Dit branchemagasin fra TechMedia A/S

Dansk Kemi

Nummer 8 - November 2020 / 101. årgang

Kemisk Forening - Kemiingeniørgruppen

Miljøfølsomme polymerer og maskinlæring

Mobilt MS til måling af forurening

BII - en stærk inkubator

INDHOLD

1 **Forside**
CEO for BioInnovation Institute (BII) Jens Nielsen har store visioner om, at BII skal blive Europas førende inkubator for entreprenørskab.

6 **Fluorstoffer i lungerne kan forværre covid-19**
Det viser et dansk studie fra forskere på SDU.

7 **Hvoraf navnet barbitursyre?**
Da Hans Toftlund i 2007 anmeldte Alexander Sennings første kemoetymologiske bog, hæftede han sig ved, at Senning ikke foldede sig helt ud med hensyn til den uklare oprindelse af navnet.

8 **Mobilt MS til måling af forurening**
Online-analyse af uorganiske og organiske forureninger med et mobilt massespektrometer giver mulighed for at registrere forureningskilder hurtigt og forståeligt.

11 **Verdensmål nr. 10: Mindre ulighed**
Det overordnede mål er at udrydde uligheder mellem lande.

12 **En stærk inkubator**
CEO for BioInnovation Institute (BII) Jens Nielsen har store visioner - at BII bliver Europas førende inkubator for entreprenørskab. For at nå det ambitiøse mål kræver det, at alle trækker i samme retning.

16 **Miljøfølsomme polymerer og maskinlæring**
Et nyt værktøj til hurtige og pålidelige analyser til brug inden for produktudvikling i fødevaresektoren.

18 **Hybride modeller: En pragmatisk implementering af Industri 4.0**
Hybridmodellering kan være den gamechanger, der er nødvendig for en realiserbar implementering af Industri 4.0.

20 **Boganmeldelse: Grønt med umami og velsmag**

21 **To søfolk omkommer af kulilteforgiftning fra træpiller**
Friskt producerede træpiller er kemisk reaktive og kan reagere med luftens ilt. Ved oxidationen frigiver pillerne giftig CO-gas.

26 **Nyt testprincip udnævnt til Excellent Innovation**

27 **Køkkenkemisten: Smagen af umami med hjælp fra kokumi**
- de japanske smage.

30 **Udvinding af cannabinoider med vakuumteknologi**

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, 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:
Tanja Wulff Dühring
Tlf. 43 24 26 06, twd@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

Oplag: 4.196
Online læsere: 2.138

Trykt på miljøvenligt papir med vegetabilske miljøfarver.

Abonnement:
Ændring/opsigelse sendes til:
abonnement@techmedia.dk

Bestil abonnement direkte på:
www.techmedia.dk

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.

USA, California:
Huson International Media
Tel.: +1 408 879 6666

Læs Dansk Kemi online på:
danskkemi.dk

Scan og hent Dansk Kemi's medieinformation 2021 her!
Hent QR Scanner, hvor du normalt henter apps.

Indsæt prøven.
Luk låget.
Få resultaterne.

Så hurtigt og let kan du udføre kvalitetskontrol med en DS2500 Analysator fra Metrohm

Spar tid og penge med Nær-Infrarød Spektroskopi

NIRS hjælper dig med at reducere udgifter til rutinekvalitetskontrol med op til 90%! Vores DS2500 Analysatorer kan anvendes til kemikalier, polymerer, lægemidler, produkter til personlig pleje og meget mere!

Metrohm NIR Spektrometre
- til mange industrier

Fødevarer, lægemidler, plast,kemisk industri m. fl.
Nær-Infrarød Spektroskopi efter **ASTM E1655** gør det muligt hurtigt og let at måle nøgleparametre som fx:

- vandindhold
- partikelstørrelse
- TAN/TBN
- hydroxylnummer

- API
- densitet
- viskositet

og meget mere

Metrohm tilbyder analytiske instrumenter og applikationer:

pH- og konduktivitetsmåling, titrering, IC og spektroskopi til farmaceutisk analyse af API, sporanalyse af urenheder, som fx tungmetaller, samt atline og inline monitorering af produktionsprocesser.

Metrohm

OMNIS

Fuldt integreret titreringssystem. Hurtigere, mere sikker og nemmere

Bæredygtig anvendelse af kemi er fremtiden

Danske virksomheder, der arbejder med kemi, skal gribe de muligheder, EU's nye kemistrategi lægger op til. EU vil nemlig udvikle kriterier for, hvordan kemikalier der er sikre og bæredygtige i deres design, skal se ud. Det er et nyt greb at ville definere dette, og realistisk set kommer vi nok stadig til at bruge mange af de kemikalier, vi kender i forvejen, men der vil uden tvivl blive afsat store finansielle EU-midler til udvikling af nye bæredygtige materialer.

Strategien blev offentliggjort 14. oktober og er en udløber af European Green Deal, der primært er en klimastrategi, der skal gøre Europa til verdens første klimaneutrale kontinent, men som også har meget ambitiøse planer for bæredygtig anvendelse af kemikalier.

> Kemikalier, også de farlige, spiller en stor rolle i udviklingen af et bæredygtigt samfund med masser af vindmøller, Power-to-X og elbiler

EU har verdens mest restriktive kemikalielovgivning, og hvis den nye strategis ambitioner bliver gjort til virkelighed, kommer vi til at se en kraftig revision af det nuværende system. Det kommer til at inkludere nye typer af klassificeringer af kemikalier, mulighed for regulering af grupper af stoffer, i første omgang formentlig per- og polyfluoralkylforbindelser (PFAS), og muligvis indførelsen af en generel sænkning af grænseværdier for at imødegå udfordringen med kombinationseffekter.

Grunden til alle disse nye tiltag er EU's overordnede ambition om et "ikke-toksisk" miljø og udfoldelsen af en cirkulær økonomi. Mennesker og miljø skal helt friholdes for risikoen ved uønsket eksponering, samtidig med at materialer skal kunne genanvendes, uden at man risikerer at få noget forurening med fra den tidligere anvendelse. Det sætter uden tvivl store krav til virksomhedernes valg af råvarer og design af produkter. Der er dog ingen tvivl om, at de virksomheder, der kommer med de løsninger, der kan løfte EU's ambitioner, kommer til at tjene penge.

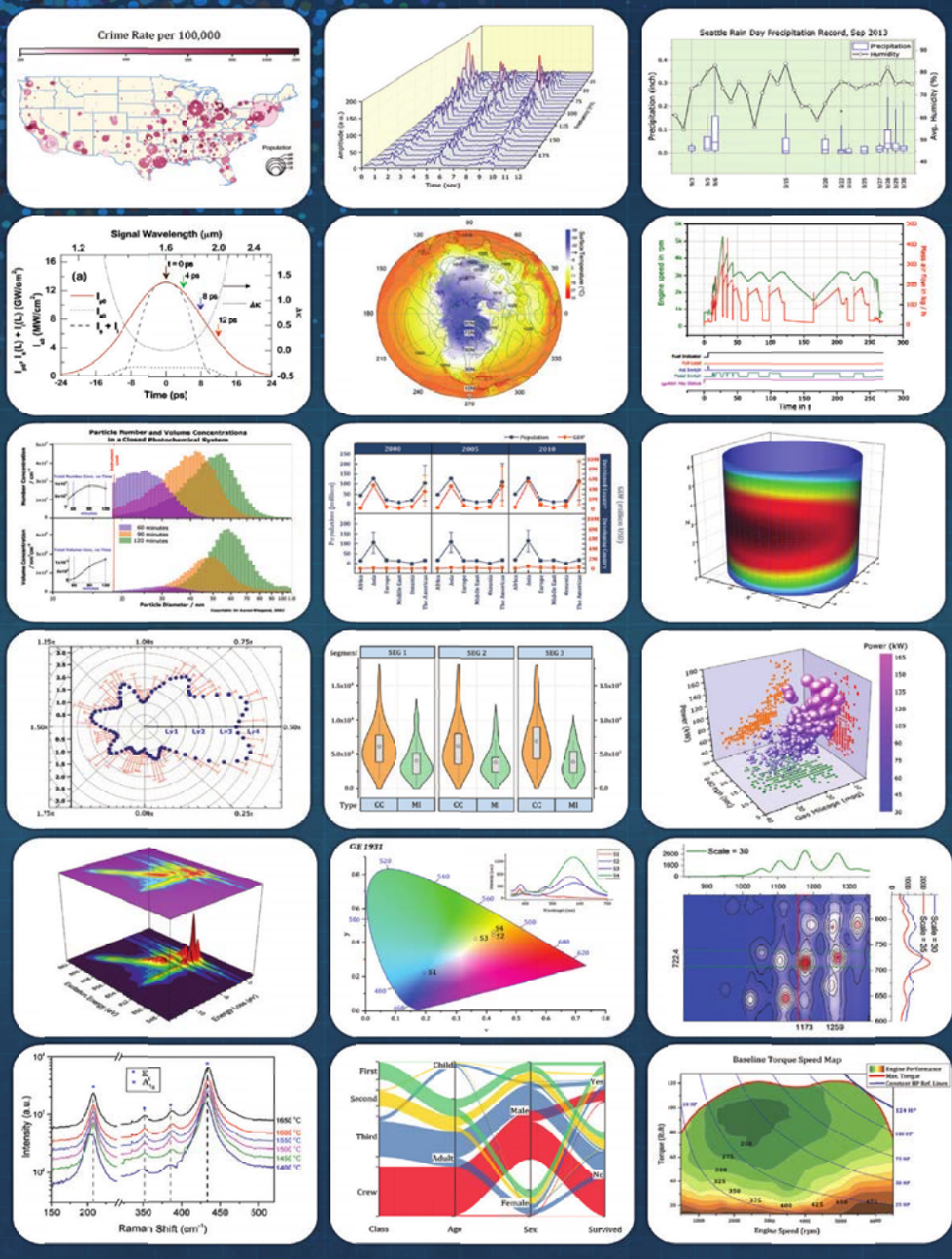
Kemikalier, også de farlige, spiller en stor rolle i udviklingen af et bæredygtigt samfund med masser af vindmøller, Power-to-X og elbiler. Vi skal bruge kemien klogt og udfase den, hvor den ikke er nødvendig, men det periodiske system ser ud, som det gør, så vi er nødt til at frede de anvendelser af farlig kemi, der er essentiel og samfundskritisk, så vi for eksempel stadig kan lave computere eller medicinsk udstyr, også selvom der skal bruges PFAS.

Nikolai Stubkjær Nilsen, konsulent, Dansk Industri

Ny version

ORIGIN® 2021

Graphing & Analysis



OriginLab®

25+ years serving the scientific & engineering community

Kontakt:
Inno-Max

Tlf: 9696 1111

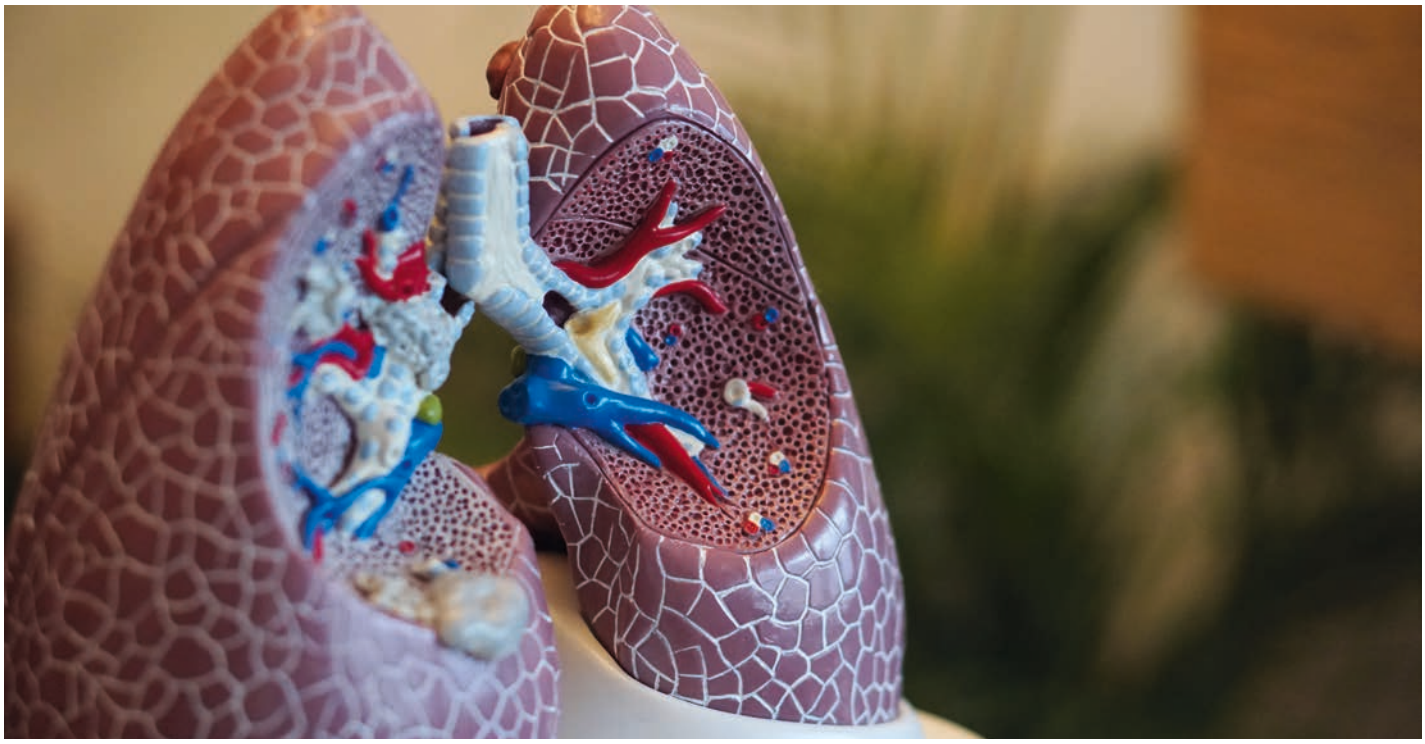


Foto: Robina Weermeijer, www.unsplash.com.

Fluorstoffer i lungerne kan forværre covid-19

Det viser et nyt studie fra forskere på SDU. I studiet har man undersøgt blodet fra danske coronapatienter for fluorstoffer, som skader immunsystemet.

PFBA, som kommer ind i kroppen gennem husstøv og ophobes i lungerne, ser ud til at gøre sygdomsforløbet med covid-19 værre.

Vi bliver alle udsat for de skadelige perfluorerede alkylsyreforbindelser, populært kaldet fluorstoffer, i hverdagen, hvor de benyttes i overfladebehandlinger af blandt andet tekstiler og papir, med konsekvenser for vores sundhed.

Allerede tidligt i coronaepidemien så det ud til, at mennesker, som boede i områder med en høj grad af luftforurening, blev hårdere ramt af virussen. Men der mangler viden om den enkelte persons eksponering for forurening fra giftige stoffer og konsekvenserne heraf.

Forskere fra SDU med Philippe Grandjean, professor i miljømedicin, i spidsen satte sig for at undersøge, om det kunne påvises, at coronasmittede patienter, som var blevet udsat for de giftige fluorstoffer, blev hårdere ramt af coronavirus end andre.

Resultaterne er netop sendt til vurdering i et videnskabeligt tidsskrift og samtidig offentliggjort i medRXiv.

Et mysterium hvorfor nogle bliver mere syge end andre

I studiet har forskerne undersøgt blodprøver fra 323 coronasmittede danskere i alderen 30 til 70 år.

Af dem var 108 ikke indlagt, andre var indlagt i kortere eller længere tid, mens 53 var indlagt på intensiv afdeling og/eller døde af sygdommen. Forskerne undersøgte blodprøverne for fem forskellige fluorstoffer, som alle er kendt for at være skadelige for immunsystemet.

- Det har været et mysterium, hvorfor nogle smittede personer bliver alvorligt syge, mens andre slipper uden særlige symptomer. Vi ved, at ophobning af fluorstoffer i kroppen især ses hos ældre og hos mænd, som netop er mere sårbare for infektionen. Vi havde derfor mistanke om, at fluorstoffer kunne hæmme det naturlige forsvar mod infektion.

Et af fem stoffer gør coronapatienter mere syge

Analyserne af blodprøver fra de 323 patienter viste både gode og dårlige nyheder. Fire af de fem undersøgte stoffer viste sig ikke at forværre sygdomsforløbet med covid-19. Et enkelt gjorde.

- PFBA er det eneste af de almindelige fluorstoffer, der ophobes i lungerne. Man har tidligere troet, at PFBA kunne erstatte de mest farlige fluorstoffer, fordi det ser ud til at forsvinde fra blodbanen relativt hurtigt. Men det ophobes i stedet i lungerne, og nu ser vi, at det er forbundet med skadelig påvirkning.

Studiets resultater understøtter teorien om, at coronasyge fra forurenede områder kan få et sværere sygdomsforløb.

Alle fluorstoffer bør udfases

Danmark er blandt de EU-lande, som har indstillet, at fluorstofferne skal udfases og helst helt forbydes. Og resultatet af det nye studie er ifølge Philippe Grandjean endnu et argument for dette.

- De nye resultater viser, at PFBA bør høre med på listen over fluorstoffer, der ikke bør benyttes. Blandt kendte anvendelser er blandt andet kosmetik, og stoffet anses for at kunne anvendes som erstatning for andre fluorstoffer, der hidtil er anset for særlig giftige. Men PFBA er altså ikke ufarligt, da det ophobes i lungerne og nedsætter vores evne til at bekæmpe virus som for eksempel covid-19.

- Det er endnu en grund til, at forbrugerne skal spørge, om der er brugt fluorstoffer, når de køber møbler, tøj, tæpper og kosmetik.

Kilde: SDU

Hvoraf navnet barbitursyre?

Ture Damhus: editor@kemisknomenklatur.dk
Kemisk Forenings Nomenklaturudvalg

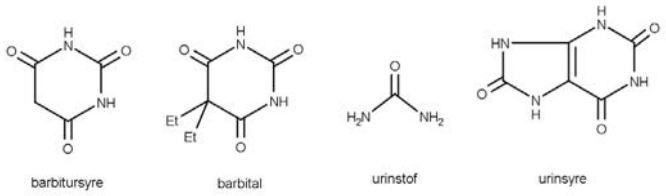
Da Hans Toftlund i 2007 [1] anmeldte Alexander Sennings første kemoetymologiske bog [2], hæftede han sig ved, at Senning ikke foldede sig helt ud med hensyn til den uklare oprindelse af navnet barbitursyre (i [2] læser man blot: 'barbituric acid, of uncertain origin, probably derived from the name Barbara, and urine').

Om det nu skyldes Toftlunds bemærkninger eller ej, så kom Senning med en meget mere udførlig behandling i sin næste bog [3], hvor han omtaler fire mulige oprindelser til navnet.

Navnet barbitursyre blev givet af Adolf von Baeyer, som vi mødte i *Dansk Kemi* [4], og den første forklaring er den allerede nævnte: von Baeyer kendte en kvinde ved navn Barbara, måske hans kæreste, og med den sidste del af navnet tænkte han på urinstofmotivet, som tydeligt ses i strukturen (figur 1; en syntesevej til barbitursyre er at kondensere en malonsyreester med urinstof).

Den næste mulige forklaring skulle være, at von Baeyer havde fremstillet stoffet på St. Barbaras dag (4. december), og ved en frokost med et kompagni artillerifficerer foreslog de von Baeyer at opkalde stoffet efter St. Barbara, som i øvrigt også er artilleristernes skytshelgen.

De to sidste mulige forklaringer har begge noget med skæg at gøre. Den ene var fremsat af den amerikanske kemiker L.F. Fieser, som åbenbart trak den tilbage, men her er den så alligevel. Angiveligt så von Baeyer barbitursyre som *nøglen* til sin forståelse af urinsyres struktur (se igen figur 1), og da det tyske ord *Schlüsselbart* betyder nøglekam, og den sidste del er Bart, som er *barba* på latin, voilá, så har vi en noget usandsynlig forklaring.



Figur 1. Af barbitursyre afledes en række forbindelser, kaldet *barbiturater*, som har været brugt medicinsk, barbital, for eksempel i sovemidlet Veronal. Systematiske navne for de tre cykliske forbindelser her kan findes ved opslag på webstedet *Dansk Kemisk Nomenklatur* [5]. Navnet urinstof er faktisk et stamnavn i den systematiske nomenklatur (*urea* på engelsk).

Den sidste og mest skægge(de) forklaring refererer til *Usnea barbata*, en skæglav-art. Forbindelsen til barbitursyre er dog ifølge Senning hverken bevist eller rationaliseret. Det er ikke desto mindre den forklaring, der anføres af Webster [6]. Oxford derimod holder sig til Barbara [7]. Encyklopædien har en helt femte forklaring [8], og læseren kan let via Wikipedia-opslag finde kilder som [9,10] med endnu flere bud. Vi stopper her!

Man ville normalt kalde navnene barbitursyre, barbital og urinsyre for trivialnavne. IUPAC's definition af *trivial name* er 'A name having no part used in a systematic sense'. Man kan så diskutere, om 'syre' er brugt i en systematisk betydning. Det vil vi gøre i en senere artikel, men barbitursyre er i det mindste en hæderlig Brønsted-syre, noget stærkere end eddikesyre (modsat barbital og urinsyre, hvoraf den sidste vel snarere er karakteriseret ved sin uhyre ringe opløselighed). Navnet barbital er misvisende, da der ikke er tale om et aldehyd. Ifølge Senning er det dannet i analogi til chloral (2,2,2-trichlorethanal), som har en lignende virkning som sovemiddel.

Referencer
1. H. Toftlund: De kemiske navnes oprindelse, anmeldelse af [2], *Dansk Kemi* **88** nr. 6/7 (2007) 38.
2. A. Senning: *Elsevier's Dictionary of Chemoetymology* [Elsevier 2007; ISBN 0-444-52239-5].
3. A. Senning: *The Etymology of Chemical Names - Tradition and Convenience vs. Rationality in Chemical Nomenclature* [De Gruyter 2019; ISBN 978-3-11-061106-9].
4. A. Senning: På rundtur i den kemiske nomenklaturs rædselskabinet, *Dansk Kemi* **101** nr. 5 (2020) 24-25.
5. www.kemisknomenklatur.dk.
6. *Webster's New World College Dictionary* [4th Ed., Macmillan 2001].
7. *Oxford English Reference Dictionary* [2nd Ed., Oxford University Press 2003].
8. *Den Store Danske Encyklopædi* (1995): Barbitursyre, sammentrækning af ital. *barbabietola* 'sukkerroe, rødbede' og *urat* 'salt af urinsyre' og *syre*.
9. R.H. Anders: Geschichte eines Schlafmittels, *Pharm. Zeitung* 47/2003 skriver om von Baeyer, uden yderligere henvisninger: "Durch Abbau identifizierte er sie als Malonylharnstoff und nannte sie Barbitursäure nach der (be-)trügerischen Alchemistin Barbara von Cilly, Gemahlin des Kaisers Sigismund".
10. G.B. Kauffman: Adolf von Baeyer and the naming of Barbituric Acid, *J.Chem. Educ.* **57** #3 (1980) 222-223 nævner, at i yderligere en historie var Barbara en servitrice i en bar i München, som leverede urinprøver til von Baeyers undersøgelser over urinsyre og beslægtede forbindelser!

TAPIR HL
LEAK DETECTION

TAPIR HL leak detector er specielt designet til at lokalisere og kvantificere lækager i din vakuum proces.
Undgå yderligere omkostninger på grund af lækager.
Få din TAPIR nu.

Busch Vakuumteknik A/S
+45 87 88 07 77
info@busch.dk
www.buschvacuum.com

BUSCH
VACUUM SOLUTIONS

Mobilt MS til måling af forurening

Online-analyse af uorganiske og organiske forureninger med et mobilt massespektrometer. Det giver mulighed for at registrere forureningskilder hurtigt og forståeligt

Af Rebecca Wagner, Dr Marvin Shaw og Dr David Carslaw, University of York, Wolfson Atmospheric Chemistry Laboratories, Department of Chemistry

Registrering af forureninger i byområder (og for den sags skyld også i landområder) er vigtig på grund af deres negative indvirkning på folkesundheden samt det omgivende miljø. Her kan nævnes: hjerte-kar-sygdomme, astma, hoste, visse typer af kræft; dannelse af lavtliggende ozonlag som er medvirkende til smog og som kan virke hæmmende på plantevækst.

Det mobile laboratorium

Derfor har vi opbygget et mobilt laboratorium for at kunne måle udendørs forureninger med en samtidig registrering af fundstedet. Dette er testet i York-området. Systemet består af et SIFT, Voice 200 massespektrometer, som anvender forskellige reagens-ioner (H_3O^+, NO^+ og O_2^+). Dette giver mulighed for nogen selektivitet i analysen, da reaktionsvejene ofte er forskellige for de enkelte ioniseringsmuligheder, og slutprodukterne frit kan vælges til at repræsentere de enkelte komponenter.

Hurtigt overblik

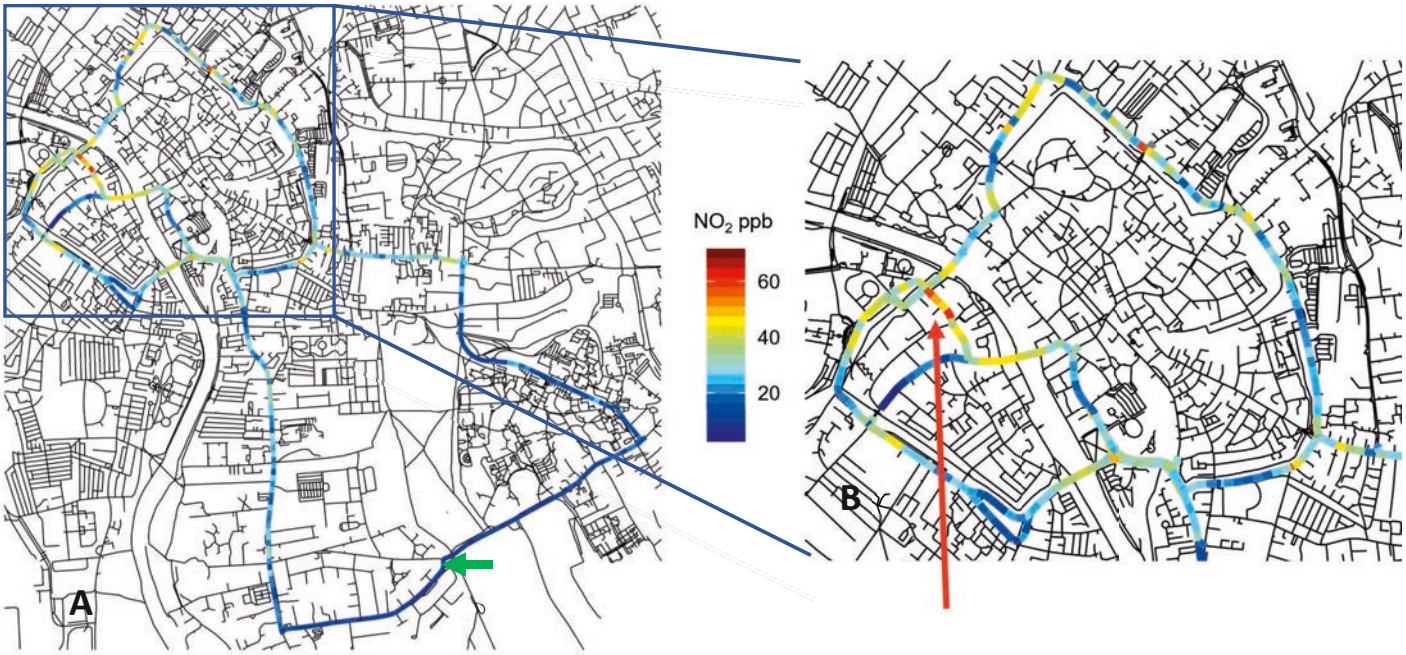
Almindeligvis bruges få enkeltkomponenter som indikatorer for helheden, eller også opsamles VOC'er på termisk desorptionsrør (TD) eller aktivt kul, hvorefter disse detailanalyseres med GC/MS. Specielt for sidstnævnte er det imidlertid vanskeligt at opnå et samlet billede, da der nødvendigvis opsamles prøver på enkeltpositioner på et givet tidspunkt. Derfor er et mobilt massespektrometer med online-analyse, som giver et komplet billede på få sekunder, mere velegnet til at give et overblik over forureninger samt eventuelt medvirke til at opspore disse. Kombinationen af disse data med GPS er velegnet til at give såvel trænede analytikere som lægpersoner et nemt forståeligt overblik over mulige forureninger samt deres kilder. Der kan bestemt argumenteres for, at et semi-selektivt MS-system aldrig vil kunne give samme detaljerede information som en TD-GC/MS-analyse. På den anden side vil ingen GC/MS-analyse kunne give det detaljerede overblik som en GPS/MS-registrering af en hel by - på kort tid vel at mærke - kan give.

Samtidig giver et mobilt massespektrometer også mulighed for hurtigt at detektere og registrere flygtige forureninger fra industrier, for eksempel NH_3 fra svinefarme eller forureninger på havet og i havne fra afbrænding af tung diesel.

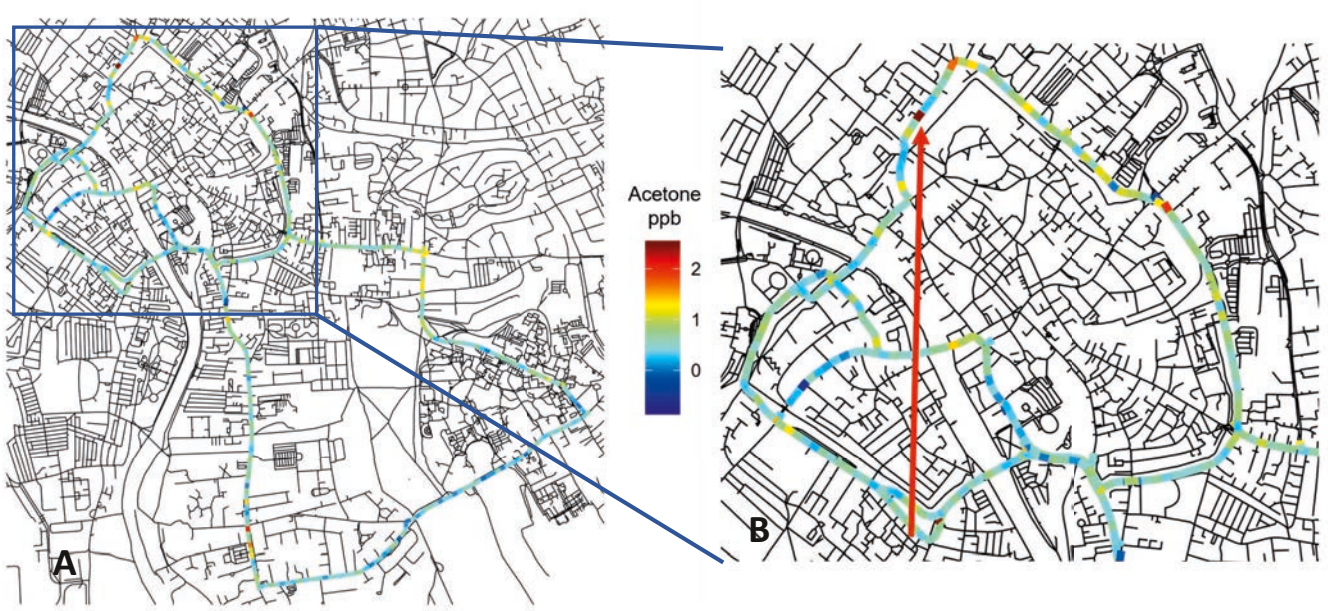
Data i realtid under kørsel

I figur 1 ses den varevogn, vi har anvendt til formålet, samt indbygningen af SIFT, med en støddæmpende ramme for at beskytte massespektrometeret. I vognen blev der desuden

Figur 1. Den anvendte varevogn (A), og massespektrometeret indbygget i denne (B).



Figur 2. Et kortudsnit af York, med farvemapning af de fundne koncentrationer af for eksempel NO_2 på den fundne rute (A). Desuden et kortudsnit (B) med farvemapning, samt angivelse af Rougier Street, rød pil, hvor de høje koncentrationer af NO_2 blev fundet. Til sammenligning er Heslington Lane/High Street markeret med grøn pil.



Figur 3. Et kortudsnit af York, med farvemapning af de fundne koncentrationer af acetone på den fundne rute (A). Desuden et kortudsnit (B) med farvemapning, samt angivelse af Gillygate, rød pil, hvor de høje koncentrationer af acetone blev fundet.

indbygget et transportabelt elanlæg samt en bærbar datastation til styringen af systemet/opsamling af GPS-data. Data opsamlet på turene rundt i York blev normalt analyseret efter kørslen, men det er muligt at opsamle og se data i realtid under kørslen, hvis det ønskes - eventuelt for at få et første overblik over, hvilke områder der skal satses på efterfølgende. Ved analyserne af data efter kørslen samlede vi disse i mindre GPS-blokke og tog middelværdien af de fundne koncentrationer. Dette gjorde vi, idet det eliminerede tilfældige "spikes" i data, hvilket gav et mere reelt billede af den mulige forurening.

Data fra kørsel i York

Det mobile massespektrometer har som nævnt været anvendt til at registrere emissionskilder i York, og i det efterfølgende viser vi udvalgte data fra en enkelt kørsel i området. Vi har valgt nogle markører, og i tabel 1, side 10, viser vi, hvilke reagensioner vi har anvendt til disse. Vi vil også gerne give et par konkrete eksempler på den opsamlede information.

NO_2: NO_2 er interessant, idet det er en almindelig forurening i byer. Det dannes i bilers udstødning, og er medvirkende til blandt andet nedsat lungefunktion.

I figur 2 ses registrering af NO_2 i de kørte gader i York. På kortet ses tydeligt, hvor koncentrationen nåede op over 60 ppb. Specielt interessant er Rougier Street, rød pil, hvor der er mange stoppesteder for busser. Til sammenligning ses et langt sammenhængende mørkeblåt område i bunden af oversigtskortet (Heslington Lane/Main Street), som ligger i yderkanten af York, og altså et mindre "tæt" område. Her nåede ingen af de målte koncentrationer over 20 ppb.

Acetone: Ved forøget tilsætning af alkoholer til brændstof er

der også en forøget sandsynlighed for dannelsen af carbonylforbindelser. Et bemærkelsesværdigt fund blev gjort i Gillygate, se figur 3, side 9, vist med den røde pil. Middelværdien for acetone var 2 ppb, men her blev der fundet 65 ppb. Dette skyldes sandsynligvis tilstedeværelsen af et par "neglebarer". Fundet af acetone blev konfirmeret med GC.

Lovende teknik

Vi mener, at teknikken er lovende med henblik på at registrere forureningskilder på nem forståelig vis på et niveau, som ikke tidligere er set. Teknikken er ikke så selektiv som egentlig TD-GC/MS, men letheden hvormed data er opsamlet og muligheden for præsentation af data, er ikke set før. Hvis enkeltdata skal konfirmeres, bør de indsamlede resultater kontrolleres med egentlig TD-GC/MS-analyse.

Oversættelse: Jens Glastrup

E-mail:
Jens Glastrup: jens@msconsult.dk

H_3O^+	NO^+	O_2^+
Ammoniak (18)	Isoprene (68)	Nitrogendioxid (46)
Methanol (33)	Benzen (78)	
Acetaldehyd (45)	Acetone (88)	
Ethanol (47)	Toluen (92)	
Nitrous Acid (48)	m-xylen (106)	
Butadiene (54)	Trimethylbenzen (120)	
	Monoterpener (136)	

Tabel 1. De analyserede komponenter, hvilken ion der er anvendt til ioniseringen, massen af den ioniserede komponent (i parentes). Total analysetid for de angivne komponenter 2,5 sek., dwell time 90 msek.

Seks nytænkende forskningsprojekter modtager midler

Novo Nordisk Fonden uddeler 348 millioner kroner til seks nytænkende forskningsprojekter, der skal udvikle løsninger på en række globale udfordringer inden for sundhed og teknologi. Det sker gennem Novo Nordisk Foundation Challenge Programme.

Ud af de 348 millioner kroner går godt halvdelen, 179 millioner kroner, til forskning i biodiversitet. Beløbet er fordelt på tre projekter og er det største samlede beløb, der hidtil er givet til dansk forskning i biodiversitet.

De tre projekter fokuserer alle på sammenhængen mellem biodiversitet og udnyttelsen af dyrket jord, herunder hvordan skovrejsning kan bruges som instrument i kampen mod klimaforandringer gennem binding af CO_2 i træmassen, men også som levested for arter, der kan være med til at styrke biodiversiteten.

To andre bevillinger på i alt 108,6 millioner kroner er givet inden for udvikling af kvanteteknologi, hvor bevillingsmodtagerne vil finde ny viden om komplekse biologiske processer og biomolekyler, der kan benyttes til blandt andet udvikling af nye lægemidler og energieffektive materialer.

Endelig er der uddelt en bevilling på 59,9 millioner kroner til et projekt, der vil finde ny viden om svampes nedbrydning af biomasse, som er et af de redskaber, vi kan bruge for at udnytte affald og biomasserester i den grønne omstilling.

10 MINDRE ULIGHED

Verdensmål nr. 10:

Mindre ulighed

Foto: Swapnil Dwivedi. www.unsplash.com.

Det overordnede mål er at udrydde uligheder mellem lande. Det primære fokus er uligheder i indkomst, men også uligheder mellem forskellige grupper som for eksempel rig/fattig, alder, køn, handicap, race, etnicitet, oprindelse osv. er der fokus på og herigennem at sikre lige muligheder for alle.

Klimaforandringer og "naturlige" katastrofer har en uforholdsmæssig større effekt på de mest sårbare grupper og er dermed med til at øge uligheden både på tværs af landegrænser såvel som indenfor de enkelte lande. Over de seneste godt 10 år er mere end 20 millioner mennesker mere eller mindre frivilligt blevet fordrevet fra deres oprindelige hjem på grund af hændelser, der kan tilskrives klima og/eller vejr. Også manglen på adgang til, og udnyttelsen af, naturlige ressourcer, som for eksempel rent vand, er en medvirkende faktor til øget ulighed og ofte til konflikter, ligesom ulighed spiller en væsentlig rolle i relation til sundhed.

I forbindelse med en reduktion af ulighed kan betydningen af kvalitetsuddannelse ikke undervurderes. Her spiller den kemiske industri en væsentlig rolle gennem dens engagement i uddannelsesaktiviteter og støtte til udvikling af institutioner med fokus på en bæredygtig udvikling samt til en mere ligelig og fair adgang til og brug af naturlige ressourcer. Generelt kan det siges, at fornuftige investeringer i håndteringen af naturlige ressourcer og ikke mindst i en sund forvaltning af miljøet vil have en gavnlig virkning i relation til reduktion af uligheder. Områder, hvor kemisk ekspertise i praksis vil være uundværlig.

Vandrensning er et eksempel på et område, hvor kemisk ekspertise er en nødvendighed. Mange virksomheder er aktive på området, blandt andet danske Aquaporin. Som et konkret eksempel kan Natural Capital Partners' projekt i Guatemala nævnes, hvor uddeling af filtre til vandrensning, der, sammen med forbedret effektivitet af brændsel til madfremstilling, har reduceret den indendørs luftforurening. Foreløbig har mere end 230.000 mennesker draget fordel af dette "Gold Standard water treatment or cookstove project".

Lars Carlsen,
lc@awarenesscenter.dk

For detaljer om verdensmål 10, se:
https://sustainabledevelopment.un.org/sdg10

Relaterede verdensmål:

- Mål 1: Afskaf fattigdom
- Mål 2: Stop sult
- Mål 3: Sundhed og trivsel
- Mål 4: Kvalitetsuddannelse
- Mål 5: Ligestilling mellem kønnene
- Mål 7: Rent vand og sanitet
- Mål 8: Anstændige jobs og økonomisk vækst
- Mål 17: Partnerskab for handling

Grænsefladen mellem at komme fra et spændende forskningsresultat til en reel levedygtig virksomhed, har altid interesseret CEO for BII Jens Nielsen. Men for at det kan lykkes, er der meget, der skal gå op i en højere enhed.

En stærk inkubator

CEO for BioInnovation Institute (BII) Jens Nielsen har store visioner - at BII bliver Europas førende inkubator for entreprenørskab. For at nå det ambitiøse mål kræver det, at alle trækker i samme retning.

Af Katrine Meyn,
km@techmedia.dk

Det var Novo Nordisk Fonden, der i 2017 etablerede BioInnovation Institute (BII), som et treårigt internt projekt. Initiativet blev taget, fordi man så, at der i Danmark var alt for få danske opstartsvirksomheder, der lykkedes. Vejen fra lovende akademisk forskning til en levedygtig virksomhed, var simpelthen for lang og bumpet.

Det skal BII rette op på. BII's formål er derfor at fungere som en bro fra akademisk forskning, frem til der er udarbejdet en forretningsplan og modnet en teknologi, der kan tiltrække kommercielle investorer.

Vi har et problem i Danmark

Og behovet er stort. Statistikken viser, at vi i Danmark tager for få patenter i forhold til de lande, vi ellers sammenligner os med. De store virksomheder udtager masser af patenter, mens universiteterne udtager for få. Og de patenter, der udtages, udnyttes alt for sjældent [1].

- Det skyldes, at det er utroligt svært at finde den nødvendige startkapital, forklarer CEO for BII Jens Nielsen.

Et godt match

Jens Nielsens egen forskning har altid været anvendelsesorienteret, og han har i løbet af sin karriere samarbejdet med en lang række store danske og udenlandske virksomheder og har selv erfaring med at opstarte flere virksomheder spundet ud af egen forskning. Derfor var han en naturlig kandidat til at overtage ledelsen af BII.

Og han var ikke i tvivl, da han blev spurgt - og siden startede som CEO i februar 2019. Sideløbende arbejder han 2-3 dage om måneden deltid i sit professorat på Chalmers Universitet, hvor han har en stor forskningsgruppe og en række ph.d.-studerende han ikke vil lade i stikken.

- For mig er det en spændende opgave både fagligt og personligt. Selvom jeg naturligvis overvejede, om jeg ville savne mit faglige arbejde for meget. Men det har ikke været tilfældet. Det har vist sig, at arbejdets kompleksitet, de mange

varierede udfordringer og det høje videnskabelige fokus har udfordret mig og givet mig mulighed for at bruge mit potentiale på en ny måde, forklarer han.

BII som separat fond

Målet er, at BII skal spinnes ud som en separat fond sidst i 2020.

- Derfor blev det min første opgave at lave en forretningsplan, en strategiplan, at få en ledelse på plads, at opbygge organisationen osv., siger han (faktaboks 1, side 14).

Hvordan gør man så overgangen fra en lovende forskning til levedygtig virksomhed lettere? Det gøres på BII via en række forskellige programmer, der henvender sig til forskellige stadier af udvikling (faktaboks 2-4, side 14).

Man behøver ikke at gennemgå alle tre programmer (Venture Lab, Creation House og Residence), men kan komme ind på det stadie, hvor virksomheden befinder sig. Man kan komme ind på ethvert tidspunkt og man kan forlade programmerne på ethvert tidspunkt.

Finansieringen er meget stiftervenlig. Midlerne gives som et konvertibelt lån. Skaffer selskabet yderligere midler, kon- ▶

TOTALLØSNINGER TIL LABORATORIET

hos MSC

KURSER

Standardkurser - Tilrettede kurser - Seminarer og Workshops

Biotek
Celledyrkning
Histologi
PCR
ELISA
Antistoffer
Proteinkemi
Immunologi m.fl.

Chromatografi
GC - GCMS - HPLC - LCMS m.fl.
Teori og hands-on
Intro- og videregående kurser
Træning on-site

Tjek hele kursuskalenderen på
www.msconsult.dk

MSC Bøgesvinget 8 DK-2740 Skovlunde +45 44 53 93 66 info@msconsult.dk www.msconsult.dk

verteres lånet til aktier i selskabet under meget favorable vilkår. Det er investorerne, der prissætter selskabet.

Lukker selskabet, afskrives lånet som en donation. Dvs. man hænger ikke personligt på lånet, hvis det ikke lykkes.

1. BII: ledelse og strategi

Det første Jens Nielsen gjorde som CEO for BII, var at opbygge en stærk ledelse. Ud over ham består topledelsen af:
Chief Business Officer (CBO) Bobby Soni. Han kommer fra North Seas og har tidligere arbejdet i IB Group i England.
Chief Technology Officer (CTO) Markus J. Herrgård. Professor på BioSustain, DTU med en meget stærk teknisk baggrund inden for it og it-anvendelse i life science og matematisk modellering.
Chief Operating Officer (COO) Thomas Hoffmann. Han har en lang erfaring fra Vækstfonden og var med til at skrive de oprindelige strategiplaner for BII.

BII's strategiplan:
Fase 1 = 2018-2020 - etableringsfasen.
Fase 2 = 2020-2023 - opskaleringsfasen.
Fase 3 = udgangen af 2023 - fuld skala.
Det er en meget hurtig opskalering. Det kan lade sig gøre, fordi programmerne er afprøvet og fungerer. Og fordi man er blevet god til at udvælge velegnede projekter.

Så midlerne gives ud fra det solidaritetsprincip, at får man som selskab succes, er man med til at støtte andre

2. BII's program Venture Lab

Programmet Venture Lab er målrettet til forskere, der har et solidt videnskabeligt resultat med nogle lovende forretningsmuligheder, men som mangler en klar forretningsplan. Der mangler for eksempel viden om, hvor stort markedet er, hvordan man kommer ind på markedet osv.

Den type selskaber støtter BII med 4 millioner kroner i konvertible lån. Virksomheden kan på BII benytte laboratorier og netværk i 12 måneder. Her får de den nødvendige viden/uddannelse om blandt andet IP, forretningsudvikling, ledelse osv.

Målet er, at man efter 12 måneder har en færdig forretningsplan.

- Til næste år kombinerer vi Venture Lab og PreSeed i ét program. Så vi både får modnet projektet og samtidig lavet en forretningsplan, siger Jens Nielsen og forklarer:

- PreSeed-programmet blev også oprindeligt kørt af Novo Nordisk Fonden, men er nu overgået til os. I dette program får man en bevilling på 3,5 millioner kroner til at modne en teknologi, dvs. der er fokus på at udføre eventuelt manglende kritiske forsøg.

3. BII's program Creation House

Programmet Creation House er målrettet lidt mere modne selskaber. Der er lavet en forretningsplan, kritiske faktorer er afdækket, og man har sikret sig den nødvendige IP.

Der gives 10 millioner kroner i konvertible lån, og de kan benytte BII's faciliteter på samme vilkår med mulighed for at anvende laboratorier, netværk mv. i op til 18 måneder. Målet er at modne casen yderligere, tale med investorer osv.

Virksomhederne accelereres op til et stadie, hvor de nemt kan søge for eksempel Innovationsfondens midler, EU-midler osv.

Det er et meget eftertragtet program, og der er et stort søgetryk på det. Der er på nuværende tidspunkt cirka 15 selskaber i programmet.

startup-virksomheder og dermed økosystemet fremadrettet.

Partnerskaber med relevante partnere

- Det er min vision for BII, at man, ud over hjælp til finansiering, søger samarbejde med os på grund af den støtte og det netværk, vi har. Vi har opbygget, og er stadig i gang med at opbygge, partnerskaber med firmaer.

- Vi samarbejder med Zacco, Plesner og PwC, der bidrager med 10-15 timer pro bono til alle BII's selskaber. Det kan for eksempel være legalt råd, råd om patentering, råd om hvordan man laver regnskaber osv.

- Netop nu er vi ved at indgå partnerskab med et PR-bureau, som måske kan hjælpe med grafisk design, logo osv. - delvist pro bono.

- Vi har lavet aftaler med et headhunter-firma, der kan hjælpe med at finde en ny CEO, en formand for bestyrelsen eller hvad der er brug for.

4. Residence-programmet

Residence-programmet er ikke så klart formaliseret som de andre programmer.

- Vi fandt ud af, at man, når man har været igennem Creation House, ofte har behov for en periode på 12-24 måneder til at finde den videre vej for selskabet. Indtil man er klar til at flyve fra reden, kan man fortsat leje lokaler og være hos os, siger Jens Nielsen.

5. BII's Faculty-program

Støtte af nytænkende og potentielt samfundsændrende forskning
Faculty-programmet passer ikke ind i nogle rammer. Her støttes forskning, der kan sikre et mere bæredygtigt samfund, en bedre sundhedssektor osv. Forskningen skal være nytænkende og gå helt nye veje.

- Vi finder en professor, der udfører topklasseforskning. Professoren har måske været vant til at starte selskaber før, er innovativt orienteret og har en idé, der kan være meget risikobetonet, men som, hvis den holder, kan transformere samfundet. En stor idé er ofte svær at skaffe midler til, siger Jens Nielsen og fortsætter:

- Hvis vi vurderer, at ideen har potentiale, så beder vi professoren lave et virtuelt selskab, som vi finansierer ret generøst i tre år med 6 millioner kroner om året.

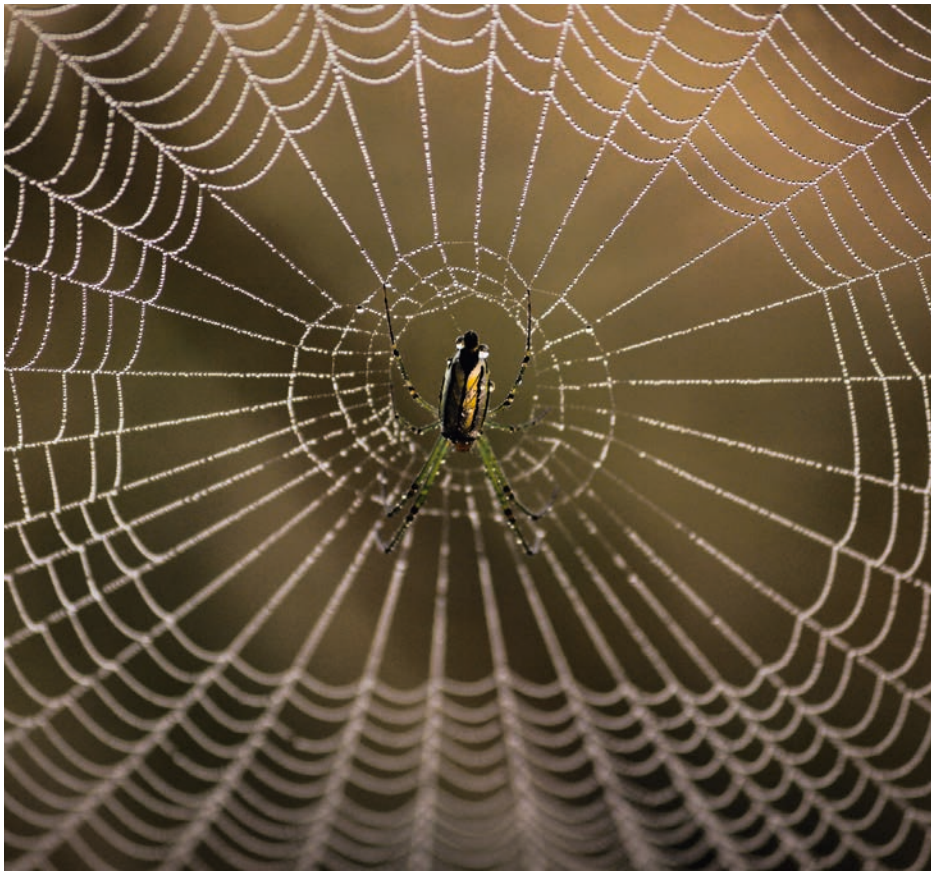
- Vi giver bevillingen til universitetet og vi har på nuværende tidspunkt fire projekter i gang på DTU. IP'en ligger på universitetet, selvom BII finansierer det hele.

- Derudover forhandler vi med en række andre firmaer om partnerskaber, om emner som for eksempel lægemiddeludvikling, storskalaproduktion eller hvad det nu kan være. Det skal blot være en ekspertise eller kompetence, der kan gavne selskaberne, forklarer Jens Nielsen.

Europas førende inkubator for entreprenørskab

- Vores vision er at blive Europas førende inkubator for entreprenørskab. Dvs. at udbygge BII, skalere op og tage endnu flere selskaber ind. Målet er, at vi naturligt tiltrækker gode forskningsideer fra hele Europa og i 2023 at nå 50 selskaber inklusive virtuelle firmaer (faktaboks 5).

Der er en selvforstærkende effekt i at blive større. Det bliver lettere at tiltrække udenlandsk kapital. Når en udenlandsk investor kommer forbi BII, så kigger vedkommende lige i porteføljen for at se, om der er andre investeringsmuligheder, og så kan det pludseligt bedre betale sig at investere, selvom man bor langt væk, for eksempel i USA. Og igen er det en selvforstærkende effekt - kommer de udenlandske investorer her, så tiltrækkes der flere udenlandske selskaber osv.



- Det er vores rolle at være en facilitator og en katalysator for processen (vejen mod at blive en levedygtig virksomhed). Et billede på BII's rolle er, at vi sidder i midten af edderkoppespindet og sikrer, at alle trådene bliver samlet, siger CEO Jens Nielsen.

6. Eksempler på Faculty-projekter

Jens Nielsen giver et par eksempler på Faculty-projekter, der støttes af BII: Det ene udføres af Jay Keasling, Berkeley (herunder BioSustain, DTU). Han arbejder med at finde plante-naturstoffer, der potentielt kan bruges i forbindelse med afvænning af afhængighed af opoioider. Der er store teknologiske udfordringer forbundet med at fremstille en gær, der kan producere naturstofferne, men det kan sandsynligvis lade sig gøre. Den anden store udfordring er at finde et marked. Produktet har potentiel stor positiv betydning for samfundet, men det er ikke en traditionel venture-investering. Her arbejder BII sideløbende i den treårige periode med at finde alternative forretningsmodeller.

Et andet eksempel er samarbejdet med Henriette Svarre Nielsen på Hvidovre Hospital. Hun forsker i at finde biomarkører for ufrivillig abort.

I dag kan man først få hjælp i systemet, hvis man har haft tre ufrivillige aborter. Hvis man kan finde nogle tidlige biomarkører, kan man hurtigere se, om man er i risikozonen for at få en ufrivillig abort, så man kan behandle det meget tidligere, end det er muligt i dag.

- Det er også en relativ svær forretningssag, selvom det åbenlyst lyder som en god idé - der er en stor efterspørgsel, og det betyder meget for folks livskvalitet - men hvem skal købe og finansiere det? Vi støtter projektet, fordi vi mener, at det har stor samfundsnytte, siger Jens Nielsen.

- Hvis vi skal nå vores mål, så er der behov for, at alle interessenter trækker samme vej. Der er stadig en del synergieffekter at hente, og det giver nogle fantastiske muligheder, hvis vi lykkes, slutter Jens Nielsen.

Reference
1. S.Y. Sørensen, M.K. Svensen, L.H. Jakobsen et al. Verdens ledende Science & Engineering-regioner, ATV-rapport udarbejdet for ATV af Teknologisk Institut (2020).

Novo Nordisk Fonden

Novo Nordisk Fonden uddeler årligt over 4 milliarder kroner til forskning. Et beløb, der skal nå op på 5 milliarder kroner i 2022.

Miljøfølsomme polymerer og maskinlæring

Identificer smag ved farveændringer

Et nyt værktøj til hurtige og pålidelige analyser til brug inden for produktudvikling i fødevaresektoren.

Af Carina L. Gargalo[1] og Noga Gal[2]

[1] Process and Systems Engineering Center (PROSYS), Institut for Kemiteknik, Danmarks Tekniske Universitet

[2] Interdisciplinary Nanoscience Center (iNANO), Aarhus University

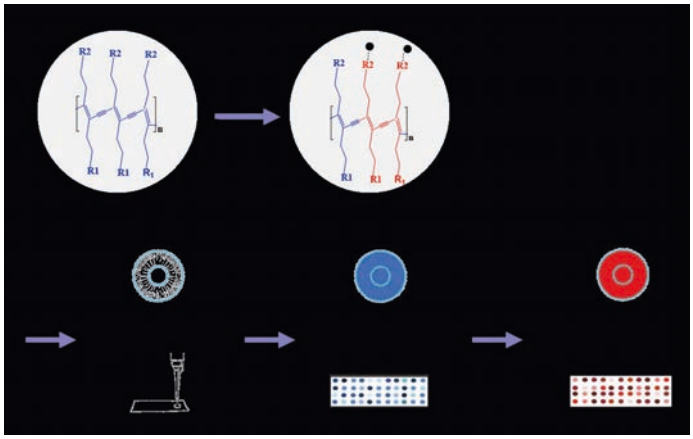
Bevarelse af vores ressourcer er blandt de vigtigste udfordringer, vores samfund står over for. Adgang til hurtige og pålidelige testmetoder, der muliggør hurtig og omfattende screening, kan bidrage til at reducere madspild, lette hurtig tilpasning til skiftende kundekrav og øge gennemsigtigheden i produktionslinjen i arbejdet med at øge kundernes tillid. Desuden forventes den samme måleteknologi at være anvendelig uden for fødevaremarkedet, såsom til påvisning af tungmetalforurening i ledningsvand eller til detektion of patogener i kloaksystemet.

Målekonceptet

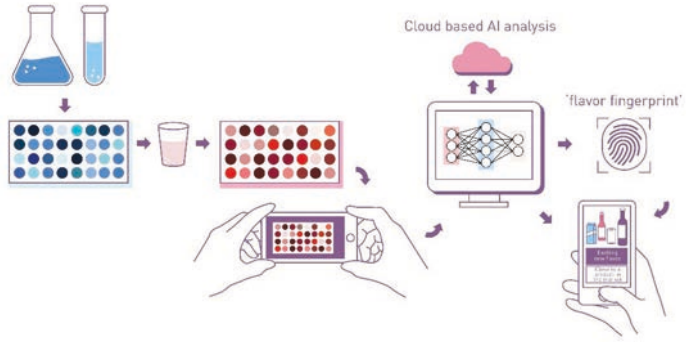
Vores teknologi er baseret på en række miljøfølsomme sensorer (polymerer), der analyseres ved hjælp af maskinlæringsalgoritmer (ML). I modsætning til de fleste aktuelle sensorparadigmer bærer hver sensors individuelle respons i arrayet ikke meget information. Det kombinerede respons af hele arrayet er et unikt svar for en bestemt analyt, dvs. et smagsfingeraftryk, figur 1.

Sensorarrayet består af polydiacetylener (PDA'er), ikke-toksiske polymerer, der udviser en blå til rød farveændring som reaktion på eksterne stimuli [1,2].

Responset kan tilpasses ved hjælp af modifikationer af de funktionelle grupper af diacetylenmonomeren, figur 1a. Disse ændringer kan variere fra meget specifikke enheder, der reagerer med udvalgte molekyler i testopløsningen til kemiske grupper, der kun muliggør svage ikke-specifikke interaktioner. Efter inkubation med analytopløsningen, analyseres og interpreteres arrayets samlede farveændring ved at anvende en mønstergenkendelsesalgoritme, der drager fordel af de nyeste udviklinger inden for AI og ML. Formålet med denne analyse er at identificere prøver, der afviger fra det forventede farvemønster. Dvs. prøver der afviger fra bulk-opløsningen. Dette koncept kan anvendes i fødevareindustrien til ny produktudvikling, når man søger efter produkter med alternative smagsprofiler, såvel som i kvalitetskontrol for at udelukke batch, der ligger uden for det forventede parameterinterval.



Figur 1. Videnskabelig baggrund for måleprincippet: a) PDA-funktionelle grupper modificeres til at interagere med forskellige smagsmolekyler i en prøve, hvilket resulterer i et blåt-til-rødt farveskift af polymeren. b) Diacetylenmonomerer samles enten i vesikler i opløsning (øverst) eller anbringes på et filterpapir (bund), før de er UV-tværbundet, hvilket resulterer i en blå polymer, der udviser en blå-til-rød farveforskydning, når den inkuberes med en analyt.



Figur 2. Målekoncept baseret på kombinationen af en række miljøfølsomme PDA'er og cloudbaseret AI-analyse for at identificere smagsfingeraftryk. Eksemplet vist her illustrerer et papirstrimmelbaseret PDA-array, der inkuberes med en prøve. Den blå-til-røde farveændring i sensorarrayet kan bestemmes ud fra billeder taget før og efter inkubation med prøven. Efter cloudbaseret AI-analyse kan smagsfingeraftryk af den analyserede prøve sammenlignes med kendte specifikke analytter eller prøver.

Foto: Kyryll Ushakov, www.unsplash.com.

The Beer Fingerprinting Project/Smagsfingeraftryk af øl

Vi har udviklet dette målekoncept i et samarbejde mellem Aarhus Universitet, DTU og Carlsberg i løbet af de sidste tre år. "Beer Fingerprinting Project" sigter mod at etablere en hurtig metode til at analysere et stort sæt af varianter af gær i de tidlige stadier af øludviklingsprocessen. PDA-sensor arrays, der fungerer som en pre-screeningsmulighed, vil supplere mere præcise, men tidskrævende og dyre metoder som for eksempel gaskromatografi og sensoriske paneler.

Vi har udviklet to typer PDA-baserede sensorer til dette formål. De blev testet med hensyn til deres evne til at skelne øl fra Carlsberg-porteføljen. I en løsning er sensorarrayet baseret på papirstrimler spottet med PDA-prikker, figur 1bii. Papirstrimlen er scannet før og efter inkubation i øl, og graden af blå-til-rød forskydning for de enkelte prikker identificeres ved hjælp af CIELAB-farverumsmodellen.

Sensorarrayets unikke respons er et resultat af eksponeringen for en valgt øl, og evalueres ved hjælp af ML-algoritmer, såsom logistisk regression. Fra oprindeligt over 70 PDA-prikker identificerede vi disse sensorprikker, der varierer i enten diacetylenmonomer-modifikationerne eller i det forhold/de koncentrationer, der anvendes, når PDA-prikkerne bliver spottet, som er særligt velegnede til vores formål. I øjeblikket muliggør denne teknologi at detektere forskellen mellem fire øl med lignende alkoholindhold og farve. Alternativt kan PDA-nanopartikler fremstilles og bruges som væskesensorer, figur 1bi. I dette tilfælde kan det blå-til-røde farveskift følges i opløsningens absorptionsspektre, typisk ved hjælp af en multipladelæser. Vores aktuelt bedst fungerende array er baseret på fem forskellige diacetylenmonomer funktionelle grupper, som kan skelne mellem fire kommercielle øl med stigende EtOH-indhold og to øl med lignende EtOH-indhold ved hjælp af principal komponentanalyse (PCA) [3].

BettaSensing

BettaSensing er et spinout, der blev etableret i forbindelse med dette projekt. BettaSensing vil kommercialisere denne teknologi fra laboratoriet til fødevareindustrien på basis af det demonstrerede potentiale i konceptet og de identificerede markedsbehov. Et led i denne kommercialisering er at implementere og drage fordel af den nyeste udvikling inden for diacetylenkemi og ML-algoritmer for at gøre vores sensorarrays billigere og mere nøjagtige. Derudover vil det også understøtte at udvide applikationerne af teknologien ud over industriel fremstilling af mad og drikkevarer, figur 2.

E-mail:
Carina L. Gargalo: carlour@kt.dtu.dk

Referencer

1. Qian, X.; Städler, B. Polydiacetylene-Based Biosensors for the Detection of Viruses and Related Biomolecules. *Adv. Funct. Mater.* 2020, 2004605. https://doi.org/10.1002/adfm.202004605.
2. Qian, X.; Städler, B. Recent Developments in Polydiacetylene-Based Sensors. *Chem. Mater.* 2019, *31* (4), 1196–1222. https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.8b05185.
3. Qian, X.; Gargalo, C. L.; Gernaey, K. V.; Städler, B. Distinguishing Commercial Beers Using a Solution-Based Sensor Array Derived from Nanoscale Polydiacetylene Vesicles. *ACS Appl. Nano Mater.* 2020, *3* (4), 3439–3448. https://doi.org/10.1021/acsanm.0c00187.

FT-Analysis becomes more Productive, Precise and Intuitive

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

Hybride modeller:

En pragmatisk implementering af Industri 4.0

Ved at kombinere avanceret maskinlæring og traditionel kemisk og biokemisk modellering, kan hybridmodelleringskonceptet være den gamechanger, der er nødvendig for en realiserbar implementering af Industri 4.0.

Af Rasmus Fjordbak Nielsen[1], Nima Nazemzadeh[1], Martin Peter Andersson[2], Krist V. Gernaey[1] og Seyed Soheil Mansouri[1]

[1] Process and Systems Engineering Center, Institut for Kemiteknik, Danmarks Tekniske Universitet

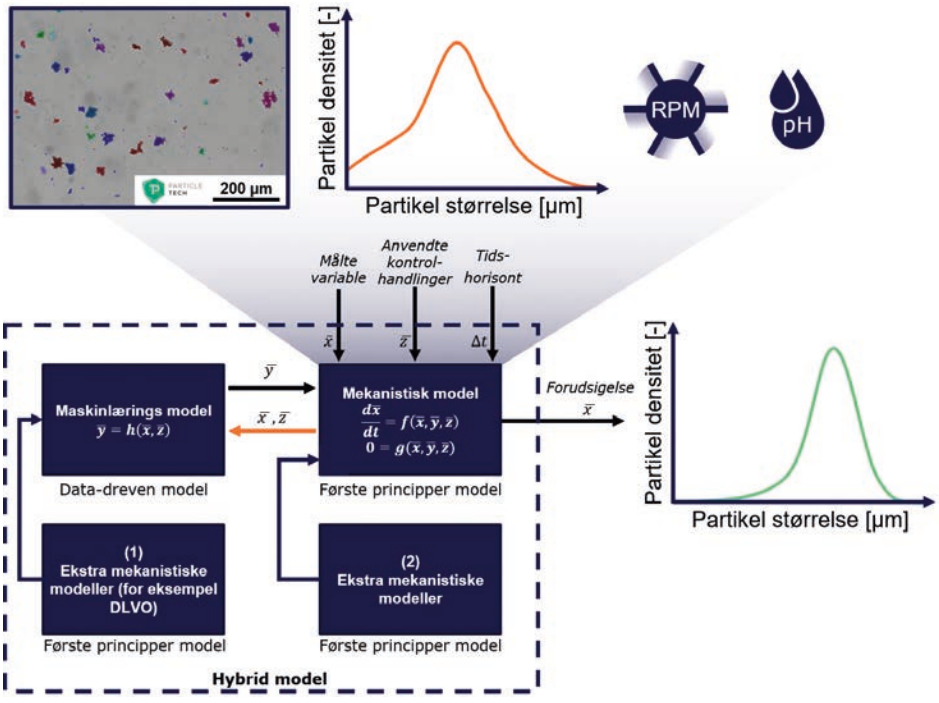
[2] Combustion and Harmful Emission Control Center, Institut for Kemiteknik, Danmarks Tekniske Universitet

Digitalisering af kemiske og biokemiske processer er kommet langt i de sidste to årtier. Mulighederne for systematisk dataindsamling er blevet flere og væsentligt forbedrede. Mange nye måleteknikker er opstået og de eksisterende er blevet væsentligt forbedret samt automatiseret. Som følge af dette er det for en lang række af kemiske og biokemiske processer nu muligt at monitorere både kritiske kvalitetsattributter (CQA) og kritiske procesparametre (CPP), hvilket giver mulighed for nye og forbedrede procesautomatiseringer.

Med den øgede tilgængelighed af data og mangfoldigheden af processensorer er det oplagt at tro, at datadrevet modellering, populært kendt som maskinlæring, er en god måde at udnytte den ekstra information på. Især når man ser på forskellige anvendelser af maskinlæring i dag. Dette kan for eksempel være i selvkørende biler, hvor data kan komme fra flere radarer, lys- og ultralydssensorer og videokameraer. Dette illustrerer rigtig godt, hvordan maskinlæring kan udnytte mange forskellige inputs uden behov for konventionel programmering (svarende til modellering baseret på basale fysiske principper).

I modsætning til mange anvendelser af maskinlæring, kan dataindsamling inden for industrielle rammer dog stadig være forbundet med relativt høje omkostninger, især i den tidlige udvikling af en ny proces. Dette resulterer typisk i færre data, der kan bruges til træning af den datadrevne model og dermed også en lavere pålidelighed af modellen. Desuden ønskes det ofte at have en model, der kan forklare procesdynamikken i stedet for blot at kunne forudsige dem. På den anden side kan en mere pålidelig model, baseret på traditionel modellering, være for dyr og tidskrævende at udlede, da dette let kan kræve en omfattende mængde eksperimentelt arbejde.

Som afvejning mellem de traditionelle modeller, baseret på fysiske og kemiske principper og modeller, baseret



Figur 1. Hybrid modelstruktur.

udelukkende på data, findes konceptet kaldet hybridmodellering. Denne metode udnytter det bedste fra begge verdener, herunder fleksibiliteten i maskinlæringsmodeller samt udnyttelsen af eksisterende procesviden i form af traditionelle matematiske modeller. Dette giver en mere robust model sammenlignet med en fuldt ud datadrevet model og er samtidigt et mere pragmatisk valg sammenlignet med modeller baseret udelukkende på traditionel modellering.

Denne type af modellering er i øjeblikket et forskningsfokus på Institut for Kemiteknik på DTU. Mange forskellige kemiske og biokemiske processer modelleres her i øjeblikket ved hjælp af hybride modeller, herunder fermentering, kromatografi, krystallisation og flokkuleringsprocesser.

Det kendte og det ukendte: et eksempel på hybridmodellering

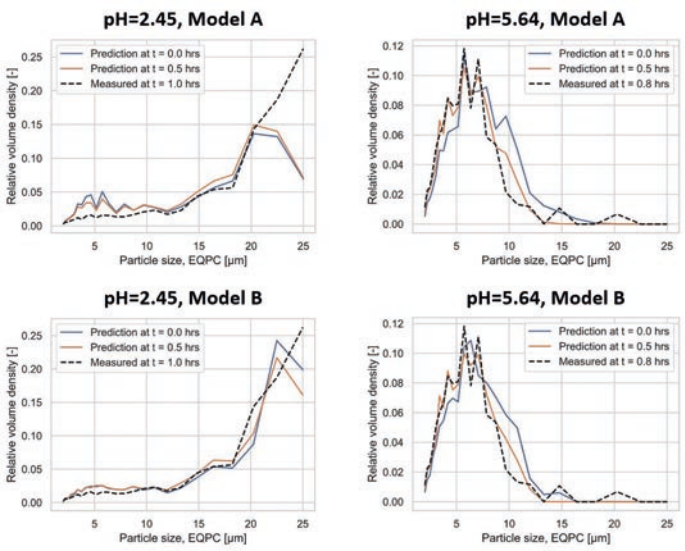
En af de processer, der for tiden bliver undersøgt ved hjælp af hybridmodelleringsmetoden, er flokkulerings-processen, som traditionelt har været svær at modellere. Dette bliver udført i samarbejde med Novozymes og en dansk producent af analyseinstrumenter til online og at-line partikelanalyse, ParticleTech ApS. I disse studier er en laboratorie-flokkulering af silica-partikler i vand blandt andet blevet undersøgt, hvor målet er at forudsige partikelstørrelsesfordelingen i slutningen af en batchoperation.

For en række batchoperationer blev partikelstørrelsesfordelingen målt løbende ved at tage billeder af silica-partiklerne i den vandige suspension. Dette blev gjort ved hjælp af en avanceret billedanalysesensor, udviklet af BioSense Solutions ApS. Billederne blev efterfølgende segmenteret, og partikelstørrelser blev ekstraheret ved hjælp af ParticleTech Analyzer-softwaren (udviklet af ParticleTech ApS). Desuden blev pH og omrøringshastigheden målt.

For denne proces fortæller vores forudgående viden os, at de dominerende fænomener er agglomerering og brud af partikler. Det er desuden muligt at opsætte en massebalance, som kobler disse fænomener sammen. Massebalancen ved agglomerering og brud udgør vores mekanistiske model. De kinetiske hastighedsudtryk for agglomerering og brud er derimod ukendte, og skal dermed bestemmes ved hjælp af den datadrevne model. Med denne struktur vil det desuden være muligt at tilføje mere procesviden til modellen, enten som yderligere input til den datadrevne model eller som direkte input til den mekanistiske model.

Til at modellere agglomerationshastigheden, brudhastigheden og datterpartikel-størrelsesfordelingen (på grund af brud af partikler) blev der anvendt et dybt neuralt netværk. Inputtet til det neurale netværk var her alle de målte procesvariable. Denne model viste sig at være i stand til at forudsige systemets adfærd til en vis grad, se model A i figur 2 [1]. Ikke desto mindre syntes det, at i tilfælde af lavere pH ville den hybride model have vanskeligheder med at forudsige agglomerationshastigheden nøjagtigt.

Dette blev forbedret ved at tilføje mere viden, baseret på yderligere fysisk forståelse til den hybride model [2]. Det vides nemlig, at silica har tendens til at aggregere ved lavere pH-værdier (pH <3), da tiltrækningskræfterne overvinder de frastødende kræfter blandt molekylerne. For højere pH kan de ikke overvinde de frastødende kræfter, og sandsynligheden for at partiklerne vil skabe aggregater, bliver dermed meget lille. Ved at beregne kollisionseffektiviteten ved hjælp af Derjaguin, Landau, Vervey og Overbeek-teorien (DLVO), der tager højde for tiltrækning og frastødning af partikler, og tilføje dette som input til maskinlæringsmodellen, kunne man yderligere forbedre forudsigelsen, se model B i figur 2.



Figur 2. Forudsigelser af den endelige størrelsesfordeling af partikler for to forskellige pH-værdier, ved brug af simpel hybridmodel (A) og den udvidede hybride model, inklusiv DLVO-model (B).

Dette illustrerer rigtig fint, hvor let maskinlæringsmodellen kan tilpasses til flere inputs (både sensordata og/eller forudsigelser baseret på yderligere fysisk/kemisk baserede modeller) og derved agere som en lim mellem traditionelle modeller og danne en hybrid model, som på en effektiv måde kan kombinere klassisk viden med de store mængder data, der bliver genereret i industrien.

Hybride modellers rolle i Industri 4.0

Med en hybrid procesmodel er der mange proces-udviklings- og driftsopgaver, der kan blive gjort lettere. Frem for alt kan den tidlige udvikling og design af en ny proces have meget gavn af en fleksibel procesmodel. I denne fase kan forståelsen af procesdynamikken være meget begrænset, hvilket betyder, at en traditionel kemisk-fysisk model ikke er let tilgængelig. Da hybride modeller er meget mere fleksible, kan denne type model anvendes selv med mindre procesforståelse og derefter forbedres gradvist, når flere og flere data indsamles, og der opnås en bedre procesforståelse. Dette giver mulighed for at designe eksperimenter baseret på en model (kendt som modelbaseret design af eksperimenter). Dette resulterer i, at procesdynamikken og de optimale procesbetingelser kan bestemmes hurtigere og det ved brug af færre eksperimenter.

Desuden kan den hybride model gradvist forbedres i løbet af processens levetid ved at træne modellen med operationelle data. Dette resulterer i den såkaldte digitale tvilling, som kan

bruges til at give procesoperatøren forudsigelser af procesresultatet i realtid og muliggøre afbødning af potentielle procesforstyrrelser. Endelig kan en hybridmodel væsentligt lette implementeringen af realtidsoptimering og/eller komplekse kontrolstrategier, såsom modelbaseret proceskontrol [3]. Disse metoder giver blandt andet mulighed for en forbedret kontrol af de kritiske kvalitetsattributter, men giver også mulighed for let at tilpasse sig skiftende produktkrav.

Alt i alt har hybridmodellering et stort potentiale til at reducere tiden brugt på udvikling af en nøjagtig og fungerende matematisk model, der skal bruges i industriel produktion, herunder i den indledende procesudvikling, til procesovervågning og proceskontrol.

Anerkendelser
Forfatterne af denne artikel vil gerne takke alle de involverede industrielle og akademiske partnere i udviklingen af de præsenterede værktøjer. Ydermere vil vi gerne udtrykke en stor tak for den økonomiske støtte til dette projekt fra Greater Copenhagen Food Innovation-projektet (CPH-Food), Novozymes, EU's regionale fond (BIOPRO-SMV-projektet) og fra Innovationsfonden Danmark gennem det strategiske forskningscenter BIOPRO2 (Sags nr. 4105-00020B).

E-mail:
Rasmus Fjordbak Nielsen:
rfjoni@kt.dtu.dk

Referencer:
1. R.F. Nielsen, N. Nazemzadeh, L.W. Sillesen, M.P. Andersson, K. V Gernaey, S.S. Mansouri, Hybrid machine learning assisted modelling framework for particle processes, Comput. Chem. Eng. 140 (2020).
2. N. Nazemzadeh, L.W. Sillesen, R.F. Nielsen, M.N. Jones, K. V. Gernaey, M.P. Andersson, S.S. Mansouri, Integration of Computational Chemistry and Artificial Intelligence for Multi-scale Modeling of Bioprocesses, Comput. Aided Chem. Eng. 48 (2020) 295-300.
3. F. Nielsen, Rasmus, K. V. Gernaey, S.S. Mansouri, A hybrid model predictive control strategy using neural network based soft sensors for particle processes, Comput. Aided Chem. Eng. 48 (2020) 1177-1182.

Grønt med umami og velsmag

Klavs Styrbæk og Ole G. Mouritsen:
Grønt med umami og velsmag
Gyldendal 2020

Vi er fra naturens side udstyret med et smagsapparat, der er indrettet til de søde frugter og det tilberedte kød, herunder fisk og skaldyr. Vi kan ikke leve af "raw food" som andre primater, da vores tarmsystem er for kort og vores tyggemuskler for svage. Samtidig er vi blevet så mange mennesker på jorden, at vi ikke kan fortsætte med at fælde skov, opdrætte kvæg og tømme havets ressourcer på den måde, vi har gjort det i historisk tid, og specielt i de sidste to-tre hundrede år. Vi skal lære at spise mere grønt, og det skal vi gøre ved at bruge videnskaben og kogekunsten til at skabe velsmag i det grønne køkken. Det er vist essensen af Styrbæk & Mouritsens nye bog fra 2020. De to forfattere står bag flere kogebøger om umami og japansk kogekunst; Styrbæk som den kompetente kok, produktudvikler og underviser, og Mouritsen som professor i gastrofysik og kulinarisk fødevareinnovation, leder af "Smag for Livet" og præsident for Det Danske Gastronomiske Akademi.

Med grønt mener forfatterne både plante-, tang- og svamperiget, men det er ikke en vegetar- eller veganerkogebog: Der indgår både fiskeprodukter i tilsmagningen og mejeriprodukter i nogle af opskrifterne. Bogen er et forsøg på at gøre det grønne mere spiseligt gennem udvikling af tekstur, umami og kokumi-smag i grønne tilberedninger. (Se DK2020(8) for en introduktion til umami).

Bogen bringer således 120 sider med eksempler på grønne opskrifter, suppleret med 11 sider om de grønne råvarer og deres smag, som de indgår i opskrifterne, samt 22 sider om "smagshylden": Specielle råvarer og produkter, der kan hjælpe med at give smag og tekstur til det grønne.

Jeg vil ikke kalde det en kogebog, for der er 342 sider i alt, så halvdelen af bogen er fyldt med videnskabelige forklaringer og udredninger omkring smag og ernæring, eksemplificeret med grønne retter fra den store verden - ikke mindst det japanske køkken, som står forfatterne nær; men også Middelhavslandene er med. Svampe, fermentering og brug af tang er gennemgående temaer for udvikling af umami og tekstur i grønsagsretterne.

"Smagshylden" er spændende læsning til inspiration, men måske også en af bogens svagheder. For det første er der utrolig mange japanske ord i bogen som helhed og japanske specialiteter på smagshylden, som enten er omtrent umulige at skaffe, eller meget dyre. For det andet er det svært, eller omtrent umuligt, at lave mange af smagselementerne selv - man er henvist til at købe industrielle færdigvarer. For eksempel dashi, en japansk bouillon lavet på gæret konbutang (importeret fra Japan) og katsuobushi (bonitofiskeflager (bonito er en art af tunfisk, som koges, fermenteres, tørres, røges og rives)). Det kan købes, men det koster kassen.

Danske tangprodukter er tilgængelige i hvert fald på nettet, og produkter med dansk tang er under stadig udvikling. Havtang bør dog være et tilbehør til et måltid og ikke en hovedingrediens på grund af tangs indhold af jod, salt og andre mineraler, se DK 2018(1). Det undrer mig så i øvrigt, at gelatine ikke er med på smagshylden. Det laves af animalsk collagen, og det kan næppe erstattes af nogen anden smagsgiver. Det kan i hvert fald ikke laves vegetabilsk eller vegansk.

Når det er sagt, er der også mange let-tilgængelige produkter på smagshylden og inspirerende opskrifter, der er lette selv at lave med råvarer og produkter, der findes i almindelige danske butikker. Supermarkederne skal dog stramme op, hvis "smagshylden" skal udbredes til en større kreds af danske forbrugere.

Jens Folke, lean6sigma.eu

To søfolk omkommer af kulilteforgiftning fra træpiller

Friskt producerede træpiller er kemisk reaktive og kan reagere med luftens ilt. Ved oxidationen frigiver pillerne giftig CO-gas, som kan akkumulere til farlige koncentrationer.
Der kan derved opstå iltmangel og farlige CO-koncentrationer i rum med begrænset ventilation.

Af Frank Huess Hedlund

Biomasse (herunder træpiller) spiller en stor rolle i dansk klimapolitik, da det er besluttet fra politisk hold, at den dannede ▶

Serie om ulykker med farlige stoffer

Der er foregået en del ulykker i Danmark. Men der er ikke tradition for efterforskning og systematisk vidensdeling. Med ganske få undtagelser er dyrt høstede erfaringer i fare for at blive glemt.

Santayana har sagt, at de, der ikke kender historien, er dømt til at gentage den.

Artiklen er nummer 15 i en serie, som vil råde bod på denne sorte plet ved at beskrive tidligere hændelser udvalgt for deres læringspotentiale.

kuldioxid, når biomassen brændes, ikke skal tælles med i regnskabet over den nationale udledning af klimagasser. Der er tale om enorme mængder. En enkelt blok på et kraftværk kan nemt forbruge en halv million tons brændsel om året. Da den danske egenproduktion er ubetydelig i denne sammenhæng, importeres der store mængder træpiller fra blandt andet Baltikum, Rusland og Nordamerika.

Denne artikel beskriver en dødsulykke ombord på et skib, der fragtede træpiller fra Riga, Letland til Amagerværket (Vattenfall) i København, fordi lasten udviklede giftig kulilte.

Træpillers farlige egenskaber

Træpiller fremstilles ved først at knuse neddelt træ til et fint pulver, som derefter presses til aflange piller, typisk 8 mm i diameter, som afskæres i længder på cirka 20 mm.

Fremstillingsprocessen kan forklare, hvorfor træpillerne har en række farlige egenskaber. Da pillerne består af sammenpresset træmel, frigives der fint støv, hvis pillen går i stykker, eksempelvis ved håndtering i transportsnegle, på transportbånd, i kopelevatorer osv. Støvet fjernes ved udsugning og hyppig rengøring, men hvis det får lov til at ansamle sig, eksempelvis på vanskeligt tilgængelige steder, kan det være en kilde til støveksplosion. Støvet kan også sætte sig i lejer, hvor det relativt let kan antændes af friktionsvarme, hvorved ulmende partikler kan føres rundt i transportsystemet og starte brande i lagerområderne. Der er sket alvorlige støveksplosioner i Danmark, som beskrevet i en tidligere artikel i Dansk Kemi [1].

For at få en god mekanisk styrke af træpillerne, fremstilles de af træmel fra forskellige træsorter, således at indholdet af harpikser og fedtsyrer i eksempelvis fyrretræ kan fungere som et naturligt bindemiddel, som stabiliserer den færdige pille. Disse harpikser og fedtsyrer er imidlertid kemisk reaktive og oxiderer langsomt ved kontakt med luft. Ved knusningen af træet ødelægges desuden træets cellevægge, hvorved cytoplasmaet, som indeholder andre kemisk reaktive stoffer, også eksponeres til luftens ilt.

Ved oxideringen frigives lidt reaktionsvarme. For mindre mængder træpiller er det ikke noget problem. Men hvis bunkerne bliver "store", måske i størrelsesordenen 7-10 m, kan reaktionsvarmen ikke komme væk ved almindelig varmeledning. Luftens ilt kan ved diffusion stadig nå ind i bunken. Derved er scenen sat for en langsom temperaturstigning og ultimativt en selvantændelse og en iltfattig glødebrand dybt inde i en stor bunke. Det understreges, at beskrivelsen er stærkt forenklet; fugt og mikrobiologisk aktivitet kan også medføre temperaturstigninger, hvilket kan påvirke, hvornår en bunke er kritisk stor. Men budskabet er, at iltfattige glødebrande udvikler farlige pyrolysegasser, herunder den giftige og eksplosive kulilte. Hvis glødebranden sker i et indelukke, eksempelvis en lagersilo, kan pyrolysegasserne akkumulere til farlige koncentrationer og til sidst forårsage en eksplosion. Dette skete i Norge, som beskrevet i en tidligere artikel i Dansk Kemi [2].

Selvantændelse er et ekstremt resultat af en varmeudvikling, hvor varmen på grund af bunkens størrelse ikke kan komme væk. Men processen med oxidation af kemisk reaktive stoffer betyder, at opbevaring af mindre mængder træpiller i lukkede rum kan medføre, at atmosfæren bliver iltfattig. De kemiske reaktioner medfører også, at der kan dannes en række gasser; metan, kuldioxid, hexanal og kulilte. I rum med begrænset ventilation kan kulilten akkumulere til farlige koncentrationer.

Foto: Shantyman/FleetMon, med tilladelse.

Ulykken skete i forpiggen på fragtskibet Amirante. Forpiggen er et kileformet opbevaringsrum helt fremme i stævnen af skibet.

Relevant for ejere af pillefyr

Der er sket dødsfald i større lagerrum for træpiller til opvarmning af private hjem, hvor der blev målt koncentrationer af CO på flere tusinde ppm, hvilket er umiddelbart dødeligt [3]. Et måleprogram for boliger med pillefyr i det nordøstlige USA konkluderede dog, at de målte CO-koncentrationer oftest var lave, men alligevel udgjorde en bekymring [4]. Sække med træpiller kan også afgive farlige gasser [5].

Personligt ville jeg, hvis jeg altså havde et pillefyr, installere mekanisk ventilation og en CO-alarm i lagerrummet, samt have rummet godt aflåst, så andre (herunder børn) ikke uforvarende kan udsættes for fare.

Farvandet ud for Bornholm, 2009

Tidligt om morgenen den 15. juli 2009 forlod fragtskibet Amirante (IMO 7525334) havnen i Riga, Letland, med en last på 2.500 tons træpiller i bulk. Destinationen var Amagerværket (Vattenfall) i København, som kort forinden havde konverteret en kulfyret blok til biomasse.

Hen ad eftermiddagen arbejdede fire besætningsmedlemmer på dækket med nye trosser til fortøjning. Den slags tovværk kan nemt veje over hundrede kilo, så det er hårdt arbejde. Vejret var overskyet, 17-19°C, lidt finregn og enkelte byger. Lidt over klokken 18 gjorde hovmesteren kaptajnen opmærksom på, at to besætningsmedlemmer ikke var mødt op til spisning i messen, og at ingen vidste, hvor de befandt sig. Efter at have kontrolleret deres kahytter blev en eftersøgning sat i værk, og de blev kort efter lokaliseret nede i forpiggen, hvor de lå på gulvet, tilsyneladende livløse.

Forpiggen er et kileformet eller trekantet lagerrum i skibets stævn. På Amirante var det cirka 5 meter langt, 5 meter bredt på det bredeste sted og cirka 1,5 meter bredt på det smalleste sted. Der var adgang til forpiggen fra dækket via en luge, som normalt stod åben, undtagen når det var dårligt vejr. Fra lugen var der adgang/nedgang via en 18 meter lang stige. Forpiggen blev anvendt til opbevaring af trosser, tømmer, koste og spande.

Kaptajnen begyndte nedstigning til forpiggen, men konstaterede halvvejs nede, at han fik vejrtrækningsbesvær. Han fortsatte imidlertid, og da han nåede helt ned, var hans vejrtrækning så besværet, at han indså, at det var farligt for ham at blive på stedet. Han ruskede kortvarigt i begge besætningsmedlemmer, som havde fråde om munden, men uden resultat og han skyndte sig med besværet vejrtrækning op ad stigen igen. Herefter alarmerede han Lyngby Radio og anmodede om øjeblikkelig lægehjælp. Skibet var på det pågældende tidspunkt i dansk territorialfarvand, cirka 16 kilometer nord for Hammer Odde, Bornholm.

Kaptajnen iværksatte herefter en redningsaktion med den resterende besætning. Da en redningshelikopter satte en læge ombord på skibet en lille time senere, var det lykkedes at få den ene tilskadekomne op. Et eller flere besætningsmedlemmer havde tilsyneladende været nede i skakten og binde reb om de tilskadekomne.

Lægen kunne hurtigt konstatere, at døden var indtrådt på begyndende ligpletter (*livor mortis*) og dødsstivhed (*rigor mortis*). Der var et stort postyr med at få den sidste tilskadekomne op, som på grund af begyndende dødsstivhed hang lidt fast i nogle trin. Men da vedkommende kom op, kunne lægen umiddelbart konstatere, at denne også var død. Lægen vurderede, at døden var indtrådt to til tre timer tidligere. Amirante blev herefter beordret til Rønne Havn for nærmere undersøgelse af omstændighederne, herunder ligsyn og obduktion. Søværnets patruljefartøj Nymfen var i nærheden og eskorterede fragtskibet til Rønne Havn.

Foto: Politiets undersøgelsesrapport.

I forpiggen var der en luge, som førte ind til lastrummet. Lugen var forsynet med tre låsehåndtag, hvoraf kun to var lukkede. CO-gasser fra lasten kunne derfor trænge ind i forpiggen og gøre atmosfæren livsfarlig.

Politiets undersøgelse

Sagen blev oprettet som mistænkeligt dødsfald, og politiet tog imod Amirante, da det anløb Kulkajen den 15. juli 2009 lidt over kl. 23. Der sås umiddelbart ikke noget mistænkeligt eller tegn på vold på nogen af de afdøde. Begge var iført almindeligt arbejdstøj. Den ene afdøde var af russisk nationalitet og havde en kort guldkæde om halsen og blod løbende fra mundvigen. Den anden af hviderussisk nationalitet havde arbejdshandsker på.

Indsatslederen besigtigede forpiggen iført åndedrætsværn. I

forbindelse med redningen var den mekaniske ventilation i forpiggen blevet tændt. Den blev nu slukket, som den havde været det, da de to afdøde gik ned i forpiggen. Målinger en halv time senere viste normal ilt og cirka 100 ppm CO.

Findestedsundersøgelsen viste, at der ved foden af stigen lå to par sko samt en ny pakke cigaretter af mærket Winston. Der var lagt et par briller på noget tømmer. Der var også en luge, som førte ind til lastrummet. Den var forsynet med tre låsehåndtag, hvoraf kun to var lukkede.

Kaptajnen blev afhørt. Han vidste ikke, hvad de to omkomne havde foretaget sig nede i forpiggen. De var begge erfarne søfolk, som flere gange havde haft hyre på Amirante, og de var bekendt med faren ved arbejde i lukkede rum. Ingen på skibet havde været klar over, at de var klatret ned i forpiggen og ingen vidste, hvad deres ærinde havde været dernede. Forpiggen er ikke et rum, man normalt går ned i. Måske havde de været dernede for at finde plads til det gamle tovværk.

Maskinmesteren var ansvarlig for besætningens sikkerhedsbriefing, når de påmønstrede skibet og for at føre logbog. Ved afhøringen fremviste han en mappe med sikkerhedsinstruktioner til politiet, hvoraf det fremgik, at de to afdøde havde modtaget instruktion i sikkert arbejde i lukkede rum den 20. april 2008 og den 8. juli 2008, altså begge for cirka et år siden. Maskinmesteren var selv behørigt førstehjælpsuddannet. Regler om hviletid var overholdt.

Der blev udtaget en prøve af lasten, som blev sendt til analyse hos Kemisk Beredskab, Beredskabsstyrelsen. Der blev påvist >150 ppm CO (øvre måleområde overskredet) over pillerne. Gaskromatografisk undersøgelse påviste en række stoffer, som er typiske for afgasning fra træpiller, herunder acetone, C_5-C_{11} aldehyder, α-pinen, δ-limonen, camphen og myresyre.

Obduktion af de to afdøde viste CO-Hgb niveauer i blodet på 52 procent og 60 procent karakteristisk for dødelig kulilteforgiftning. Tests for cyanid, alkohol og misbrugsstoffer var negative.

Kaptajnen blev afhørt igen om, hvorfor han ved den første afhøring ikke havde oplyst om de efterladte sko og cigaretter i forpiggen. Det havde han ikke bemærket. Måske var skoene faldet af i forbindelse med redningen. Han havde kun hæftet sig ved, at den ene afdøde lå ved foden af stigen, som om han havde forsøgt at klatre op ad den. Den anden lå en meter derfra. Begge havde fråde/skum i mundvigene. Det var alt, hvad han havde nået at se, inden han skyndte sig op, da han selv led af stort vejrtrækningsbesvær. Han mente, at der var noget galt med lasten. Der havde været en underlig lugt på skibet de sidste dage. Denne lugt var ikke normal, når de sejlede med træpiller, hvilket de havde gjort omkring 15 gange tidligere.

Der var kortvarigt tvivl om, hvorvidt nogle røde pletter på noget træværk i forpiggen kunne være blodstænk, men det blev hurtigt afvist.

Skibets Minimum Safe Manning Certificate blev kontrolleret af hensyn til afklaring af, om kravene var opfyldt ved de afdødes fravær. Det var de ikke, og kaptajnen indvilligede i at blive i havn, indtil supplerende mandskab var ankommet.

Ulykken ikke opklaret

Politiets undersøgelse er meget grundig og veldokumenteret og den forekommer at være helt igennem korrekt og professionelt udført. To besætningsmedlemmer bliver fundet døde. Det rubriceres som et mistænkeligt dødsfald. Er der sket en forbrydelse? Er der strafbare handlinger?

Det er der ikke. Der er ikke tegn på vold. Regler om hviletid er overholdt. De nødvendige sikkerhedsinstruktioner er afgivet. Logbøgerne er i orden. De lovpligtige uddannelser og certifikater er i orden. Alle regler er overholdt. Alt tyder på, at det var

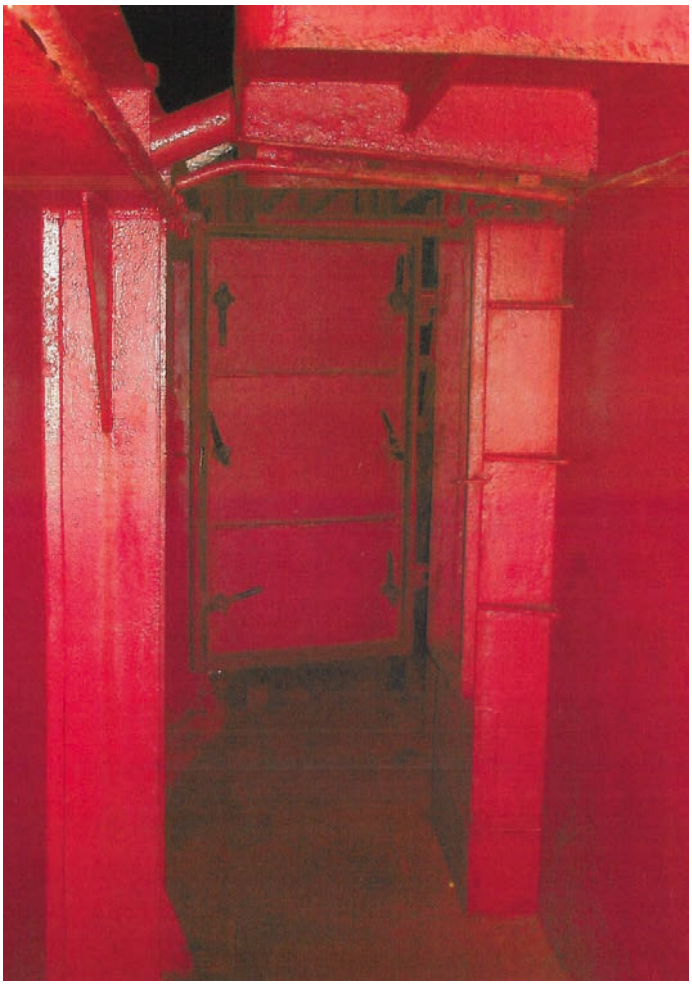


Foto: Politiets undersøgelsesrapport.

Nedgang til forpig fra dækket. Lugen stod altid åben, så besætningen havde ikke grund til at opfatte forpiggen som et "lukket rum", hvor der kunne ansamles farlig gas.

en ulykke. I selvsamme øjeblik dette konstateres, mister politiet interessen og afslutter undersøgelsen.

Men ulykken er bestemt ikke blevet opklaret. Det mest himmelråbende eksempel er, at politiet stiller sig tilfreds med, at de to afdøde havde modtaget instruktion i sikkert arbejde i lukkede rum som forpiggen. Dette helt uden skelen til andre oplysninger om, at lugen ned til forpiggen altid er åben, undtagen når det er dårligt vejr. Hvis lugen altid er åben, kan rummet efter sædvanlig logik næppe uden videre betragtes som "lukket".

I et ulykkesforebyggelsesperspektiv er spørgsmålet derfor: Hvad nytter det at have en instruktion om sikkert arbejde i lukkede rum, hvis ulykkerne sker i rum, som besætningen ikke opfatter som værende lukkede og omfattet af reglerne? [6]. At kaptajnen selv vælger at klatre ned i forpiggen uden sikkerhedsudstyr, er vel det tydeligste eksempel på, at ikke engang han opfattede forpiggen som et lukket rum. Hvis fremtidige lignende ulykker skal forebygges, er dette en meget vigtig konklusion af Amirante-ulykken. Men muligheden forspildes, fordi politiet slet ikke tænker i disse baner og undlader at forholde sig til det.

Hvorfor var atmosfæren i forpiggen farlig? Politiet beskæftiger sig heller ikke med dette spørgsmål, men noterer dog, at en luge i forpiggen mod lastrummet havde tre låsehåndtag, hvoraf kun to var lukkede. Via en utæthed kunne farlige gasser fra lastrummet derfor formentlig trænge ind i forpiggen. Det er et åbent og meget vigtigt spørgsmål, om gasserne ville kunne trænge ind, også selvom alle låsehåndtag havde været lukkede. Men dette spørgsmål stilles heller ikke.

Listen over spildte muligheder fortsætter. Var besætningen klar over, at lasten kunne udvikle farlig gas? Faren var ikke nævnt i cargo manifestet, hvor feltet "dangerous" ikke var udfyldt. I 2009 var der allerede sket flere alvorlige dødsfald i lastrum ved skibstransport af træpiller [7], så måske var denne viden så småt ved at blive spredt i branchen. For det forebyggende arbejde er det et meget vigtigt spørgsmål. Men politiet ser det ikke.

Hvorfor valgte de to omkomne at gå ned i forpiggen? Politiet beskæftiger sig ikke med dette spørgsmål. Men det mest sandsynlige svar er vel, at de ikke havde den fjerneste anelse om faren. De var som sagt beskæftiget med hårdt arbejde med trosser på dækket og det var bygevejr. Er det ikke nærliggende, at de ville gemme sig for kaptajnen og snige sig til en forbudt rygepause?

Vidensdeling? - desværre nej

Hvis man har interesse i ulykkesforebyggelse, så bidrager Amirante-ulykken med to meget vigtige oplysninger, som det ville være kritisk vigtigt omgående at få delt i branchen:

1) At en last af træpiller kan udvikle umiddelbart dødelige koncentrationer af kulilte; og
2) At kulilten kan brede sig til tilstødende rum, som besætningen reelt ingen chance har for at vide, nu udgør en fare for liv og helbred.

Men oplysningerne blev ikke delt. Tværtimod bliver man ledt på fælt vildspor af offentligt tilgængelige oplysninger om ulykken. En rapport fra Dansk Teknologisk Institut [8] og en kort notits i tidsskiftet Brandvæsen [9] oplyser, at de to søfolk på skibet døde, da de gik ned i lastrummet med træpiller. Nej, nej. De gik netop IKKE ned i lastrummet. De gik ned i et tilstødende rum, hvor lugen til det fri tilmed altid stod åben. En artikel af danske forfattere i et anerkendt internationalt tidsskrift oplyser, at de to søfolk døde af iltmangel [10]. Det er heller ikke korrekt. De døde af kulilteforgiftning.

Det er måske i virkeligheden det mest nedtrykkende ved denne ulykke. Der er ingen opklaring og ingen læring. Når oplysningerne ikke bliver delt, så er det forventeligt, at ulykkestypen gentager sig. Det gjorde den så også i denne sag. De følgende år var der to lignende dødsulykker som følge af kulilte på skibe med træpiller i dansk farvand [6].

Hvordan kan dette tab af helt grundlæggende faktuelle informationer ske? Her peger pilen igen på politiet. Fordi ulykken er rubriceret som et mistænkeligt dødsfald, er sagen blevet oprettet som en straffesag. Godt nok er ingen sigtet, ingen er tiltalt og ingen er straffet. Men en straffesag er en straffesag. Så er oplysningerne af hensyn til den straffedes tarv ikke offentligt tilgængelige.

Fordi jeg har en legitim akademisk interesse i sagen (ulykkesforebyggelse) kan ansøgning fra mig om aktindsigt oftest imødekommes. I denne sag fik jeg besked om, at jeg var velkommen på Rønne Politistation, hvor jeg kunne få sagen til gennemsyn. Systemet er dog modtageligt for fornuft, og sagen kunne venligst sendes til Helsingør Politi til mit gennemsyn, hvor jeg heldigvis talte med et særdeles fornuftigt menneske. Men systemet er bevidst designet til at gøre adgang til sagsakterne overordentlig vanskelig, både hvad angår ventetid og praktisk besvær. Så sker informationstabet. Det er derfor fristende at tage den ofte notorisk upræcise mediedækning for gode varer. Her lader det til, at en journalist på Bornholm Tidende ikke har vidst, hvad en forpig var for en størrelse, og har skrevet, at det var et lastrum.

Epilog

Artiklen er skrevet som frivilligt arbejde. Jeg udtaler mig som privatperson, ikke på vegne af mine arbejdsgivere eller andre.

Frank Hedlund (ph.d.) er risikoekspert i Cowi og ekstern lektor på DTU i risk management.

E-mail:
Frank Huess Hedlund: fhhe@cowi.com

Referencer

1. F.H. Hedlund, Støveksplosion ødelægger dansk træpillefabrik - igen, Dansk Kemi. 95 (2014) 14-16.
2. F.H. Hedlund, Kuldioxid er uegnet til kvælning af glødebrande, Dansk Kemi. 99 (2018) 16-19.
3. S. Gauthier, H. Grass, M. Lory, T. Krämer, M. Thali, C. Bartsch, Lethal carbon monoxide poisoning in wood pellet storerooms - two cases and a review of the literature, Ann. Occup. Hyg. 56 (2012) 755-763.
4. A. Rossner, C.E. Jordan, C. Wake, L. Soto-Garcia, Monitoring of carbon monoxide in residences with bulk wood pellet storage in the Northeast United States, J. Air Waste Manag. Assoc. 67 (2017) 1066-1079. doi:10.1080/10962247.2017.1321054.
5. M.A. Rahman, A. Rossner, P.K. Hopke, Carbon Monoxide Off-Gassing From Bags of Wood Pellets, Ann. Work Expo. Heal. 62 (2017) 248-252. doi:10.1093/annweh/wxx104.
6. F.H. Hedlund, Ø.J. Hilduberg, Fatal Accidents During Marine Transport of Wood Pellets Due to Off-gassing - Experiences from Denmark, in: J.S. Tumuluru (Ed.), Biomass Vol. Estim. Valorization Energy, 2017: pp. 73-97. doi:http://dx.doi.org/10.5772/66334.
7. S. Melin, U. Svedberg, J. Samuelsson, Emissions from wood pellets during ocean transportation (EWDOT). Wood Pellet Association of Canada, 2008.
8. W. Stelte, Guideline: Storage and handling of wood pellets. Resultat Kontrakt (RK) report, Danish technological institute, 2012.
9. E. Weinreich, Sverige hårdt ramt. 5 omkomne på 2 år. Træflis og andet træ kan også være farligt, Brandvæsen. 12 (2014) 69.
10. B.K. Sovacool, R. Andersen, S. Sorensen, K. Sorensen, V. Tienda, A. Vainorius, O.M. Schirach, F. Bjørn-Thygesen, Balancing safety with sustainability: assessing the risk of accidents for modern low-carbon energy systems, J. Clean. Prod. 112 (2016) 3952-3965. doi:10.1016/j.jclepro.2015.07.059.

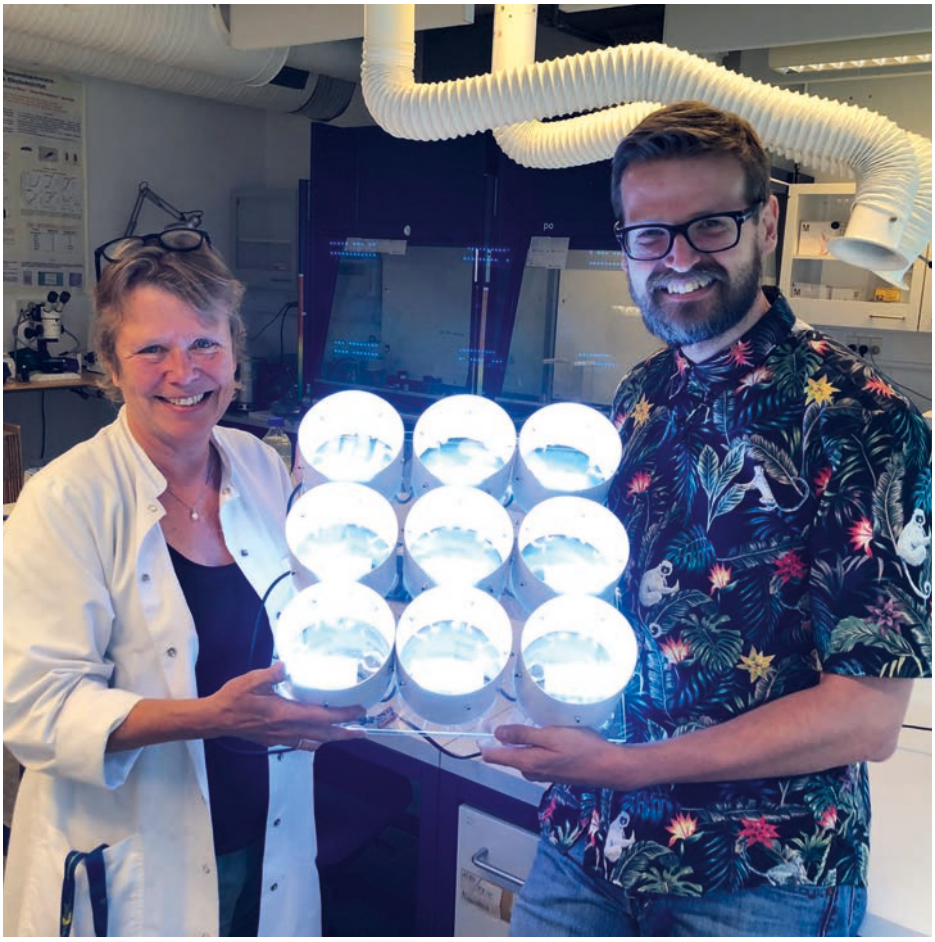
Nyt testprincip udnævnt til Excellent Innovation

Et nyt test-setup til analyse af kemikaliers miljøgiftighed har netop fået udmærkelsen "Excellent Innovation" af EU. DTU Miljø har udviklet det nye udstyr, der både reducerer forbruget af plads, energi og kemikalier.

Inden et kemikalie kan komme på markedet i EU, skal det først gennemgå flere test. En af dem er en øko-toksikologisk analyse på alger, hvor kemikaliets giftighed testes.

Testen udføres typisk ved at hælde kemikaliet i 20 kolber, der placeres på en meterstor plade. Pladen vipper under testen, der varer tre dage at gennemføre. I den periode bliver kolberne belyst med lysstofrør for at sikre den rette lysmængde til optimal vækst af algerne.

- Lysstofrørene skaber til gengæld så meget varme, at det er nødvendigt at nedkøle laboratorierummet for at nå de ønskede 20 grader, som algerne trives bedst ved. Det er meget energikrævende, og vi har derfor gennem flere år snakket om, hvordan man i stedet kunne anvende LED-lys til testen, siger laboratoriefuldmægtig Susanne Kruse. Sammen med forsker Lars M. Skjolding står hun bag den nye opfindelse LEVITATT, LED Vertical Illumination Table for Algal Toxicity Tests.



Lars M. Skjolding og Susanne Kruse i laboratoriet.

Bygget op fra bunden

For et par år siden fik de to kollegaer mulighed for gennem EU-projektet PATROLS at gøre deres idé til virkelighed. De gik derfor i gang med at lede efter de helt rigtige komponenter, som skulle indgå i den nye laboratorieopstilling, der ikke kun er relevant for test af kemikalier, men også anvendes til eksempelvis analyser af nanomaterialer og andre substanser, hvor giftigheden er vanskelig at måle med traditionelle metoder.

- Vi var enige om, at opstillingen skulle være så lille, at den passede ind i et af de klimaskabe, der findes i alle laboratorier. Her er det muligt at regulere temperaturen på en energivenlig måde, ligesom det kræver mindre prøver, og dermed en mindre mængde kemikalie til at gennemføre testen, siger Lars M. Skjolding.

Prøverne skulle belyses nedefra med LED-lys. For at få de små dioder monteret, så de kunne klare vippebevægelserne under analysen, blev en virksomhed hyret til at montere lysene i en ramme.

- Ovenpå rammen placerede vi en række udsavede ventilationsrør, som vi købte i et byggemarked og selv skar op. Inde i dem skruede vi i alt fem metalholdere, som vi kender fra anden anvendelse i laboratoriet. Her bliver de små rør med prøverne placeret, siger Susanne Kruse.

Det tog omkring et halvt år at udvikle det nye test-up. Undervejs var der et par afstikkere til andre løsninger, som dog viste sig ikke at virke og derfor måtte kasseres.

Andre europæiske laboratorier tester

- Vi endte med en opstilling, der virkede, som den skulle. Vi har lavet fire eksemplarer i alt, som i øjeblikket bliver sendt til ringtest på laboratorier i Europa for at validere vores metode. De første tre laboratorier har allerede meldt tilbage, at de har opnået lige så korrekte måleresultater med det nye laboratorie set-up, som vi selv gjorde, siger Lars M. Skjolding.

Ved en konference tidligere på året blev det nye test-setup præsenteret, og blandt andet den store kemivirksomhed BASF viste stor interesse.

- I samarbejde med DTU's patentansvarlige har vi afsøgt mulighederne for patentering og kommercialisering. Det er endt med, at vi ikke vil kommercialisere ideen, men "opskriften" er publiceret, og dermed håber vi, at vores koncept kan blive den nye standard for algetest, siger Lars M. Skjolding.

Smagen af umami med hjælp fra kokumi

– de japanske smage

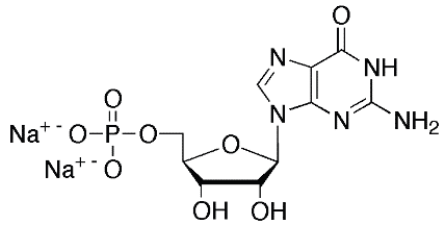
Af Jens Folke, lean6sigma.eu

Smagen af protein i føden er knyttet til de G-protein-koblede receptorer, der er grundstenen i de smagsløg, der er specifikke for forskellige organiske forbindelser, som omtalt i DK 2020(6 & 7). Umami-smag tilskrives et smagsløg, der er specifikt for glutaminat (HOOC-CH_2-CH_2 $CH(NH_2)$-COO^-Na^+), mens kokumi-smag er knyttet til små glutamyl-peptider (for eksempel γ-Glu-Cys-Gly eller γ-Glu-Val-Gly) opstået ved fermentering af proteinholdige fødevarer, for eksempel ost og gærekstrakter (eksempelvis Marmite eller gærflager). Det er kalciumfølsomme receptorer, der registrerer kokumi-smagen, så selv om der er ligheder til umami-glutaminat-receptoren, er der ifølge japanske forskere tale om et andet, altså kalciumafhængigt smagsløg. Som man kan se på navnene, er det i det japanske køkken, at disse proteinsmage i retterne har udviklet sig, og den bevidsthed er først senere kommet til Vesten; eksemplificeret ved makkerparret Mouritsen & Styrbæks bog fra 2011 [1].

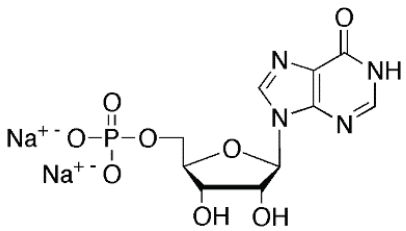
Når jeg taler om "de japanske smage", er det fordi, japanerne var de første, der videnskabeligt identificerede smagene, men det står klart, at vi i det vestlige køkken har haft masser af retter med disse smage. Vi har blot ikke været bevidst om at undersøge, at der faktisk findes specifikke smagsløg, der reagerer på disse smage.

Umami forbindes med tørret kød, visse typer fisk (for eksempel ansjoser), svampe, tang, tomater (ketchup), oste (parmesan), sojasauce, kødekstraker (bovril) og gærekstrakter (Marmite/gærflager) [1,2].

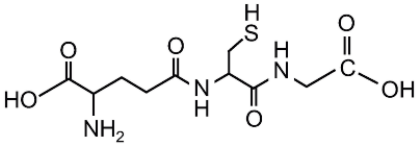
Umami-smagsløgene reagerer på frit glutaminat og frie nukleotider (5'-ribonucleotider (især inosinat, guanylat og adenylat)), altså nedbrydningsprodukter fra ATP. Umami er ikke en smag af proteiner som sådan, ligesom oleogustus ikke er en smag af fedt som sådan. Derfor reagerer vi på forarbejdede fødevarer;



Guanylat



Inosinat



Glutathion

altså kogte, braiserede, stegte, saltede, røgede, lagrede, tørrede eller fermenterede fødeemner. Specielt det fermenterede har fået mange danske kokke, såsom René Redzepi, til at udforske fermenteringsprocesser. Senest har Styrbæk & Mouritsen udgivet to bøger, dels om det japanske køkken, dels om umami i det grønne køkken, der tager japanske/asiatiske fermenteringsprocesser under kærlig behandling til brug i det grønne køkken [3,4]. Fermentering sker både med bakterier og gærsvampe, se DK 2018(4) & 2019(1) for en introduktion til fermentering.

Det er interessant, at det er de tilberedte fødeemner, vi elsker. For det hænger godt sammen med det faktum, at vi som humanoider gennem 1-2 millioner år har behersket kogekunst, herunder ilden til madlavning. Vi har også været i stand til at udnytte knoglemarv fra store dyr, hvis lårben selv hyæner ikke kunne klare at knuse; men det kunne humanoider, for eksempel ved hjælp af flinteredskaber. Vores lyst til umami (og oleogustus (næste nummer af DK)) går altså hånd i hånd med tilberedning af kød, fisk og ▶

Thai Curry på blæksprutte

Ingredienser:

3-400 g blæksprutte-kroppe
30 ml kokosolie
200 g rød Thai-curry pasta
15-20 g Thai karry-pulver
10 g sukker
30 ml fiskesauce
50 ml limesaft og skal
100 ml kokosmælk
250 ml Dashi bouillon (fra 5 g pulver)
Salt
500 g svampe og andre wok-grøntsager, herunder
1 bundt Thai-basilikum

Fremgangsmåde:

1. Skyl blæksprutterne, og skær dem op i siden, så du får et fladt stykke kød; del hvert stykke i 2-3 stykker, og rids halvt ned igennem kødet.
2. Steg blæksprutterne i en godt varm wok med olie i 1 minut, til de folder sig fint sammen; krydr med salt, og tag dem af varmen.
3. Klargør grøntsager; her porre, grønkål, tomat, rød peber, thai-basilikum, korianderblade og svampe; her foranderlig skælhat og kæmpeporesvamp.
4. Rist grøntsager og kæmpeporesvamp i lidt olie i den varme wok og tilsæt rød karrypasta og karrypulver.
5. Tilsæt dernæst sukker, fiskesauce, limesaft og dashi-bouillon og lad det koge op med foranderlig skælhat i 2 minutter.
6. Kom blæksprutterne tilbage i retten, og kog atter op, smag til og tag wokken af varmen.
7. Vend hakkede thai basilikumblade i retten sammen med den svampe-imprægnerede squash.
8. Servér straks med jasmin-ris eller nudler og et drys og korianderblade.

Rød karrypasta:

Ingredienser:

15 g tørre, store, røde thai chilier
20 g skalotteløg
20 g hvidløg
20 g galangal
20 g frisk gurkemeje
4 citrongræs-stængler
50 g limejuice og -skal
15 g koriander-rod
5 g hvide peberkorn
10 g korianderfrø
5 g spidskommen
5 g rejepasta

Fremgangsmåde:

1. Alle ingredienser snittes fint.
2. Tørre krydderier ristes og mortes.
3. Alt blandes i en stor morter og laves til en pasta.

Thai karrypulver:

Ingredienser:

3 g nelliker
2 cm kanelstang
3 g fennikelfrø
2 laurbærblade
3 g spidskommen
3 g gurkemejepulver
3 g rosenpaprika

Fremgangsmåde:

1. De hele krydderier ristes og afkøles.
2. Mortes og mixes med de tørrede krydderier.

skaldyr, dog støttet godt op af forskellige, fermenterede grøntsager, vin og øl. Se DK 2018(6) for en hjemmelavet ketchup.

Umami har en høj grad af selvforstærkende interaktion, når to eller flere umami-ingredienser bruges sammen, for eksempel:

- Tomat, svampe og parmesan
- Makrel i tomat
- Burger med ketchup

Japansk kokumi-forskning har ifølge Mouritsen påvist, at nogle kalciumkanaler i tungens epitel stimuleres af visse tripeptider, for eksempel γ-Glu-Cys-Gly eller endnu mere af γ-Glu-Val-Gly, som fremkommer ved tilberedning af proteiner fra hvidløg, fisk, skaldyr og kød. Fiskesauce, rejepasta, sojasauce, visse svampe, samt vin og øl er eksempler på kokumi, der altså giver retten synergi med umami og kan benyttes til at give smag i det mere kødfattige, grønne køkken. De peptider, der fremkalder kokumi har ringe smag i sig selv, men kan undertrykke bitterhed og forstærke smagen af salt, sødt og umami. Der forskes i, om kokumi-peptider kan erstatte noget af fedtet i suppefonder af kød og grøntsager og i det søde

køkken [4]. Kalvefond indeholder dog gelatine, der kun fås fra collagen (brusk).

På en "Smag-for-livet"-workshop på Odense Universitet for nylig lærte jeg at tørre skiveskåret squash fra 80-90 procent til ≈50 procent vand for derefter at "imprægnere" stykkerne med en umami-marinade. Det skulle prøves af, så jeg brugte stykker af kæmpeporesvamp, som jeg havde fundet i skoven ved roden af bøgetræer/-stubbe, stegt og dernæst kogt i 20 minutter. Den mørke væske herfra blev brugt til imprægneringen af squashen, som så kom i nedenstående wok-ret lige før servering, så squashen kun var lun - fremragende resultat.

Facebook: Køkkenkemisten

Referencer
1. K. Styrbæk & O.G. Mouritsen: Umami. Gourmetaben og den femte smag. Nyt Nordisk Forlag Arnold Busck 2011.
2. J. Youssef: Det molekylære køkken. Nyt Nordisk Forlag Arnold Busck 2013.
3. O.G Mouritsen & K. Styrbæk: Tsukemono. Sprøde grøntsager på japansk. Gyldendal 2017
4. O.G Mouritsen & K. Styrbæk: Grønt med Umami og velsmag. Gyldendal 2020.

HUSK

Dansk Kemi kan også læses online

Få besked hver gang en ny udgave er tilgængelig.

Tilmeld dig på TechMedia.dk

Nyttig viden fra TechMedia

Udvinding af cannabinoider med vakuumteknologi

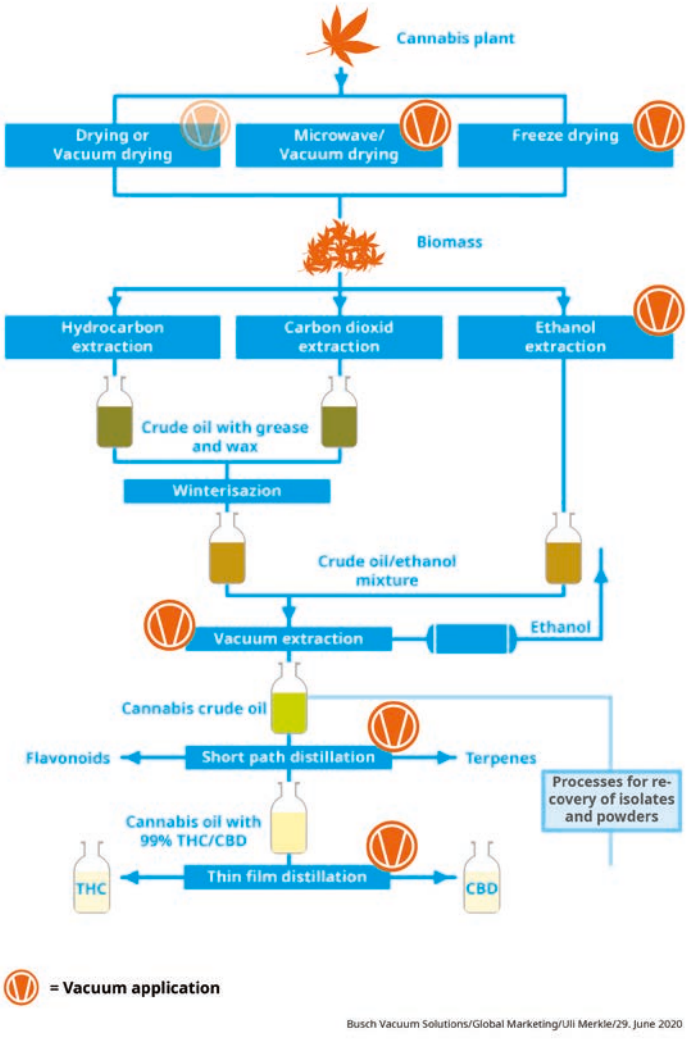
Brugen af vakuum muliggør effektiv fremstilling af rene aktive ingredienser ud fra komponenterne i cannabisplanter.

Af Uli Merkle

Antallet af fabrikker, som bruger cannabis til fremstilling af medicin, stiger enormt, efter at det er frigivet som et middel i mange lande.

Cannabinoider er særlig vigtige til medicinske anvendelser. De primære aktive stoffer cannabidiol (CBD) og tetrahydrocannabinol (THC) er hovedsageligt efterspurgt fra et medicinsk perspektiv.

Vakuumteknologi spiller en vigtig rolle i den industrielle behandling af cannabis for at opnå kvalitets CBD og THC. Det kan bruges til tørring, ekstraktion, fordampning og destillation. Brugen af vakuumteknologi alene muliggør effektiv fremstilling af disse, rene aktive ingredienser ud fra komponenterne i cannabisplanten.



Figur 1. Procestrin for opnåelse af CBD og THC.

De aktive ingredienser

Cannabisplanter består af en række cannabinoider, terpener, flavonoider og andre stoffer. Den psykoaktive cannabinoid THC kan bruges til behandling af allergier, smertebehandling, angst og spiseforstyrrelser eller i kræftbehandling. Cannabinoid CBD fremmer nervesystemets respons, er smertestillende og anti-inflammatorisk. CBD bruges også i mad og kosmetik.

Ud over disse to aktive ingredienser kan andre produkter opnås fra hampeplanten, såsom mættede fedtsyrer, beta-caroten, omega-3 fedtsyrer og vitamin E.

Ekstraktionen af de aktive ingredienser THC og CBD involverer forskellige processer, figur 1. Nogle af dem foregår under vakuum for at muliggøre den mest effektive fremstilling af disse ingredienser.
De enkelte processer beskrives her.

Frysetørring

Frysetørring er meget udbredt inden for industriel tørring af høstede cannabisplanter. Det muliggør hurtig, men alligevel blid, tørring af planter eller plantedele, som består 80 procent af vand. Frysetørring er baseret på den fysiske sublimationsproces (faseovergang fra fast form til gas uden en mellemliggende væskefase). Vand passerer under vakuum direkte fra fast, frossen tilstand til gasform - hvor isen fordamper. Cannabisplanterne, eller deres komponenter, fryses først ved normalt tryk. De udsættes derefter for et vakuum, hvor frossent vand sublimerer fra produktet og således bliver luftformigt. Dette gør det muligt at suge vandet ud som damp uden at opvarme det. Det betyder, at stofferne ikke påvirkes negativt hverken af for høje temperaturer eller af en lang tørreperiode. Den korrekte anvendelse af vakuumteknologi er vigtig for denne tørringsproces. Afhængigt af planten anvendes normalt absolut tryk mellem 0,001 til 0,5 millibar til frysetørring.

En anden tørringsmetode er tørring ved hjælp af mikrobølger. Denne procedure er hurtigere end frysetørring.

Trykniveauet er i et grov vakuumområde fra 10 til 400 mbar.

Udvinding

Under processen udvindes cannabisolie fra de tørrede plantedele - den såkaldte biomasse. Cannabisolie er et ekstrakt fra cannabisplanten, der, uforarbejdet, indeholder en række cannabinoider. De mest ønskede er CBD og THC, som tegner sig for mellem 60 og 80 procent. Desuden indeholder cannabisolie essentielle olier (terpener), flavonoider, lipider, voks og fedt. Sammensætningen af denne rå olie afhænger af selve anlægget eller af de anvendte komponenter, den valgte udvindingsmetode og parametre som temperatur, trykforhold og tid.

Udvinding af kulbrinte og kuldioxid var oprindeligt de mest almindelige metoder til udvinding af olie fra cannabisplanten, og begge ekstraktionsprocesser kræver efterfølgende vinterisering.

Råolie blandes med ethanol, afkøles til -40°C og udsættes for kold filtrering. Dette fjerner voks og fedt fra olien.

Figur 2. To-trins lamelvakuumpumper og scroll vakuumpumper bruges ofte til frysetørring, ethanolekstraktion og tyndfilm destillation i laboratorier og til behandling af mindre mængder.

Udvinding af ethanol

Udvindingen af ethanol er en etableret proces i den industrielle behandling af cannabisplanten. Denne proces kombinerer den høje effektivitet af udvinding af kulbrinte med det høje sikkerhedsniveau ved udvinding af kuldioxid.
Der er heller ikke behov for vinterisering. Da ethanol er et meget effektivt opløsningsmiddel, der også ekstraherer uønskede stoffer fra biomassen. Udføres ekstraktionen med superkølet (kryogen) ethanol og under vakuum ved absolutte tryk på mellem 0,001 til 1 mbar, figur 2, opnås de ønskede egenskaber.

Mellemproduktet af ekstraktionen er altid en blanding af cannabisolie og ethanol.

Vakuumfordampning

Cannabisolie/ethanol-blandingen føres derefter ind i en fordampningsproces for at fjerne ethanolen. På grund af ethanols lave kogepunkt kan dette gøres i laboratoriet i en rotationsfordamper ved stuetemperatur eller ved beskeden varmetilsætning og et grov vakuum på 50 til 100 mbar.

Væskeringsvakuumpumper, der bruger ethanol som driftsvæske, kan bruges til dette. Ethanolen kan gøres flydende igen via en kondensator og føres ind i cyklussen. Til industriel skala kan fordampere med tynd film anvendes til effektivt at fjerne hovedparten af opløsningsmidlet, der producerer råolien, og arbejde på et højere vakuumniveau.

Efter vakuumfordampning opnås råolie med en THC/CBD-koncentration på 60 til 80 procent.

Destillation

Ud over cannabinoiderne indeholder cannabisråolie også terpener som aromatiske olier og flavonoider som bioaktive smagsbærere.

De skal adskilles i en destillationsproces. En af de mest anvendte og mest effektive destillationsprocesser er den såkaldte short path destillation.

Dette indebærer at tage de forskellige kogepunkter i de enkelte oliekomponenter under visse temperaturer og tryk i betragtning ved adskillelsen. Mens THC begynder at fordampe ved et atmosfærisk tryk på 157°C, fordamper CBD ved 160-180°C. Individuelle terpener og flavonoider har lavere kogepunkter. Ved at udføre destillationen under vakuum tillader den reduktion af de temperaturer, der kræves for at koge de forskellige cannabinoider.

Short path destillation fungerer med et vakuumniveau på 0,001 til 1 mbar, figur 3. Olien opvarmes langsomt, og vakuumniveauet justeres, så terpener og flavonoider fordamper selektivt og kan opnås ved kondensering. Hvad der er tilbage som koncentrat, er en væske, der indeholder cannabinoiderne THC og CBD i en renhed på 99 procent.

I et andet destillationstrin adskilles THC fra CBD i en tyndfilmsfordamper. Tyndfilmsfordampere fungerer på samme måde som destillatorer med Short path med vakuum og forskellige temperaturer. I princippet udføres destillation med grov vakuumniveauer på omkring 1 mbar og højere temperaturer.

For at aktivere den psykoaktive effekt af THC skal denne cannabinoid opvarmes til 104°C - en proces kaldet decarboxylering.

Hvis denne temperatur ikke nås under destillation, skal decarboxylering udføres i et mellemliggende trin inden destillation.

I dette sidste procestrin opnås endelig ren CBD og THC, som nu kan behandles yderligere som en aktiv ingrediens til forskellige anvendelser.

Metoderne til at opnå CBD og THC varierer og afhænger ikke mindst af typen af cannabis og den mængde, man bearbejder. Derfor skal den anvendte vakuumteknologi, de tekniske parametre for vakuumpumpen, såsom det opnåelige endelige tryk eller dens pumpehastighed, også tilpasses individuelt til de respektive processer. En kombination af vakuumpumper kan også give både økonomisk og teknisk mening, for eksempel for at fremskynde processer eller for at beskytte varmefølsomme materialer mod for høje temperaturer. Det er derfor vigtigt at konsultere en vakuumspecialist, når der vælges vakuumforsyning.

Tabellen leveret af Busch Vakuumteknik A/S, figur 4, giver et groft skøn over, hvilke vakuumteknologier der kan bruges.

Yderligere information:
Busch Vakuumteknik A/S
E-mail: info@busch.dk

Figur 3. Vakuumsystemer med skruevakuumpumper og vakuumboostere er de ideelle vakuumgeneratorer til mange industrielle processer for ekstraktion af cannabinoider.

Application		Vacuum range	Vacuum technology	
			Laboratory/Small quantities	Industrial production
DRYING	Freeze drying	0.001 - 0.5 mbar	Scroll Two-stage rotary vane	Screw Screw with vacuum booster
	Microwave/ vacuum drying	10 - 400 mbar	Single-stage rotary vane Rotary claw	Single-stage rotary vane Rotary claw
EXTRACTION	Ethanol extraction	0.001 - 1 mbar	Scroll Two-stage rotary vane	Srew Screw with vacuum booster
EVAVORATION	Rotation evaporator	50 - 100 mbar	Liquid ring Single-stage rotary vane	Liquid ring Single-stage rotary vane
	Thin film evaporator	1 mbar	-	Screw Screw with vacuum booster
DISTILLATION	Short path evaporator	0.001 - 1 mbar	Scroll Two-stage rotary vane Two-stage rotary vane with turbomolecular	Screw Screw with vacuum booster
	Thin film evaporator	1 mbar	Scroll Two-stage rotary vane	Screw Screw with vacuum booster

Figur 4. Mulige vakuumteknologier til brug i de forskellige processer.

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

The LUMOS II ...

... is the only fully automated FTIR imaging microscope

- Motorized and fully automated hardware
- Brilliant data in transmission, reflection and ATR
- Intuitive user interface and guided measurements

... is universally applicable

- Particle analysis
- Polymer sciences
- Pharmaceuticals

... makes your daily tasks easier

- Ultrafast focal-plane array (FPA) imaging technology
- Large field of view and sub-micron visual resolution
- Conveniently analyze samples of up to 40 mm in height

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