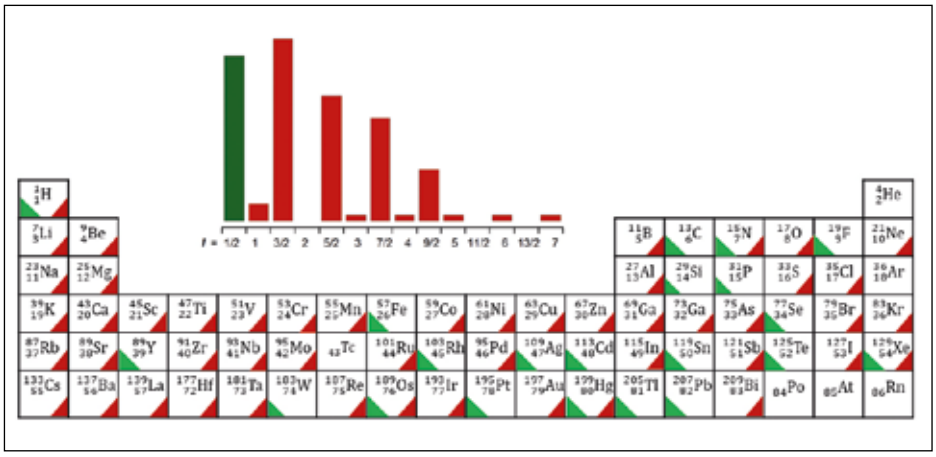
Af Jørgen Skibsted, Laboratoriet for Faststof NMR Spektroskopi af Uorganiske Materialer, Institut for Kemi og Interdisciplinært Nanoscience Center (iNANO), Aarhus Universitet

Væskefase 'nuclear magnetic resonance' (NMR) spektroskopi er i dag en af de vigtigste analysemetoder inden for organisk kemi til strukturbestemmelse af molekylære forbindelser. Her udnyttes oftest spin-isotoperne ^{1}H, ^{13}C og ^{15}N, hvorfra strukturerne bestemmes ud fra deres kemiske skift og indbyrdes spin-spin vekselvirkninger, som kan detekteres i én- eller multidimensionale korrelationsspektre.

NMR-spektroskopi er mindre udbredt i strukturanalyser af faste stoffer, hvilket reflekterer, at teknikken normalt ikke kan give samme strukturelle information, som opnås med røntgendiffraktionsteknikker for krystallinske forbindelser. Det kemiske skift og andre spin-vekselvirkninger afhænger primært af spin-kernernes nærmeste omgivelser og giver derfor primært information om nær-ordenen for den observerede spinkerne. Dette har den fordel, at amorfe forbindelser detekteres på lige fod med krystallinske faser, og faststof NMR-spektroskopi kan dermed give et vigtigt supplement til den information, som opnås med røntgendiffraktion og andre analyseteknikker for faste stoffer.

Spin-isotoper i det periodiske system

Både væskefase og faststof NMR-spektroskopi begrænser sig ikke til de mest studerede ^{1}H, ^{13}C og ^{15}N spin-isotoper inden for den organiske kemi, idet stort set alle grundstoffer i det periodiske system har en eller flere isotoper med et NMR-aktivt kernespin, figur 1. Disse spin-isotoper kan opdeles i spin-½ kerner og isotoper med et kernespin $I > ½$,



Figur 1. Udsnit af det periodiske system, hvor atom-massetallet for den spin-isotop, der oftest studeres med NMR-spektroskopi, er angivet for de enkelte grundstoffer. Grundstoffer med en spin-½ isotop er angivet med grønt, mens kvadrupolkernerne er markeret med rødt. Fordelingen af spin-isotoper for de udvalgte grundstoffer er også vist.

de såkaldte kvadrupolkerner. Spektre af spin-½ kerner domineres af kemisk skiftvekselvirkningen, der primært afhænger af elektrontætheden omkring spin-kernen. Denne vekselvirkning kan beskrives med en kemisk skift tensor, som indeholder en isotrop og anisotrop del, der beskriver den rumlige tredimensionelle natur af elektronernes skærmning af spin-kernen.

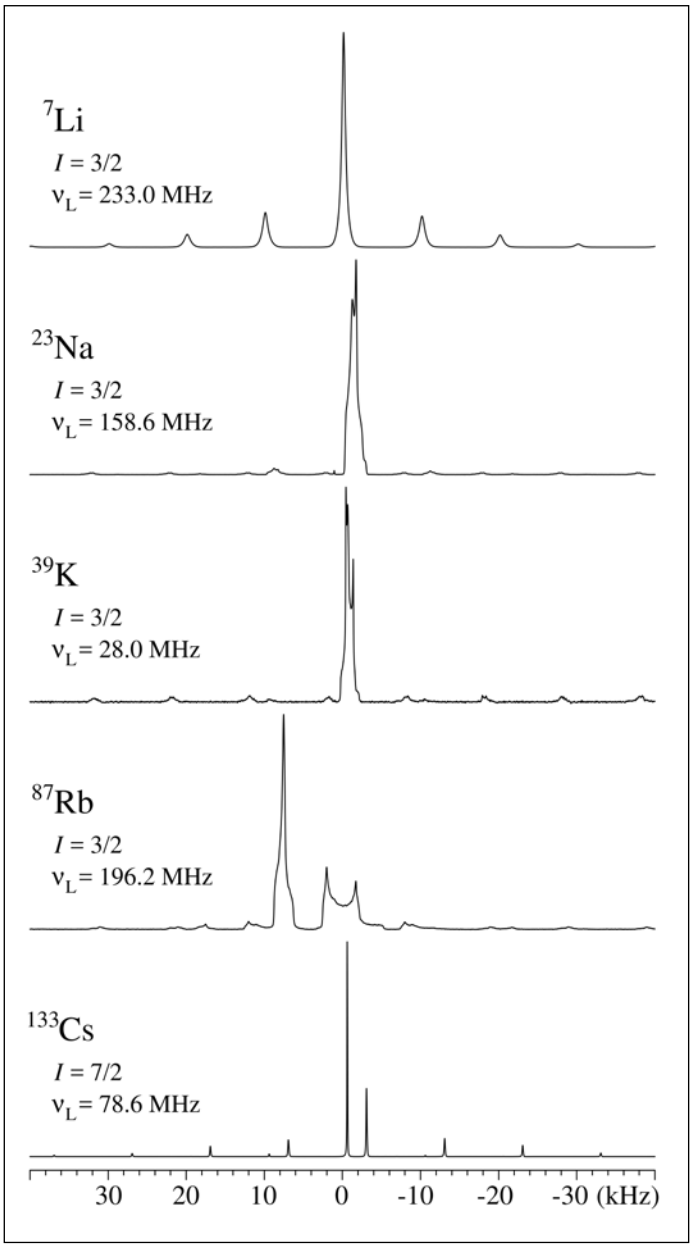
For kvadrupolkerner er kernens ladningsfordeling ikke sfærisk symmetrisk, hvilket giver anledning til kvadrupolvekselvirkningen, som repræsenterer koblingen mellem kernens spin og de omkringliggende elektriske feltgradienter. Størrelsen af denne kobling afhænger, udover spin-kernens nærmeste strukturelle omgivelser, af kvadrupolmomentet, Q, som er en isotop-specifik konstant. Kvadrupolvekselvirkningen er normalt den dominerende vekselvirkning for $I > ½$ kerner i fast fase, og den kan være så kraftig, at resonanserne bliver så brede, at de ikke kan detekteres i et enkelt-puls NMR-eksperiment for pulverprøver. I væskefase ses kvadrupolvekselvirkningen ikke, da den udmidles af molekylernes tilfældige bevægelser. Omkring 2/3 af de NMR aktive spin-isotoper, som i praksis kan studeres med NMR spektroskopi [1], er ▶

FT-Analysis becomes more Productive, Precise and Intuitive

BRUKER

The NEW INVENIO

Contact us for more details:
www.bruker.com/invenio



Figur 2. Faststof MAS NMR-spektre of M_2SO_4-saltene for de mest studerede spin-isotoper af alkalimetallerne (M). Samtlige spektre er optaget ved 14.1 T, svarende til de angivne Larmorfrekvenser (ν_L), med anvendelse af den samme spinningsfrekvens, ν_R = 10.0 kHz, og et udsnit på 80 kHz (spektral-bredden) er vist for hvert af spektrene.

kvadrupolkerner, hvor langt de fleste har et halvtalligt kernespin, figur 1. Enkelte grundstoffer har både en isotop med I = ½ og I > ½, for eksempel ^{1}H (I = ½) og ^{2}H (I = 1) samt ^{14}N (I = 1) og ^{15}N (I = ½), mens for eksempel tin har tre spin-isotoper med I = ½ (^{115}Sn, ^{117}Sn, ^{119}Sn), som alle i praksis kan studeres med NMR-spektroskopi.

Spin-isotopernes følsomhed i NMR-spektre

Hvor velegnet en spin-isotop er til NMR-spektroskopiske undersøgelser afhænger primært af kernespinnet (I), isotopens naturlige forekomst, det gyromagnetiske forhold (γ) samt kvadrupolmomentet (Q). Det gyromagnetiske forhold er en isotop-specifik konstant, som definerer resonansfrekvensen, $h\nu = -\gamma B_0/2\pi$, for en m, m – 1 overgang for spin-kernen i et statisk magnetfelt (B_0), hvor m er det magnetiske kvantetal. Det er denne konstant, som medfører, at grundstof-isotoperne har meget forskellige resonansfrekvenser og dermed oftest kan observeres i adskilte spektre. En undtagelse er for eksempel titans to spin-isotoper, ^{45}Ti (I = 5/2) og ^{49}Ti (I = 7/2), hvor forskellen i det gyromagnetiske forhold er så lille, at spektrene vil indeholde overlappende resonanser fra begge isotoper. Her kan resonanserne fra de to isotoper dog tilordnes ud fra deres naturlige forekomst og kvadrupolmoment, hvor sidstnævnte bestemmer resonansbredden i faststof NMR-spektre.

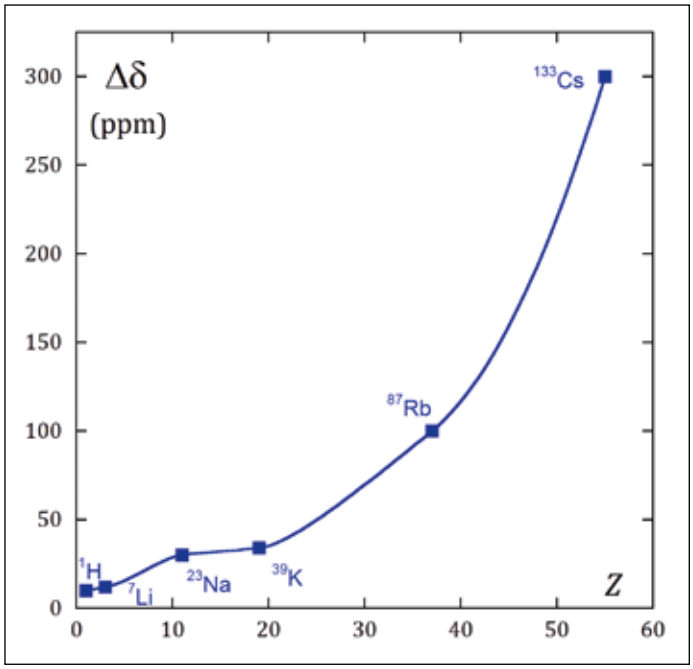
Følsomheden for en given spin-isotop i et NMR-eksperiment kan udtrykkes $D = \gamma^3 C(I(I + 1)$, den absolutte følsomhed [2], hvor C er spin-isotopens naturlige forekomst. Alternativt angives den relative følsomhed i forhold til den absolutte følsomhed for ^{1}H, og en vurdering af denne er ofte nok til at afgøre, om det er værd at forsøge sig med et NMR-eksperiment for en given spin-isotop. For kvadrupolkerner skal man endvidere vurdere størrelsen af kvadrupolmomentet, idet linebredden af centralovergangen (m = ½ ↔ m = -½) for halvtalligt-spin kvadrupolkerner er proportional med $[Q^2(I(I + 1) – ¾)^2]/[(2I – 1)^2]$.

NMR-parametre og periodicitet

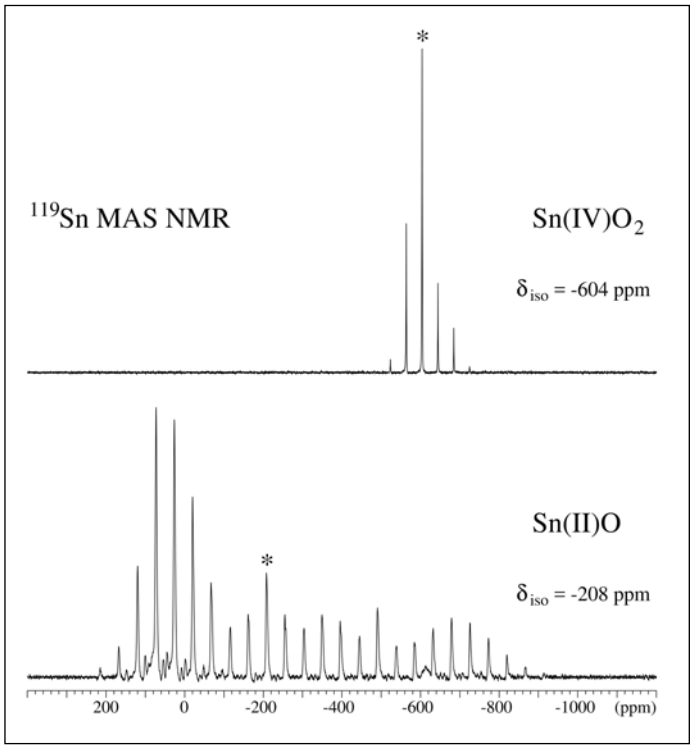
Da det er kernespinnet, som detekteres med NMR-spektroskopi, er der ikke en klar sammenhæng mellem kernespinnet og perioderne/grupperne i det periodiske system. Det samme er gældende for isotopernes øvrige kerneegenskaber (gyromagnetisk forhold og kvadrupolmoment), som det for eksempel fremgår af faststof NMR-spektrene af alkalimetal-sulfaterne (M_2SO_4) i figur 2. Her ses der ikke nogen direkte sammenhæng mellem de enkelte spektre, selvom disse sulfater har meget lignende krystalstrukturer. Spektrene er optaget med magic-angle spinning (MAS) teknikken, som bruges i faststof NMR-spektroskopi til at reducere/udmidle linjeforbredende vekselvirkninger. Dette opnås ved at rotere prøven hurtigt om en 'magisk vinkel' på 54.74° i forhold til det magnetiske felt, svarende til vinklen for rumdiagonalen i en kubus. Herved splittes meget brede resonanser for pulverprøver op i en centerlinje samt et antal rotationelle spinning sidebånd, adskilt i spektret med rotationsfrekvensen (ν_R). Hvert spektrum i figur 2 viser et spektralområde på 80 kHz, og for ^{7}Li- og ^{133}Cs-isotoperne er det nok til at observere samtlige spinning sidebånd for alle enkelt-kvante overgange. For ^{23}Na, ^{39}K og ^{87}Rb derimod er spektralområdet domineret af central-overgangen (m = ½ ↔ m = -½), mens man kun ser et lille udsnit af spinning-sidebåndene fra satellit-overgangene (m = ±½ ↔ m = ±3/2), som i disse spektre har en bredde i MHz-området. Med undtagelse af ^{7}Li NMR-spektret, viser spektrene tydeligt, at M_2SO_4-saltene indeholder to krystallografisk forskellige M^+ sites.

Der er ikke nogen direkte sammenhæng mellem Larmorfrekvenserne ($h\nu_L = -\gamma B_0/2\pi$) og grundstoffernes periodicitet, dog er der en tendens til, at Larmorfrekvensen aftager med stigende atom-nummer. For kemiske forbindelser, som indeholder paramagnetiske ioner, kan den detekterede spin-kernes kobling med de frie, paramagnetiske elektroner foranledige et meget kraftigt bidrag til den kemiske skærmning, som langt overstiger bidraget fra de diamagnetiske elektroners skærmning. Hvis vi holder os til diamagnetiske forbindelser, så vil dispersionen i kemisk skift i høj grad afhænge af antallet af elektroner og dermed spin-isotopens atomnummer. For eksempel, for alkalimetallerne ses der således et stigende kemisk skiftområde for stigende periodenummer (atomnummer), som vist i figur 3, der bygger på kemiske skiftværdier for en række forskellige kemiske forbindelser bestemt med væskefase NMR [3].

I væskefase NMR kan det kemiske udvise en betydelig kon-



Figur 3. Observerede kemiske skift-områder (Δδ) i væskefase NMR-spektroskopi for alkalimetallerne i kemiske forbindelser angivet som funktion af spin-isotopernes atomnumre (*Z*).



Figur 4. ^{119}Sn MAS NMR-spektre af SnO_2 og SnO optaget ved 9.39 T (ν_L = 149.0 MHz) med anvendelse af spinningsfrekvenser på hhv. ν_R = 6.0 kHz og ν_R = 7.0 kHz. Stjernerne markerer center-resonanserne svarende til de isotrope ^{119}Sn kemiske skift.

centrationsafhængighed. For eksempel varierer ^{113}Cs kemiske skift for CsI med ca. 55 ppm, når koncentrationen ændres fra 0.1 til 3.0 mol/kg i vandig opløsning [4]. Endvidere er det kemiske skift også temperaturafhængigt, både i væske og faststof NMR, og temperatureffekten stiger generelt med øget antal elektroner og dermed atomnummeret. For ^{207}Pb resonansen in $Pb(NO_3)_2$ ændres det kemiske skift med 0.753 ppm/˚C [5], hvilket ofte udnyttes i faststof NMR, hvor $Pb(NO_3)_2$ bruges som et 'NMR-termometer' til at kalibrere temperaturen i variabel-temperatur NMR-eksperimenter.

Hvis vi ser bort fra temperatur- og koncentrationseffekter, så afhænger det kemiske skift primært af elektrontætheden omkring spin-kernen og dermed grundstoffets oxidationstrin, nærmeste nabo-atomer og koordinationsforhold. Dertil kommer geometriske variationer, specielt for $I > ½$, hvor kvadrupolkoblingen kan være meget følsom overfor små ændringer i den lokale koordinationsgeometri. Som et eksempel, viser figur 4 faststof ^{119}Sn ($I = ½$) NMR-spektrene af SnO og SnO_2, som har isotrope kemiske skift ved hhv. -208 og -603 ppm (relativt til resonansen for en 5% $(CH_3)_4Sn$ opløsning i CH_2Cl_2) [6]. Disse kemiske skift er karakteristiske for Sn i oxidationstrin II og IV for tinforbindelser, hvor Sn er koordineret til oxygen. Lignende ^{119}Sn kemisk skift forskelle observeres for tinsulfiderne, SnS (δ_{iso} = -299 ppm) og SnS_2 (δ_{iso} = -765 ppm) [1]. Tin er i SnO_2 til stede i oktaedrisk koordination med høj lokal symmetri af det elektroniske felt, hvilket giver anledning til en lille skærmningsanisotropi, som ses i spektret ved tilstedeværelsen af få rotationelle spinning sidebånd, der samlet har en spektral bredde på ca. 200 ppm. For SnO er tin tilstede i kvadratisk pyramidal koordination, som giver et kraftigt perturberet elektronfelt for tin-atomet, hvilket reflekteres i en kraftig skærmningsanisotropi og spinning-sidebånd, der dækker et område på ca. 1100 ppm.

Et eksempel fra cementkemien

Tilstedeværelsen af en NMR aktiv spin-isotop for næsten alle grundstoffer, og det faktum at disse generelt har store forskelle i resonansfrekvens, har ført til, at faststof NMR-spektroskopi er meget udbredt inden for den uorganiske kemi og materialeforskning, hvor kerne-selektiviteten ofte kan frembringe simpel strukturel og kvantitativ information for komplekse systemer med mange forskellige faser tilstede. Et eksempel på dette er et studium af Portland cement med faststof ^{31}P NMR [7].

Portland cement består primært af calciumsilikaterne alit (Ca_3SiO_5) og belit (Ca_2SiO_4), calciumaluminaterne celit ($Ca_3Al_2O_6$) og ferrit ($Ca_2(Al_{1-x}Fe_x)O_5$) samt gips ($CaSO_4 \cdot 2H_2O$), hvor alle faser kan indbygge mindre mængder af gæst-ioner (for eksempel B^{3+}, F^-, Na^+, Mg^{2+}, P^{5+}, S^{6+}, Cl^-, K^+, Ti^{4+}, Cr^{3+}) fra enten urenheder i de mineralske udgangsmaterialer eller ikke-flygtige grundstoffer tilstede i brændstoffet, som bruges i cementovnen. Portland cement og cements hydratiseringsreaktioner studeres ofte med ^{29}Si ($I = ½$) og ^{27}Al ($I = 5/2$) NMR på grund af cements sammensætning, men spin-kernerne ^{1}H, ^{11}B, ^{13}C, ^{17}O, ^{19}F, ^{23}Na, ^{31}P, ^{33}S og ^{43}Ca har også været brugt i mere specifikke studier inden for cementforskningen [8].

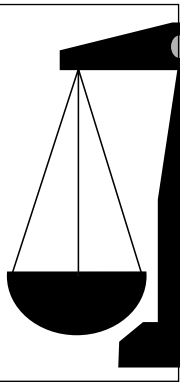
Da man i begyndelsen af 1990'erne ikke længere måtte anvende kød- og benmel i dyrefoder på grund af risikoen for

Pipettecenteret

Kalibrering og service af alle fabrikater pipetter.

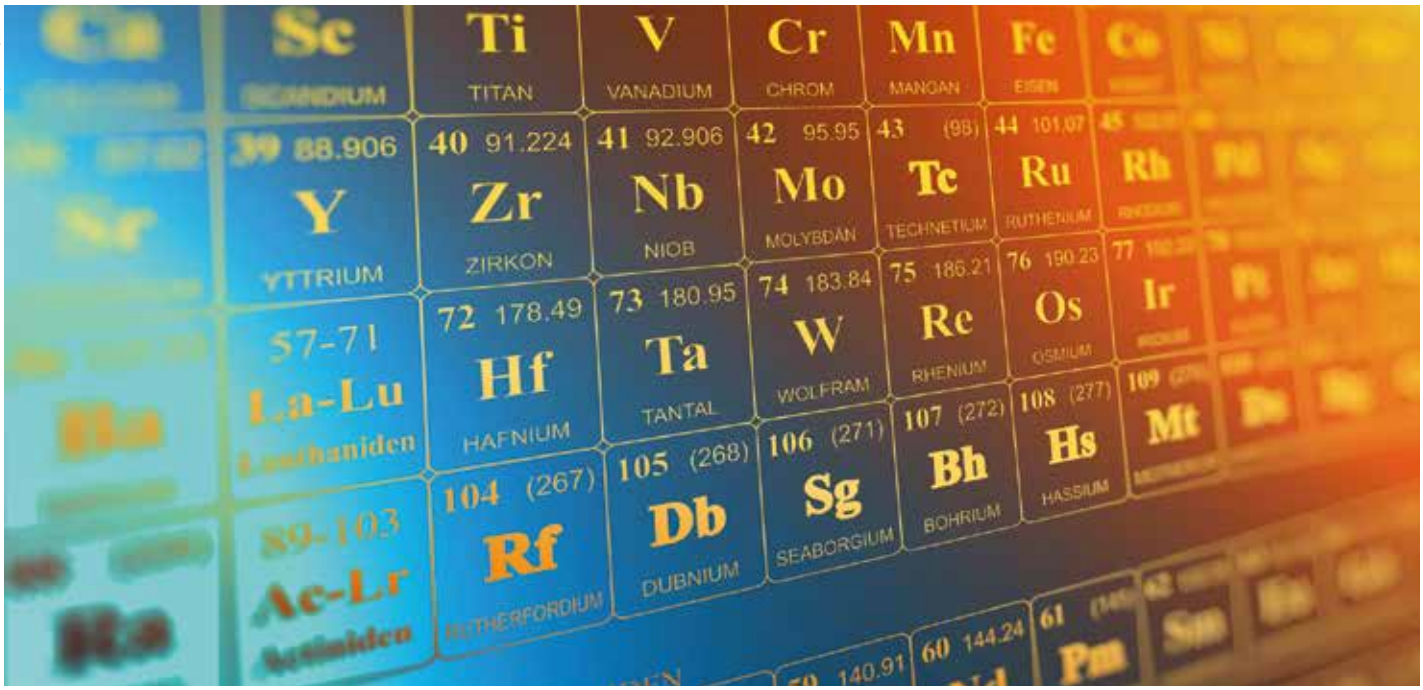
Vi kalibrerer både ved indsendelse eller på kundens adresse.

Salg af pipetter og laboratorie varer.

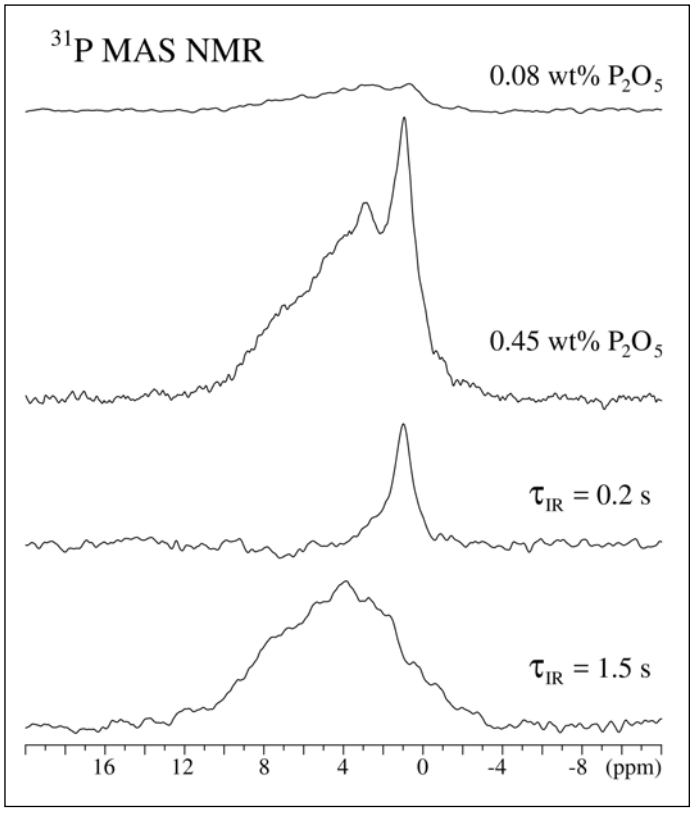


Pipettecenteret
Skovkanten 41 · 4700 Næstved
Tlf. 55 73 62 05 · Mobil 30 33 32 49
Email. nielslindgaard@stofanet.dk
www.pipettecenteret.dk

Foto: pixabay.com



udbredelse af kogalskab, begyndte man i stedet at bruge det som brændstof i cementproduktion. Kød- og benmel indeholder en betydelig mængde fosfor, og spørgsmålet hvor denne fosfor ender, blev således rejst. Figur 5 viser ^{31}P MAS NMR-spektrene af to forskellige Portland-cementer produceret med og uden anvendelsen af kød- og benmel som brændsel. Spektrene udviser



Figur 5. ^{31}P MAS NMR-spektre (9.39 T) af to hvide Portland-cementer produceret uden og med anvendelse af kød- og benmel som brændstof i cementovnen og indeholdende fosformængder svarende til hhv. 0.08 wt% og 0.45 wt% P_2O_5. De to nederste spektre er fase-korrigerede ^{31}P 'inversion-recovery' MAS NMR-spektre, der adskiller de to typer forfor-specier svarende til fosfor indbygget i belit (Ca_2SiO_4, τ_{IR} = 0.2 s) og alit (Ca_3SiO_5, τ_{IR} = 1.5 s).

en høj følsomhed, hvilket reflekterer, at ^{31}P spin-isotopen har 100 procent naturlig forekomst og ligeledes et højt gyromagnetisk forhold. For cementen produceret med kød- og benmel kan der identificeres en bred og en forholdsvis smal komponent. Disse to typer resonanser kan adskilles i et inversion-recovery NMR-eksperiment, da de har forskellige relaksationstider, og fra en bestemmelse af disse relaksationstider samt ud fra deres kemiske skift og resonansstruktur kunne det fastlægges, at fosfor indbygges i begge calciumsilikat-faserne, alit – den brede komponent og belit – den smalle resonans, ved substitution for silicium tetreaedrisk koordineret til oxygen i disse forbindelser [7]. Spektrene viser dermed, at meget simple spektre kan opnås ved at udnytte den store spredning i gyromagnetisk forhold, og dermed Larmorfrekvens, for spin-isotoperne i det periodiske system, og at dette kan give unik information om substitutionsmønstre og grundstoffer tilstede i små mængder i komplekse materialer.

E-mail:
Jørgen Skibsted: jskib@chem.au.dk

Referencer
1. K.J.D. Mackenzie, M.E. Smith, Multinuclear solid-state NMR of inorganic materials, Pergamon Press, 2002.
2. R.K. Harris, Nuclear magnetic resonance spectroscopy - a physicochemical view, Longman Scientific and Technical, 1983.
3. C. Brevard, P. Granger, Handbook of high resolution multinuclear NMR, John Wiley and Sons, 1981.
4. R.K. Harris, B.E. Mann, NMR and the periodic table, Academic Press, 1978.
5. A. Biecki, D.P. Burum, Temperature dependence of ^{207}Pb MAS spectra of solid lead nitrate. An accurate, sensitive thermometer for variable-temperature MAS. *J. Magn. Reson. Ser. A* **116**, 215- 220 (1995).
6. C. Cossement, J. Darville, J.-M. Gilles, J.B. Nagy, C. Fernandez, J.-P. Amoureux, Chemical shift anisotropy and indirect coupling in SnO_2 and SnO, *Magn. Reson. Chem.* **30**, 263-270 (1992).
7. S.L. Poulsen, H.J. Jakobsen, J. Skibsted, Incorporation of phosphorus guest ions in the calcium silicate phases of Portland cement from ^{31}P MAS NMR spectroscopy, *Inorg. Chem.* **49**, 5522-5529 (2010).
8. J. Skibsted, High-resolution solid-state nuclear magnetic resonance spectroscopy of Portland cement-based systems. Chapter 6 in: "*A Practical Guide to Microstructural Analysis of Cementitious Materials*", Eds. K. Scrivener, R. Snellings, B. L. Lothenbach, CRC Press, pp. 213-286 (2016).

Vi får et problem

Verdens ressourcer af phosphat varer ikke evigt. Derfor er der behov for, at vores politiske ledere udarbejder en samlet, langsigtet og koordineret plan, der sikrer fremtiden adgang til phosphatholdige gødninger. Vores børnebørn skal også mættes.

Af Per Eichner* (civilingeniør, tidligere laboratoriechef for Kemira Danmarks Udviklingslaboratorium) og Erik Larsen (professor emeritus ved Kemisk Institut, Københavns Universitet)

* Per Eichner blev desværre ramt af en alvorlig lungebetændelse og døde den 23. april 2019.

Hvert forår starter en hektisk sæson for vores afgrøder. De skal udnytte solens stråler så effektivt som muligt og derfor tidligt optage store mængder næringsmidler fra jorden. Store høstresultater opnås ved at give for eksempel NPK-gødning, der udmærker sig ved høj og hurtig opløselighed. Resultatet kan vi næsten se ved store daglige tilvækster af kornplanter. N, P og K er jo de kemiske betegnelser for nitrogen, phosphor og kalium. Tre grundstoffer, der sammen med carbon fra kuldioxid opbygger planterne under solens energibidrag.

Problemet ligger i phosphorgødningen, og det vil sige i tilførslen af phosphationer. I NPK-gødning findes phosphor især som salte af dihydrogenphosphationer, $H_2PO_4^-$, der let optages af planterne. Disse ioner har tendens til at danne tungtopløselige salte med de allestedsnærværende calciumioner og derved hindres planterødderne i at optage nok phosphat til den ønskede hurtige vækst. Når der om foråret er virkelig god gang i væksten, fordi alle tre gødningskomponenter, N, P, og K er tilført, ja, så når planterne at optage en stor del af de tilførte dihydrogenphosphationer, inden de når at blive udfældet i jorden som tungtopløselige salte. Dermed lægges grundlaget for et godt høstudbytte, der for eksempel er af størrelsesordenen 10 tons hvede/ha svarende til 1 kg pr. kvadratmeter. Udbyttet før vi tog kunstgødning i brug var ca. en tiendedel heraf.

Tilsvarende kan man opnå gode resultater for dyrkning af byg, majs, ris m.fl. Faktisk dyrker vi kun ca. det, der er behov for med Jordens nuværende befolkning. Og befolkningstallet stiger med ret voldsom hastighed, uden det bliver muligt at opdyrke store, nye landområder. Det er derfor et væsentligt og alvorligt problem, at der kan opstå mangel på phosphatgødning i en ikke for fjern fremtid, og at denne mangel på phosphat kan føre til global mangel på fødevarer.

Kilder til phosphatgødning

Den væsentligste kilde til phosphatgødning er de såkaldte råphosphater. Jordens oprindelige bjergmasser havde en meget lav koncentration af phosphor. Ved erosion blev bjerge nedbrudt til grus og sand, hvorfra phosphor blev opløst og endte som phosphationer i hav- og søvand. Fra vandet blev phosphat optaget i planter og dyr, der siden døde og atter frigav phosphationer, og med calciumioner udfældedes calciumphosphat på havbunden, ligesom dyrs skeletter blev lagret. Forskellige mekanismer har været ansvarlige for, at en biologisk oprindelse kunne samle sig til større mængder med højt indhold af calciumphosphater. Geologiske processer har ofte bragt mineralerne dybt ned til høje temperaturer og tryk for

En så tæt bevoksning af bygplanter kræver meget let tilgængelig phosphatgødning for at lykkes.

siden at åbenbares som sedimenter i hævet havbund. Herfra henter vi råphosphater. Disse kommercielle produkter består langt fra af rent calciumphosphat. Der er væsentlige forureninger af sand, calciumcarbonat, calciumfluorid, phosphater af jern, aluminium og magnesium samt af vand og organisk stof. Der er relativt få af denne type forekomster med en vestafrikansk (marokkansk) aflejring som langt den største.

Råphosphaterne er ikke færdige produkter, som man blot ubesværet graver op af jorden. Ofte må der flyttes meget store mængder jord for at nå dem og råphosphaterne må ofte gennem renseprocesser (for eksempel flotation- og tørreprocesser) og formalingsprocesser (knusning og sigtning), før man står med et kommercielt produkt. Jo vanskeligere tilgængelig en forekomst er, og jo flere urenheder der skal fjernes, jo højere bliver disse oparbejdningsomkostninger, og det kan selvfølgelig mærkes på prisen for råphosphat.

For at gøre råphosphaternes phosphatindhold vandopløseligt (og hermed tilgængeligt for planterne) behandler gødningsfabrikanten råphosphatet med syrer som svovlsyre, salpetersyre eller phosphorsyre ved en såkaldt oplukningsproces, der fører til superfosfat, $Ca(H_2PO_4)_2$.

Dansk produktion af gødning

Før 1840 kendte man stort set kun til naturlige gødninger baseret på dyrs og menneskers knogler og ekskrementer, og man mente, at disse gødningers vækstforbedrende virkning skyldtes et indhold af organiske bestanddele.

I 1840 viste den tyske kemiker Justus von Liebig imidlertid, at planterne levede af ren uorganisk næring samt sollys.

Danmark fik sin første svovlsyrefabrik allerede i 1833, og i 1851 fremstilledes det første danske superphosphat ved at behandle benmel med svovlsyre. Benmel og guano (ekskrementer fra fugle) blev i starten anvendt som phosphorkilde, men efter "opdagelsen" af forekomsterne af råphosphat blev benmel og guano ret hurtigt erstattet af dette. I 1891 stiftedes firmaet "Dansk Svovlsyre og Superfosfat-Fabrik", og selv om firmaet skiftede navn flere gange (først til Superfos A/S og sluttelig til Kemira, Danmark) var firmaet hovedleverandør af gødninger til det danske marked indtil 2004, hvor firmaets aktiviteter stansede og Danmark mistede sin eneste og sidste gødningsfabrik, som lå i Fredericia.

Firmaet havde i løbet af sin lange historie fremstillet mange gødningstyper som superfosfat, triple-superfosfat, PK-gødninger og NPK-gødninger samt hjælpeprodukterne svovlsyre, salpetersyre og phosphorsyre.

Reserverne varer ikke evigt

I 1890 var der i Danmark cirka 2.172.000 munde at mætte – i 2019 var dette antal steget til 5.700.000, det vil sige, at befolkningstallet var steget med en faktor på 2,6 over 129 år. Lykkeligvis betød stigninger i markernes udbytte (og andre tiltag), at vi aldrig har oplevet alvorlig mangel på fødevarer, men er det en selvfølge, at denne tilstand vil vare ved?

Man kan gøre forskellige antagelser om omfanget af phosphatforbruget i fremtiden og herefter beregne, hvad antagelserne fører til: Antager vi således, at reserverne er konstante, men at produktionen stiger med to procent hvert år, så vil verdens reserver (eksklusiv Marokko) være opbrugt i løbet af 51 år. Et amerikansk organ har opgjort de senere års forbrug:

Fra 2007 til 2013 steg produktionen fra 156 Gkg/år til 224 G kg/år, hvilket svarer til en stigning på 68 Gkg eller 44,4 procent (med 2007-produktionen som basis). Den gennemsnitlige årlige stigning over syv år var således 6,3 procent (1 Gkg svarer til 1 million ton).

Hvis denne stigning i produktionen forsætter i årene fremover, vil verdens reserver (stadig eksklusiv Marokko) være udtømt om blot 31 år ved uforandrede reserver.

Det er ikke nogen rar tanke, at et enkelt land herefter skal stå som eneste leverandør til verdensmarkedet. Der bliver rift om Marokkos forekomster, og man kan forvente, at prisen på råphosphat vil stige til astronomiske højder til stor skade for flertallet af verdens agerbrugere.

Hertil kommer, at der må ske en voldsom forøgelse af Marokkos produktionskapacitet (til cirka otte gange den

USA Geological Survey opgiver følgende produktionstal for hele verden:

År	Produktion/(Gkg/år)	Ændring/(Gkg/år)	i %
2007	156		
2008	161	5	3,2
2009	158	-3	-1,9
2010	176	18	11,4
2011	191	15	8,5
2012	210	19	9,9
2013	224	14	6,7

NPK-gødning spredes som fint krystalmel i en stor bredde.

nuværende), og der må ske en større udbygning af veje, jernbaner og havne for at klare transportopgaven.

Politisk set er det vel heller ikke hensigtsmæssigt og ønskeligt, at en enkelt person (Marokkos konge) får lov at bestemme over en ressource, som er af afgørende betydning for hele menneskeheden.

Det er selvsagt af største betydning, at de oplysninger, der ligger til grund for Marokkos dominerende rolle, er pålidelige og sandfærdige. US Geological Survey har accepteret oplysningerne, men andre har sat spørgsmålstegn ved, om de er korrekte, idet man antyder, at der er sket en bogholderimæssig overflytning fra ressourcer til reserver. Endvidere antydes, at prospekteringen ikke er så omfattende og detaljeret, som man kunne ønske sig i et spørgsmål af så stor vigtighed. Man burde lade verdenssamfundet udføre (og betale for) en detaljeret prospektering gennemført af et hold internationale geologer i samarbejde med Marokko.

Vi må finde løsninger nu

Det kan måske være vanskeligt at forholde sig til problemer, der først for alvor manifesterer sig i fremtiden, men måske giver det tid til at få verdens nok største problem under kontrol, nemlig befolkningstilvæksten. Det må give stof til eftertanke, at Jordens befolkning vil være vokset fra de nuværende syv milliarder mennesker til ni milliarder omkring 2050. Men at verdens ressourcer af phosphat engang vil være opbrugt, er sikkert, så der er al mulig grund til, at denne generation og de efterfølgende finder veje og metoder til at spare på og genbruge phosphat, så verden ikke engang løber ind i krige om noget så elementært som det daglige brød.

Bortset fra en enkelt lille mine i Finland råder Europa ikke over væsentlige forekomster, men er henvist til import af råphosphater eller phosphatholdige gødninger; men hvad gør vi så, hvis landet kun får adgang til en stærkt begrænset import af phosphatholdige gødninger til tårnhøje priser?

Mindst tre hovedopgaver ligger lige for

1. Metoder til at genvinde og genbruge phosphater fra alle typer phosphatholdigt affald må udvikles og afprøves.
2. Markernes pulje af tungtopløselige phosphater må gøres tilgængelige for planterne. Danske marker er lykkeligvis ikke udpinte, men rummer en pulje på omkring 4 Gkg phosphor opbygget over mere end 100 år. Tilgængeligheden kan næppe øges med simpel kemi, men måske kan problemet klares ved en form for symbiose mellem planter og visse mikrober, således at mikroberne oplukker phosphatet – formodentlig ved udskillelse af organiske syrer – og dermed gør phosphatet tilgængeligt for planterne. Måske kan mikrober "trænes" til at optage store mængder phosphat over året for så igen at afgive phosphat til planterne i vækstsæsonen. Sådanne problemer er dog særdeles komplekse.
3. Offentligheden må orienteres og gøres fortrolige med de mange tiltag, som bliver nødvendige hen ad vejen, hvis vi skal have et bæredygtigt landbrug.

Formålet med denne artikel er først og fremmest at vække mere interesse for problemet i offentligheden. Vi kan se, at der sker meget internationalt for eksempel gennem den internationale organisation GPRI (Global Phosphorus Research Initiative) og også, at danske landbrugsvidenskabelige institutter har holdt en temadag, hvor phosphatmanglens problemer har været diskuteret i både et globalt og dansk perspektiv.

Litteraturen viser også, at vores landbrugsfaglige og landbrugsvidenskabelige institutter beskæftiger sig indgående med problemer, som har relation til phosphor.

E-mail:
Erik Larsen: erik@chem.ku.dk

Samsung investerer i Infuser

Samsung investerer et tocifret millionbeløb og bliver medejer af den danske cleantech-virksomhed Infuser. Virksomheden har udviklet en banebrydende teknologi, som fjerner alle uønskede stoffer fra luften ved at kopiere naturens egen mekanisme til at nedbryde luftforurening.

Derved får Samsung adgang til en unik og globalt patenteret luftrensningsteknologi baseret på atmosfærens egne rensningsprincipper. Ikke blot kan teknologien rense forurenet luft, den kan også nedbryde forurenende gasser og partikler uden brug af filtre.

Ved at bruge den nye teknologi til alt fra elektronik til biler, fabrikker, ventilationssystemer og kontorbygninger er det muligt at fjerne farlige stoffer fra luften, så der kun er ren luft at indånde i ventilerede miljøer.

Infuser renser forurenet luft uden filtre ved hjælp af atmosfærens egen metode.

Teknologien udspringer af forskning oprindelig udført ved Kemisk Institut på Københavns Universitet og kan for eksempel fjerne og uskadeliggøre kræftfremkaldende restprodukter fra forbrændingsanlæg og antibiotikaresistente bakterier i hospitalsmiljøer.

Samsungs medejerskab repræsenterer samtidig den sydkoreanske industrigigants første investering i en skandinavisk virksomhed.

Infuser bruger atmosfærens egen metode til at gøre luft ren ved at nedbryde partikler med UV-lys uden filter. Konventionelle luftrensningsmetoder bruger filtre, som skal opfange partiklerne og efterfølgende destrueres.

Kilde: Via Ritzau

Ny opdagelse om skadelige partikler

Forskere fra Københavns Universitet har opdaget et overraskende fænomen i den proces, hvori visse gasmolekyler danner sundhedsskadelige partikler. Fænomenet får formentlig stigende konsekvenser for luften i byerne i takt med, at forureningen falder.

Selvom det gavner vores sundhed at få nedbragt mængden af NOx-gasser i byerne, der især kommer fra dieselbiler, betyder det ikke, at vi dermed har fået bugt med luftforureningen. For der findes også andre slags sundhedsskadelige ting i luften, for eksempel de ultrafine partikler. Og når der bliver mindre NOx, vil der muligvis blive flere partikler, end forskerne hidtil har troet, viser forskning fra Københavns Universitet.

- Vi har fundet en fundamental mangel i de modeller, som vurderer og forudsiger luftforureningen. Men nu har vi den viden, der skal til for at få rettet op på modellerne, så vi kan give politikerne et mere solidt grundlag at træffe grønne beslutninger på, end de har i dag, siger professor Henrik G. Kjærgaard fra Kemisk Institut.

Han og forskerkollega Kristian Holten Møller har nemlig i samarbejde med forskere fra Caltech opdaget en særlig mekanisme i den proces, hvori visse molekyler danner partikler i atmosfæren. Når såkaldte VOC'er (flygtige organiske molekyler) bliver nedbrudt, danner molekylerne radikaler i både højre- og venstrehåndet form – det fænomen som i kemien hedder kiralitet. Forskerne har nu påvist, at den ene form af disse radikaler kan danne partikler op til 1.000 gange hurtigere end den anden form.

- Ingen har før vidst, at højre- og venstrehåndethed gør en kæmpe forskel for, hvor mange partikler der bliver dannet i luften. Det er jo vigtigt, fordi antallet af partikler i sidste ende er lig med, hvor mange der dør af luftforurening, siger post-

> Vi har fundet en fundamental mangel i modellerne for luftforurening

doc Kristian Holten Møller fra Kemisk Institut, som har ledet forskningen.

Mekanismen gør sig gældende, når et VOC-molekyle bliver nedbrudt i atmosfæren ved at reagere med sig selv i stedet for med andre molekyler. Når denne selvreaktion sker, vokser molekylets radikaler sig større og større, fordi de bliver ved med at optage ilt, og til sidst dannes en ultrafin partikel. Det er denne proces, der sker med vidt forskellige hastigheder, alt efter om radikalerne har en højre- eller venstrehåndet form, og dermed bliver der dannet et vidt forskelligt antal partikler.

Færre NOx-gasser er lig med flere partikler

VOC-molekyler bliver blandt andet udledt i skovområder, når træer og planter udsender duftstoffer, men kan også stamme fra menneskeskabt forurening. I byerne kommer VOC'erne fra mange forskellige kilder – blandt andet fra biler, opløsningsmidler, rengøringsmidler, maling og kosmetikprodukter.

Henrik G. Kjærgaards tidligere forskning har påvist, at så længe der er en vis mængde NOx i luften, kommer det nyopdagede fænomen ikke i spil:

- NOx-gasserne i byerne bremser iltningsprocessen og forhindrer dermed radikalerne i at kunne vokse sig til partikler. Men i takt med, at vi reducerer udledningen af NOx, vil partikler dannet gennem den her mekanisme med al sandsynlighed blive mere og mere fremtrædende inde i byerne, siger Henrik G. Kjærgaard.

Løsningen er dog ikke at beholde dieselbilerne i byen, understreger han:

- Dieselbiler udleder jo ikke kun NOx – de udleder også partikler direkte. Så vi siger bestemt ikke, at det er godt at beholde dieselbiler i byerne.

Ifølge forskerne er en mulig løsning at regulere udledningen af VOC'er og erstatte de typer VOC'er, der danner flest partikler, med andre, som har en mindre effekt. De understreger dog, at det er et kompliceret område at regulere, og at der er brug for mere viden om, hvordan de forskellige slags VOC'er danner partikler.

Vil give mere præcise klimamodeller

Opdagelsen er også noget, der vil munde ud i mere præcise klimamodeller, påpeger forskerne. For de ultrafine partikler påvirker også klimaet ved enten at reflektere eller absorbere sollys og er i dag den faktor, der er behæftet med størst usikkerhed i de globale klimamodeller.

- Når nu der er så store forskelle mellem højre- og venstrehåndede radikaler, vil man få nogle meget store usikkerheder i klimamodellerne, hvis man ikke skelner mellem den ene og den anden slags – og det gør man ikke i dag. Man vil derfor enten over- eller underestimere, hvor mange partikler der bliver dannet i atmosfæren, siger Kristian Holten Møller.

Foto: Abhay Singh, Unsplash.

Via et samarbejde med Harvard University er forskerne nu i gang med at undersøge, hvilke effekter denne nye mekanisme har i en global klimamodel.

Pipetteservice
Akkrediteret kalibrering
Reparation • Vedligeholdelse
Gilson Center of Excellence • Certificerede teknikere • 20 års erfaring
• Alle førende fabrikater • Elektroniske certifikater • Serviceaftaler
BIO LAB
Biolab A/S,
Sindalsvej 29, DK-8240 Risskov,
Tlf: 8621 2866 Fax: 8621 2301
E-mail: pipetteservice@biolab.dk
www.biolab.dk
DANAK
Cal. Reg. Nr. 482

Lagerøl

Hvordan du smager og brygger verdens mest populære øl

En flot bog om lagerøllets historie og udvikling i den nye og gamle verden, om forskellene mellem øltyperne Lager og Ale samt om brygning af lagerøl.

Anmeldt af Michael Koefoed

Lagerøl, hvordan du smager og brygger verdens mest populære øl
Dave Carpenter. 2018, 1. udgave, 1. oplag
Dansk opsætning Tina D. Laursen
238 sider
ISBN: 978-87-406-52352, forlaget Turbine
Fås i boghandel
Vejl. pris 299,95 kroner

Bogens forfatter Dave Carpenter er chefredaktør på Zymurgy, et medlemsblad for American Homebrewers Association (den amerikanske forening af hjemmebryggere). Han har skrevet The Illustrated Guide to Homebrewing og er tidligere redaktør for Craft Beer & Brewing Magazine.

Bogen er stramt struktureret i tre dele fordelt på 13 kapitler: lagerøllets historie, kendte typer lagerøl og fremstilling af lagerøl, præsenteret i en tydelig indholdsfortegnelse.

Den første tredjedel af bogen beskriver fængende øllets historie i generelle træk fra de første bryg i det gamle Mesopotamien i Ægypten, gennembruddet i Bayern, udbredelsen til USA, forbudstider, lagerøllets forarmning til lagerøllets comeback på verdensplan i de seneste årtier. Øllets historie og udvikling af øltyper er tæt sammenkædet med samfundsudviklingens vilkår rundt om i verden, for eksempel den lille istid, krige, oprør, skatte og afgiftspres. Fortællingen om det danske Carlsberg-øls historie med J.C. Jacobsen – grundlæggeren af Carlsberg beskrives kort – for nogle danske læsere måske for kort.

På ca. 50 sider i tre kapitler gennemgås 25 kendte øltyper fra lyse lagerøl som for eksempel Helles, Festbier, Dortmund Export og Maibock, over mørke lagerøltyper inkl. Schwartzbier, Bock, Eisbier, Rauchbier og Baltisk Porter, til de nordamerikanske lagerøl som India Pale, California Common og humlet pilsner.

Bogens tredje del beskriver mere detaljeret produktionsprocesserne og slutter med ca. 20 opskrifter på meget forskellige typer lagerøl fra Gruit (den første øl brygget med bær og urter før humlens udbredelse), Kaiser Imperial Octoberfest til Classic Bock og Fearless Youth Munich Dunkel.

Bogen er fyldt med øllets kemi og kemiteknik. Bogen definerer øl som en drik gæret på malt. Lagerøl gærer på en af to stammer af gæren *Saccharomyces pastorianus*. Den ene gærstamme "Saaz", til tider kaldet *Saccharomyces carlsbergensis*, blev isoleret som monokultur første gang af danskeren Emil Chr. Jacobsen i 1883, og blev Carlsbergs varemærke.

Lagerøl modner ved en temperatur nær frysepunktet i løbet af uger, måneder eller halvår, inden det nydes.

Ale gærer derimod ved stuetemperatur og kan nydes uden nødvendig modning. Ved udvikling af lagerøl genbruges gær fra bryg til bryg som ved bagningens surdej, og selektivt pres, dvs. fordelingen af gær fra skum og bund har stor indflydelse på øllets smag og indhold af diacetyl og acetaldehyd.

Øllets bitterhed bestemt af mængden, typen og behandlingen af humle, bestemmes af graden af isomerisering af humlens indhold af alphasyrer, mere nøjagtigt som Internationale Bitter enheder (IBU) eller antal mg af iso-alpha-syrer pr. liter øl. Særlige måder at tilsætte humlen på som tørhumling og whirlpool hopping forklares.

Kvaliteten af vandet til ølbrygning har stor betydning for resultatet. Vandets pH-værdi har stor betydning for valg af malt, og ved hårdt vand kan tilsættes mælkesyre eller man kan udvikle fytase under temperaturstop i mæskningen, en syrepause, idet fytinen nedbrydes til fytinsyre.

Mæskningsprocessens kompleksitet forklares via balancen mellem enzymerne alpha- og beta-amylase, der bestemmer øllets indhold af restsukker og smagsstoffer. Da amylaserne har forskellige reaktionstemperaturer, anvendes konstant temperatur, "single infusion" eller trinvis opvarmning med protein- og amylasepauser.

Blødt vands indhold af svovl er med til at fremhæve humlens duft og smag i øllet. Det blev opdaget i Plzen (byen der gav navn til pilsner), hvor vandet var meget rent (ion-indhold mindre end 50 ppm).

Fremstillingen af de lyse øl beskrives underholdende, enten som fortynding af kraftigt øl, eller ved tilsætning af enzymer til effektiv medbrydning af bryggets stivelse. Det sidste resulterede i sprøde og tørre øl kaldet light øl, i dag Amerikas mest solgte øltype.

Teksten er skrevet i et ligefremt, letlæseligt sprog. Fagord er forklaret i tekst og noter bagerst i bogen. Bogen er velforsynet med illustrationer som farvefotos af øl, kurver og historiske sort-hvid fotos.

Bagerst i bogen er noter, stikordsregister og afsnit om vurdering af øl, anbefalet litteratur for de videbegærlige læsere.

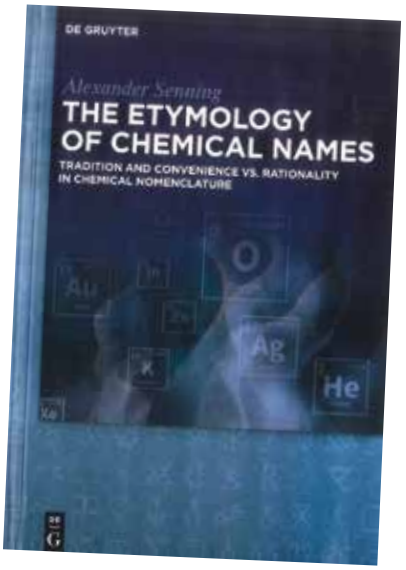
Bogen anbefales til alle med interesse for lagerøllets historie og udvikling, typer mv. Danske læsere vil måske savne beskrivelse af flere europæiske inkl. danske øltyper, da bogen er en oversættelse af en bog til amerikanske læsere.

Lagerøl gærer ved meget lavere temperaturer end Ale-typerne, der kan gære i kølige soveværelser eller kældre. Så blandt mikrobryggere er det kun dem med faciliteter som et ekstra køleskab eller kølerum, der har nytte af bogens øl-opskrifter og bryganvisninger.

Michael Koefoed, civ.ing. i kemi, har fremstillet egen bordvin, vermouth, martini og mousserende vin i flere årtier. Han har assisteret med brygning af Porter, Stout og Guinness de seneste fem år.

The etymology of Chemical Names

Alexander Senning
Walter de Gruyter GmbH
Berlin 2019
505 sider
€149,95



Kemiske lære- og håndbøger beskæftiger sig jo normalt med stoffernes kemiske egenskaber og reaktioner. Man kan imidlertid under læsningen blive nysgerrig efter at vide, hvorfor stofferne eller reaktionerne har fået netop det navn. Sprogvidenskaben kalder dette sprogets etymologi. Det omtales i nogle kemibøger, men ikke nær alle. Der er derfor udgivet nogle bøger, der udelukkende beskæftiger sig med kemiske ords etymologi. Her er Alexander Sennings bog noget af det mest omfattende.

Man skelner normalt mellem såkaldte trivialnavne og systematiske navne. De systematiske navne er skabt ud fra et bestemt system, normalt de såkaldte IUPAC-regler, som tillader at udlede den kemiske struktur ud fra navnet. Der er imidlertid ikke denne sammenhæng mellem trivialnavnene og den kemiske struktur. Ældre litteratur bruger i høj grad trivialnavne, hvorfor det er nødvendigt at have kendskab til de kemiske navnes etymologi for at kunne læse den ældre litteratur.

Bogen indeholder 20 kapitler, der fortrinsvis handler om trivialnavnene og deres oprindelse.

Trivialnavne har deres oprindelse mange andre steder end kemien, botanikken, zoologien, geologien, medicinen m.m. Et enkelt kapitel 4 beskæftiger sig dog også med de systematiske IUPAC-navne og de såkaldte ”retained names”, der er trivialnavne, der af en eller anden grund har fået lov at overleve i det systematiske system. De 20 kapitler har titlerne:

1. Introduction; 2. Samples of trivial and semitrivial names; 3. Rudimentary systematic nomenclature; 4. The IUPAC systematic nomenclature; 5. The Chemical Abstrcacts systematic nomenclature; 6. The naming of the elements; 7. The naming of lipids and lipid constituents; 8. The naming of terpenes; 9. The naming of carbohydrates; 10. The naming of amino acids, oligo- and polypeptides; 11. The naming of other natural products; 12. Named reactions and named concepts; 13. The naming of minerals; 14. International non-proprietary names for drugs and excipients; 15. ISO common names for pesticides and other agrochemicals; 16. Initialisms and acronyms; 17. The vocabulary of chemistry; 18. A sampler of miscellaneous prefixes and suffixes occurring in scientific terms; 19.Trivial chemical names with disputed etymology and 20. Some chemical names without known etymology.

Bogen er nyttig for alle kemikere, da man før eller senere kommer i forbindelse med trivialnavne – ikke blot ved læsning af ældre litteratur – men også af nyere. Den er speciel nyttig for kemikere med interesse i kemiens historie, idet trivialnavnene ofte indeholder megen historisk information. Den bør derfor findes på ethvert kemisk bibliotek.

Carl Th. Pedersen,
Institut for Fysik, Kemi og Farmaci, SDU, Odense

Smagssekskanten brugt til dressinger

Af Jens Folke, lean6sigma.eu

Dressing, dip, spread eller sauce – hvad er forskellen? De er nemlig alle cremede og alle designet til at udfylde smagssekskantens grundsmage i en ret eller et tilbehør, der ikke i sig selv kan tilsmages efter smagssekskanten, som jeg beskrev i DK 2019(8), altså surt, salt, sødt, bittert, umami og frie fedtsyrer (oleogustus). Nogle dressinger kan også tilføre andre smage såsom varme, for eksempel fra chili, eller kulde, for eksempel fra mynte, men almindeligvis ikke det sprøde.

Dressinger

Dressinger serveres typisk kolde som tilbehør til eller som en del af en salat. Sammenlign for eksempel en bearnaise-dressing lavet med 18% eller 38% creme fraiche (evt. iblandet lidt hjemmelavet mayonnaise på gul jomfru-rapsolie for farvens skyld) med en varm bearnaise-sauce lavet på smør og æggeblomme (se DK 2017(5)).

Dips

Dips er typisk kolde og, som navnet antyder, til at dyppe et fødeemne i, for eksempel chips eller crudité (udskåret af bladselleri, gulerødder, agurk, fennikel osv.). Dips er typisk mere viskose end dressinger.

Spreads

En spread er en dipvariant beregnet til at smøre på brød, for eksempel i stedet for smør. Nogle gange kan de samme ingredienser bruges til både spread, dip eller dressing ved at variere på viskositeten af produktet, for eksempel ranch eller blue cheese, der begge kan laves til enten en dressing eller dip.

Foto: Pixabay.

Saucer

Saucer er oftest baseret på supper og bouilloner (se DK 2018(8)) for en oversigt over saucer og DK 2019(8) for tilsmagning af samme) og serveres typisk varme i det salte køkken. Hvide saucer som bechamel/mornay og æggebaserede saucer som hollandaise/bearnaise er måske undtagelser.

Eksempler på dressinger:

Olie + eddike

- Olie-eddike-dressing
- Vinaigrette (fransk)
- Italiensk

Mayonnaise (olie + eddike + æggeblomme) (DK 2017 (1/2))

- Thousand Island
- Blue cheese
- Caesar

Syrnede mælkeprodukter (DK 2019(1))

- Yoghurt
- Mormordressing (m. citronsaft)
- Farmordressing (m. citronsaft og kærnemælk)

Blanding af syrnet mælkeprodukt og mayonnaise

- Tartare (DK 2019(5))
- Ranch (m. kærnemælk)
- Remoulade (dansk) (DK 2015(5))

Dressinger bruges mest til at balancere en ret med en kold salat, så den samlede ret opfylder smagssekskantens krav til tilsmagning. Ud fra en litteraturgennemgang af opskrifter på de almindeligt kendte dressinger, har jeg identificeret en dressings opbygning med op til syv elementer, se tabellen. Samvirke har et glimrende link til 30 salater af Coop-slagsen, som stort set alle balanceres med dressinger lavet af op til syv elementer [1].

1. Vegetarisk grundsubstans: olie, eddike, æggeblomme (lecithin)
i.e. mayonnaise, som smager surt, salt og umani, og som giver en rar mundfornemmelse af fedt fra olien.

Foto: Elise Bauer.

Green Goddess dressing

Ingredienser:

180 ml hjemmelavet mayonnaise
180 ml creme fraiche
1 hakket hvidløgsfed
1 lille hakket skalotteløg
60 g hakket persille
30 g hakket estragon
15 g fintskåret purløg
10 g citronsaft
2-4 ansjoser fra glas eller dåse
5 g Worcestershire sauce
Salt og peber efter smag

Fremgangsmåde:

Lav mayonnaisen først, og blend så alle krydderurter med løg, hvidløg og ansjoser i 45 sekunder. Smag til med salt, peber og Worcestershire sauce.

Nogle kendte dressinger opbygget af syv grundelementer med reference til smagssekskanten.	Dressinger	Smagssekskant*	Aioli	Olie/eddike (fra Middelhavet)	Vinnaigrette (DK 2017 (1/2))	Italiensk dressing	Green Goddess Dressing	Blue Cheese (Amerikansk)	Caesar Dressing (DK 2017 (1/2))	Thousand Island (Original)	Yoghurt dressing	Mormordressing	Farmordressing	Tatarsauce (DK 2019 (5))	Ranch (Amerikansk)	Burger dressing (fra DR.DK)	Dansk remoulade (DK 2015(5))	Dansk dressing til kartoffelsalat	Noter
1	Mayonnaise (fx Hellmanns)	Sø Su Sa					x	x		x				x	x	x		x	Lav den selv: DK 2015 (5) & DK 2017 (1/2)
1	Dijonsennep	Su Sa	(x)	x										x		x	x	x	Mayonnaise består af disse tre ingredienser
1	Æggeblommer		x						x								x		
1	Rapsolie / olivenolie		x	x	x	x			x					x	x		x		
1	Æg	Um							x										Æggeblommen er vigtig for dispergering
2	Kærnemælk	Su Fs						x					x		x				Pisk 38% Creme fraiche for at lave lidt selv
2	Fløde	Um										x	x						Tykner med citronsaft
2	Yoghurt (sødmælks-)	Su Fs									x			x				x	Levende kultur, giver umami/oleogustus
2	Creme Fraiche (6 %)	Su Fs													x		x		Levende kultur, giver umami/oleogustus
2	Creme Fraiche (18 %)	Su Fs					x	x								x		x	Levende kultur, giver umami/oleogustus
2	Parmesan	Sa Um Fs							x										Umami & oleogustus
2	Blå ost	Sa Um Fs						x											Umami & oleogustus
3	Citronsaft/lemon	Su	x								x	x	x		x		x		Der indgår (næsten) altid en organisk syre i en dressing
3	Æblecidereddike	Su								x					x	x	x		
3	Hvidvinseddike (evt. rødvin)	Su		x	x	x	x	x	x										
3	Sukker / honning	Sø Su Sa		x		x				x	x	x	x			x	x	x	Hvis sødme og bitterstoffer mangler i opskriften, se til at andre engredienser i retten sørger for dette
3	Salt	Sa	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	
3	Peber, friskkværnet	Bi	x	x	x	x	x	x	x	x		x	x	x	x	x	x	x	
4	Skalotteløg (evt. løgpulver)	Su Bi			x		x							x	x	x	x	x	Krydderurter giver dressingen sin karakter Friske giver mere karakter Tørrede giver længere holdbarhed
4	Hvidløg (evt. hvidløgsflager)	Su Bi	x		x	x			x		x				x	x		(x)	
4	Purløg	Bi				x	x			x	x			x	x			x	
4	Persille	Bi				x	x			x	x			x	x			(x)	
4	Frisk dild (evt. tørret)					x									x				
4	Estragon			x	x	x	x			x									
4	Kapers	Sa Su Bi												x			x		Syre
4	Cornichon	Sa Su Bi												x			x		Syre og sødme
5	Paprika									x						x			Sødme
5	Gurkemeje / karry																x	(x)	Bitter
6	Tomatpure	Sø Bi								x						x			Sødme
6	Worcestershire sauce	Um					(x)		x	x					x	x			Umami
6	Chili sauce / tabasco / cayenne					x		x		x					x	x			Capsaicin
6	Sweet Pickle Relish	Sø																	Sødme, Isothiocyanater
6	Senneps Pickles	Sø Bi															x		Sødme, syre, Isothiocyanater
7	Ansjoser	Um Fs					x		x										Umami
7	Oliven	Bi Fs																	Umami
7	Cognac, whisky mm.									(x)									Astringent

1. Grundsubstans
2. Mælkebaseret grundsubstans
3. Grundsmage
4. Friske og syltede krydderurter (prøv andre)
5. Tørrede krydderier (kan udvides efter opskrift)
6. Færdige saucer, ofte med en grad af modning
7. Andre smagsgivere

*Smagssekskant:

Sø	Sødt	Bi	Bittert
Su	Surt	Um	Umami
Sa	Salt	Fs	Fedtsyre (frie) - (Oleogustus)

2. Mælkebaseret grundsubstans: fløde eller syrnet mælkeprodukt
i.e. umami fra mælkeproteinerne, mælkesyrefermentering og evt. frie fedtsyrer (oleogustus), hvis der bruges fedtrig creme fraiche – ellers blot mundfornemmelsen af mælkefedt.

3. De fire oprindelige grundsmage: surt, sødt, salt og bittert (peber)
Salt og peber er gennemgående smagsgivere, men også eddike, citron, havtorn…

4. Friske og/eller syltede krydderurter: hvidløg, persille, purløg
Fra specielt det syltede fås sødt, surt, salt og bittert, men ellers er det aromaer fra de friske krydderurter, der dominerer.

5. Tørrede krydderier: paprika, karry
Nok ikke specielt relevant for smagssekskanten, men det er friske og tørrede krydderier, der giver en dressing dens karakter.

6. Færdige saucer, ofte med en grad af fermentering
Komplekse smagsgivere, der kan indeholde alle de seks grundsmage, for eksempel Worcestershire sauce.

7. Andre smagsgivere
Kan være ansjoser og oliven, der begge bidrager til umami og frie fedtsyrer (oleogustus). Men det kan også være sprit som cognac og whisky.

En af de simpleste dressinger er den klassiske vinaigrette, baseret på en olie i vand (eddike) emulsion, og med løg eller lignende til at stabilisere emulsionen (DK 2017(1/2)). Olie i vand emulsioner kaldes ofte for marinader, og bruges til både kød- og vegetarretter, men emulsionerne i en marinade kan sagtens være skilt, og så er det vel ikke en dressing?

Blander man en æggeblomme (lecithin) i olie-eddike-dressingen kan man få en mayonnaise, hvis man gør sig umage; og den er med i mange klassiske dressinger. For eksempel Thousand Island, der er uden mælkeprodukter, mens blue cheese- og caesar-dressingerne bruger oste, altså blåskimmelost eller parmesan, for at få en kraftigere umami og frie fedtsyre (oleogustus) smag frem.

Dressinger uden mayonnaise er for eksempel de klassiske mormor/farmordressinger, der er baseret på *in situ* syrning af frisk fløde, med citron/eddike og kærnemælk (farmors). Yoghurt-dressingen er et andet eksempel på en ren mælkeproduktbaseret dressing, altså med vægt på umami og frie fedtsyrer (oleogustus).

De mest komplekse dressinger gør brug af både mayonnaise og syrnede mælkeprodukter, samt alle de andre fem grundelementer, se for eksempel tartarsauce (DK 2019(5)) eller den danske remoulade (DK 2015(5)). Mindre kendt her i landet er måske Green Goddess dressingen fra Palace Hotel i San Francisco, som har rødder helt tilbage til Louis XIIIs hof (Wiki).

Jeg bringer andre opskrifter på hjemmelavede dressinger på Facebook: Køkkenkemisten.

Reference
1. https://samvirke.dk/artikler/30-groenne-salater#slide-1.

Ny CEO for Flow Robotics

Annika Isaksson skal som ny CEO i Flow Robotics lede virksomhedens internationale ekspansion. Ambitionerne er høje, for virksomhedens pipetteringsrobot kan automatisere al manuel pipettering på laboratorier rundt omkring i verden. Samtidig tiltræder virksomhedens stifter, en af idémændene bag Danmarks største robotvirksomhed Universal Robots, Kasper Støy, som formand for Flow Robotics Scientific Advisory Board.

Annika Isaksson har tidligere været direktør i danske Aminex Emissions Technology A/S, og vicedirektør i svenske Swenox AB, og har 15 års erfaring inden for management af teknologi-innovation, produktlancering og scale-up af virksomheder. Annika har en MSc i Mechanichal Engineering, og derudover en række executive uddannelser fra blandt andet IMD og London Business School.

Flow Robotics lancerede sin robot i efteråret 2018 og mødte fra starten stor interesse på markedet. Med et salg på 17 robotter til universiteter, startups og biotek-virksomheder, heriblandt Novo Nordisk, DTU, KU, SNIPR Biome, Unilabs, Nordic Bioscience og flere andre har teknologien opnået markedets blåstempling fra dag 1. Flow Robotics forventer, at salget kan firedobles hvert år frem mod 2021.

Flow Robotics A/S er oprindelig en spin-off virksomhed fra IT Universitetet i København. Virksomheden blev grundlagt i december 2015 af professor og Universal Robot-medstifter Kasper Støy og adjunkt Andrés Faíña, oprindeligt fra University of A Coruña i Spanien. Flow Robotics A/S har i dag 11 ansatte.

Sensoremner i teknisk keramik

Kyocera Fineceramics leverer kundespecifikke komponenter i teknisk keramik til komplekse og krævende applikationer. Samtlige emner produceres på Kyocera Fineceramics Solutions GmbH i Mannheim med det anerkendte Frialit-Degussit keramiske højkvalitetsmateriale.

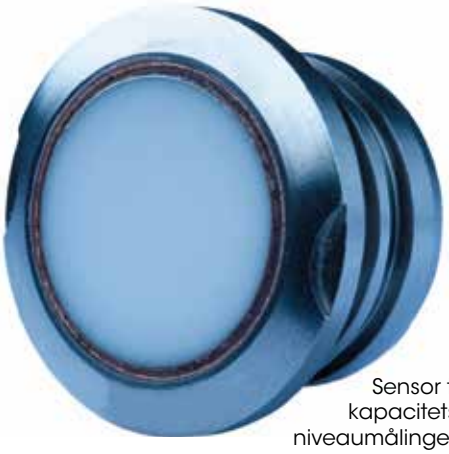
Mikrobølge- og radarsensorer til niveaumåling

Keramiske produkter kan for eksempel bruges i sensorsystemer og antenner i niveaumålingsudstyr til for eksempel procesindustrien eller offshore-branchen. På grund af materialets optiske egenskaber kan mikrobølgerne fokuseres bedre og mere præcist med Kyoceras aluminiumoxid-materiale Frialit F99.7 og AL23hf end med andre materialer, såsom glas eller plast. Med dette kan komponenterne også gøres mindre. En keramisk metalkonstruktion tåler også meget høje tryk og temperaturer. Arbejdstemperaturer på 400°C og testtryk op til 1.100 bar er ikke ualmindelige. Således kan mindre komponenter også realiseres.

- Vi fokuserer på udvikling og produktion af elektro-keramik. Vi finder løsninger til alle, som ønsker at måle noget under en bestemt jobspecifikation – såsom temperatur og tryk – eller i et ekstremt miljø med slibende og ætsende medier, siger Cornelia F. Sundberg, Managing Director.

Kyocera råder over følgende produkter:

- *Keramiske måleceller* med integrerede platinelektroder til magnetisk induktiv flowmåling udviklet i et tæt samarbejde mellem virksomhedens udviklingsafdeling og førende producenter på markedet. Emnerne udmærker sig ved, at de selv under vanskelige forhold sikrer, at påfyldning af flydende produkter bliver nøjagtig og præcis.
- *Kapacitiv niveaumåling*: Keramiske sensoremner og sensorringe (delvist metalliseret og loddet) til kapacitiv måling af det omkringliggende medie, anvendes med succes i trykområdet >1.000 bar. Sensorkomponenterne muliggør en præcis bestemmelse af andelen af forskellige medier på flydende form eller på gasform.
- *Iltsensor*: Kyoceras materiale zirkoniumoxid FZY er på grund af materialets specielle struktur velegnet til måling af oxygen i gasser og atmosfæren og til styring af forbrænding. Sensorerne kan også benyttes til måling i ovne for overfladebehandling (for eksempel hærdning), til redoxprocesser, diffusionsprocesser, biotekniske processer og til kontrol af iltniveauet under fødevarepakning.
- Tryksensor: Måleceller fremstilles med det keramiske aluminiumioxidmateriale Frialit F99,7. Tryksensorer og transducere anvendes inden for temperaturområdet -50 til +150°C og ved tryk på mere end 100 bar. Membraner fremstilles med en tykkelse ned til 0,2 mm og en diameter på op til 80 mm. Materialet til elektroderne vælges i tæt samarbejde med kunden ud fra den enkelte kravspecifikation. Keramiske måleceller udvikles til flyindustrien og rumfart, men kan også anvendes inden for den kemiske industri, fødevareindustrien og den farmaceutiske industri.



Sensor til kapacitets-niveaumålinger.

Keramisk mikrobølgegennemføring til niveaumålinger.

Alle keramiske sensorer udmærker sig ved:

- Sensoremnerne kan produceres i mindre dimensioner
- Reproducerbarhed af måleværdier med tolerancer ned til 0,05 procent
- Høj formstabilitet
- Ingen hysterese
- Høj korrosionsbestandighed
- Høj trykbestandighed
- Inert i biologiske, farmaceutiske og kemiske applikationer
- Opfylder FDA-kompatibilitet (Food & Drug Administration) og USP class VI.

Virksomheden har et bredt udvalg af produkter og materialer, og der fokuseres altid på at finde de rette løsninger, selv for de mest ekstreme applikationer.

Yderligere information:
Kyocera Fineceramics Nordics AB
Tlf. 50 49 50 49
E-mail:
heidi.schramm@kyocera-solutions.se
www.kyocera-solutions.se/da

Modtag nyhedsbrevet fra
KEMIFOKUS
- tilmeld dig på www.kemifokus.dk

Online analyseinstrument til kemiske og biokemiske processer

Aage Christensen repræsenterer det engelske firma Keit Spectrometers og præsenterer her deres analyseinstrument til industrien.

IRmadillo er et FTIR-baseret online analyseinstrument, der er udviklet til procesanalyse i realtid, hvilket muliggør visualisering, kontrol og optimering af processer. Når først instrumentet er installeret og kalibreret, kan koncentrationsprofiler mellem 1 og 10 forskellige kemikalier i en proces leveres med opdateringer hvert andet minut. IRmadillo er udviklet til brug i meget skrappe produktionsmiljøer og kan leveres med mange forskellige prober afhængig af processen.

I modsætning til traditionelle FTIR-instrumenter er dette instrument robust og stabilt. Det betyder, at når instrumentet først er installeret og kalibreret, fungerer det uden forbrugsvarer, stilstandstid eller vedligehold.

IRmadillo25

Det originale instrument, som fås med IECEx- og ATEX-certificering, kan analysere væsker og visse opslæmningstyper med en pH på mellem 0 og 9 ved temperaturer på -15 til +80°C. Proben har en diameter på 25 mm og er velegnet til kemisk analyse og nogle former for biokemiske processer.

IRmadilloDiamond

Det ideelle instrument til en lang række industrielle og biokemiske processer. Det kan analysere væsker og alle opslæmningstyper med en pH på mellem 0 og 14 ved temperaturer på -20 til +90°C. Denne probe har en diameter på 38 mm og er kompatibel med clean-in-place (CIP) og steam-in-place (SIP), der anvendes inden for bioteknologi.

IRmadilloHot

Dette instrument er beregnet til højtemperaturanalyse. Det kan analysere væsker og visse opslæmningstyper med en pH på mellem 0 og 9 ved temperaturer på +5 til +200°C. Denne probe har en diameter på 38 mm og er velegnet til kemisk analyse af varme kemiske reaktioner, destillation og andre lignende processer. IECEx- og ATEX-certificering forventes senere i år.

Ydeevne og brug

Ved fermenteringstests overgår IRmadillo konventionelle FTIR-, NIR- og Ramaninstrumenter, der er almindeligt forekommende på markedet. IRmadillo kan anvendes til måling af en bred vifte af kemikalier i forskellige opløsningsmidler og blandinger så som:

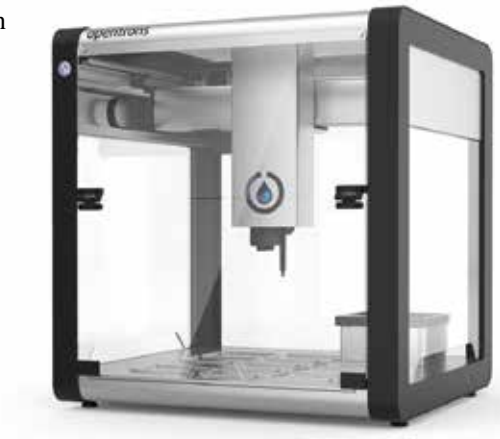
- Fermentering og cellekultur (sukker, organiske syrer, proteiner, alkohol, metabolitter)
- Overvågning af vand i opløsningsmidler og kemikalier
- Overvågning af reaktioner til proceskemi.

For yderligere information:
Aage Christensen A/S
Tlf. 36 44 24 44
info@aagechristensen.dk
www.aagechristensen.dk

Robotterne kommer

Automatisering bliver i stigende grad en del af hverdagen i produktionserhverv, men også i laboratoriebranchen har robotterne gjort deres indtog. Særligt pipetteringsrobotter har vundet stor popularitet, og findes nu i flere større laboratorier med stort flow af prøver. For mange laboratorier er det dog en barriere at investere så store beløb i en automatiseringsløsning, som ofte er svær at implementere, dyr at vedligeholde, og ofte kræver superbrugere til applikations-opsætning. Sådan behøver det ikke være.

Opentrons har udviklet en OT-2, en pipetteringsrobot, som sprænger rammerne for, hvor lidt automatisering kan koste. OT-2 er kompakt nok til at kunne placeres på et laboratoriebord, har en yderst brugervenlig protokoldesigner,



og kan bruge de fleste standardforbrugsvarer. OT-2 kan holde to pipetter ad gangen, både enkelt- og multikanalspipetter. OT-2 begrænser sig ikke til pipettering; Opentrons har udviklet tilbehør, såsom thermocycler til PCR, enhed til magnetisk bead-oprensning, samt varme-/køleblok. Opentrons protokoldesigner gør det let at sætte en metode op, og derudover findes mange prædefinerede standardmetoder til kommercielle kits frit tilgængelige.

Hvis man vil have mere kontrol, kan man også selv programmere sine metoder via Opentrons Python API eller finde dem i Opentrons open source-univers.

Mikrolab Aarhus A/S repræsenterer nu Opentrons i Norden, og vi ser frem til vise jer, hvor lidt det kræver at komme med på automatiseringsbølgen.

Yderligere information:
Mikrolab Aarhus A/S
Tlf. 86 29 61 11
E-mail: ml@mikrolab.dk

IDA Kemi™

Generalforsamling i IDA Kemi

Kom til generalforsamling i IDA Kemi og vær med til at sætte dit præg på selskabet.

26. marts 2020 i København V

Læs mere på:
https://ida.dk/arrangementer/335103

Python for chemometricians

The course is intended for chemometricians who want to learn about Python, either to make a transition from MATLAB to Python or simply to add another tool to the toolbox.

In this course we will start by learning about the Python eco-system, including virtual environments, modules, packages, data types, functions, classes and various IDE's (interactive development environments or simply "editors"). Once the basic knowledge has been established, we will move on to talk about the major packages that are relevant for doing chemometrics in Python, and finally some actual chemometrics data analysis will be performed.

March 24th, 2020 in Copenhagen

Read more:
https://ida.dk/arrangementer/334914

dsk
Dansk Selskab for Kemometri

Biokemien og fysiologien bag raske bjørne i hi

Bjørnen er rask og rørig, når den om foråret forlader sit vinterhi og begynder at lede efter føde. I de forgangne seks måneder i hi har den ligget nogenlunde stille uden at få liggesår, blodpropper eller hjertesvigt trods en puls på kun 10 slag pr. minut. Muskel- og knoglemasse er næsten uændret, mens fedtet er væk. Den har hverken spist eller drukket, haft afføring eller tisset. Alligevel er den ikke forgiftet af affaldsstoffer.

Bjørnen er altså udstyret med biokemiske netværk, der tillader næsten fuldstændigt genbrug af cellernes slidte komponenter. Vi mennesker ville gerne kunne efterligne bjørnen i det omfang, der passer os: Drive den af uden konsekvenser for helbredet, og spare på mad, vand og energi, måske.

26. marts 2020 i København V

Læs mere på:
https://ida.dk/arrangementer/335101

Ingeniørforeningen, IDA | Kalvebod Brygge 31-33 | 1780 København V | Tlf.: 33 18 46 34, Anne Dalgaard | website: ida.dk | e-mail: ada@ida.dk

Afsender: TechMedia A/S, Naverland 35, DK-2600 Glostrup

TA Instruments

Taking **MATERIAL CHARACTERIZATION** to a **NEW LEVEL**

Training courses, technology tours* and seminars in thermal, rheology and microcalorimetry:

- Sign up and increase your application knowledge.
- Balanced content between theory and practical hints.
- You are welcome to bring samples for analysis (pre or post) or any experimental data for consultation.
- Participation is free

Be up-to-date with the latest news and join these fine training courses, annual meetings and technology tours*:

When	Description	Where
13th - 14th Feb	31st Thermal Symposium by FinTAC and FyFa	Helsinki
10th - 11th March	Rheology Technology Tour*	Stockholm
23rd - 26th March	Microcalorimetry - TAM IV & TAM Air Training Course (Theory & Practical) Microcalorimetry - ITC & DSC Training Course (Theory & Practical)	Stockholm
28th April	Differential Scanning Calorimetry (DSC) Training Course (Theory & Application)	Stockholm
29th April	Dynamic Mechanical Analysis (DMA) Training Course (Theory & Application)	Stockholm
6th - 7th May	Rheology Training Course (Theory & Practical)	CPH/Malmö
19th May	Thermal Technology Tour*	CPH/Malmö
3rd - 5th June	57th Nordic Polymer Days & 29th Nordic Rheology Conference	Espoo
10th - 12th June	Scandinavian Society of Biomaterials 2020	Jūrmala, Latvia
24th - 27th Aug	Microcalorimetry - TAM IV & TAM Air Training Course (Theory & Practical) Microcalorimetry - ITC & DSC Training Course (Theory & Practical)	Stockholm
25th August	Differential Scanning Calorimetry (DSC) Training Course (Theory & Application)	Turku
26th August	Thermogravimetric Analysis (TGA) and Simultaneous DSC & TGA (SDT) Training Course (Theory & Application)	Turku
7th - 8th Oct	Rheology Training Course (Theory & Practical)	Stockholm
15th Oct	Thermal Technology Tour*	Stockholm
10th - 11th Nov	Rheology Technology Tour*	Helsinki/Tamp.
24th Nov	Differential Scanning Calorimetry (DSC) Training Course (Theory & Application)	CPH/Malmö
25th Nov (½ day)	Modulated Differential Scanning Calorimetry (MDSC) Training Course (Theory & Application)	CPH/Malmö
25th Nov (½ day)	Thermogravimetric Analysis (TGA) Training Course (Theory & Application)	CPH/Malmö

** Technology Tour is where TA Application Specialists will visit selected users to discuss applications, technical matters, instruments and/or software. These are also arranged upon request. Please come back if you would like to learn more.*

tainstruments.com

For additional information please email:
sweden@tainstruments.com, denmark@tainstruments.com, norway@tainstruments.com or finland@tainstruments.com.
By telephone: +46 (0)8 555 521 or +45 46 57 41 00.