

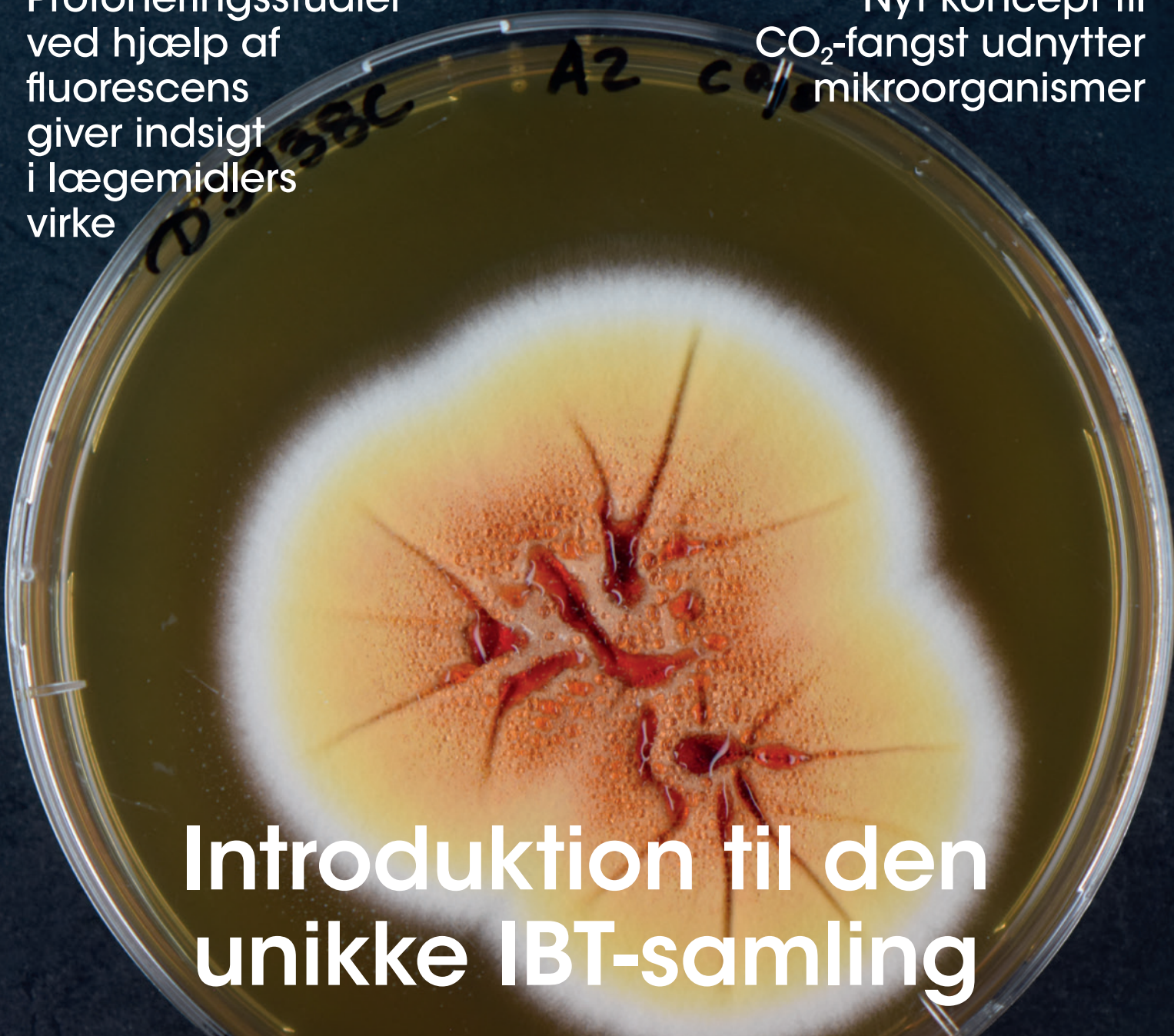
Dansk Kemi

Nummer 2 - April 2025 / 106. årgang

Kemisk Forening - Kemiingeniørgruppen

Protoneringsstudier
ved hjælp af
fluorescens
giver indsigt
i lægemidlers
virke

Nyt koncept til
CO₂-fangst udnytter
mikroorganismer



Introduktion til den
unikke IBT-samling



"Vi er
fusioneret!"

MIKROLAB 
FRISENETTE



RAMAN PROCESS SPECTROSCOPY

Hyperflux™ Pro Plus



Advanced Raman PAT enhances understanding of real-time reaction monitoring, process control and quantitative analysis.

Introducing the HyperFlux™ Pro Plus: an advanced PAT Raman analyzer designed for live chemical analysis and process control with highly interpretable results. Utilizing revolutionary HTVS™ technology, it sets new standards for accuracy, efficiency, and sensitivity, surpassing conventional models. And with Tornado's powerful capabilities - including unmatched reaction monitoring, even at low concentrations, real-time tracking, impurities measurement, and kinetics analysis - it can take your lab or research environment to the next level.

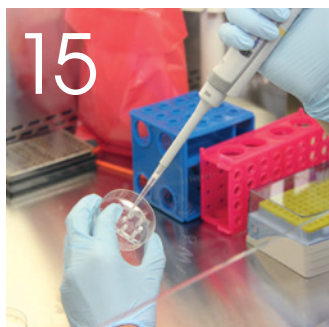
- Rugged small footprint designed for easy installation, ideal for laboratory settings.
- Features a stabilized 785 nm laser with multiple laser safety interlocks and is controlled by a PC running intuitive and easy-to-use SpectralSoft software.
- 10x faster measurements allows you simpler, more cost-effective analytical process monitoring installations
- Enhanced speed, precision, sensitivity and LoD with the innovative HTVS™ technology - all while minimizing laser power usage.
- When used with the OPIS 35™ ATEX Certified Laser Safety Accessory, it can be installed in a controlled environment.
- Large probe variety to accommodate any sample or environment
- 21 CFR Part 11 compliance

For more information please visit
bruker.com/optics • tornado-spectral.com





10



15



24



26

- 1 Forside**
Svampestamme isoleret fra dansk skovjord i december 2024 (Silva Nova-projektet).
Læs mere om IBT-samlingen i artiklen på side 6.
Foto: Kristjana Pavelic.

- 8 Skatten på jordbrugskalk må være en misforståelse!**
Kalk er ikke bare kalk, hvilket bør tages i betragtning ved beskatning.

- 10 Atmosfærisk transport af PFAS til Højarktis**
Der har været stor fokus på lokale PFAS-forureninger, men PFAS-forbindelser transporteres også langt i luften.

- 12 Gamle processer, nye muligheder: Nyt kemisk-biologisk koncept til CO₂-fangst og omdannelse**
CO₂-ædende mikroorganismer kan fange CO₂ direkte fra skorstensrøg og omdanne kulstoffet til grønne molekyler.

- 15 Chemical ionization mass spectrometry in atmospheric studies**
CIMS (chemical ionization mass spectrometry) giver banebrydende muligheder for analyse af atmosfærens kemiske sammensætning.

- 18 Der er brug for lange måleserier af miljøparametre**
Kontinuerlige langtidsmålinger af kemiske, fysiske og biologiske miljøparametre giver vigtig information i forhold til klimaforandringer, men finansiel støtte her til er presset.

- 21 Hvad koster oprensning af beskidt CO₂**
Forskere har regnet på, hvad det koster at oprense CO₂, hvilket giver indblik i kompleksiteten i etableringen af en CO₂ infrastruktur.

- 24 Er kokain protoneret, når det binder til dopamintransporteren?**
I mange lægemidler er en aminogruppe vigtig for binding til et specifikt protein, og protoneringsstudier ved hjælp af fluorescens giver indsigt i bindingsforhold.

- 26 Trinatriumhexafluor... hvad for noget?**
Kommentarer og bemærkninger til *The Red Book*, der i år har 20 år på bagen.

- 28 Bliv fri for begroning: Del II**
Anden del af miniserien om begroning og dets konsekvenser.

- 31 Foreningsnyt**

TechMedia

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

Redaktion:
Professor Hanne Christine Bertram (ansvarshavende)
hcb@techmedia.dk
Professor Søren Kiil
sk@kt.dtu.dk
Ph.d. Kristian B. Krogh
kbb@novozymes.com
Professor Henrik Skov
hsk@envs.au.dk
Maria Bech Poulsen
mabp@envs.au.dk

Ledelse:
Rikke Marott Schelde, CEO

Redaktionskomité:
Professor Anne S. Meyer (formand)
Professor, dr. scient. Mikael Bols
Professor Morten J. Bjerrum
(Kemisk Forening)
Lektor, ph.d. Peter Szabo
(Kemiingeniørgruppen)
Lektor, civilingeniør, ph.d.
Merete Norsker Bergsøe
Vibeke Richter Foërsom
(Næstformand, Kemilærerforeningen)
Chefkonsulent Helle Westphal
Gruppelider, EHS, FMC site Rønland
Inge Margrethe Jensen
Fagkonsulent Mette Malmqvist

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

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

Layout: Trine Plass
Tryk: PE Offset A/S

Oplag: 4.190
Online læsere: 1.279

Abonnement:
Bestilling og ændring/opsigelse
sendes til abonnement@techmedia.dk

Trykt på
miljøvenligt papir
med vegetabiliske
miljøfarver.



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.

Læs bladet online:
www.dansk kemi.dk

Se også: www.kemifokus.dk

Eller find
Dansk Kemi på:



Scan og hent Dansk Kemi
medieinformation 2025 her!
Scan med kameraet
på din smartphone.



Kemi på EU's dagsorden

Når Danmark til sommer overtager EU's formandskab, overtager de samtidig tøjlerne i et af de mest interessante EU-år set med kemibriller. I år forventer vi at se et udspil til revision af EU's kemikalielovgivning, REACH. Kommissionens arbejdsplan varsler nemlig, at kemikalieindustripakken "Chemicals Industry Package" kommer i slutningen af året, og at den rummer en forenkling og modernisering af REACH. Opgaven er lagt i hænderne på de to kommissærer for miljø og industristrategi, der begge har understreget, at lovpakkens moderniseringsambitioner skal ske uden at gå på kompromis med beskyttelsen af menneskers sundhed og miljøet. Det er sunde budskaber for EU's konkurrenceevne som helhed og for danske virksomheder.

Ambitionen er, at den nye lovpakke skal skabe en mere effektiv og sammenhængende lovgivning for kemikalier. Den skal forenkle REACH for importører og producenter, der bruger kemi i deres produkter og skabe klarhed om de kommende PFAS-restriktioner. Fra DI's perspektiv bør Kommissionens forslag kunne svare de følgende spørgsmål, hvis de store ambitioner skal indfris:

- Er de lovgivningsmæssige rammer enklere? Fører de til hurtigere klarhed og forudsigelighed?
- Er den samlede administrative byrde for industrien reduceret?
- Vil det føre til øget konkurrenceevne? Skabes der mere efterspørgsel efter produkter, der overholder kravene?
- Virker det for SMV'er?
- Kan vi sikre håndhævelse af krav til kemi i produkter, så EU's virksomheder ikke udsættes for unfair konkurrence fra producenter udenfor EU?
- Gælder den bebudede forenkling kun myndighederne eller også virksomhederne?

Udover REACH fylder PFAS restriktionsforslaget på kemidagsordenen. Forbud

eller begrænsninger for grupper af ensartede stoffer er en kendt forenkling. Det er en hurtigere måde at vurdere og gennemføre lovgivning om forbud mod en gruppe særligt farlige stoffer i stedet for at vurdere og lovgive for hvert enkelt stof. Men det restriktionsforslag for PFAS, der blev fremlagt i 2023 af fem medlemslande, herunder Danmark, er på mere end 2.000 sider og inkluderer mange tusinde per- og polyfluorede stoffer - fra CFC-gasser til fluorpolymerer. Stoffer med meget forskellige egenskaber og anvendelser. Teknikere og de videnskabelige ekspertkomitéer arbejder på 2. år med den enorme opgave, det er at behandle mere end 5.600 høringssvar. Forenklingen var måske ikke så simpel?

Vigtig viden og nødvendige afhængigheder risikerer at blive overset ved for megen forenkling. Det må være første prioritet at få PFAS ud af forbrugerprodukter. Svaret på at sikre en positiv miljøeffekt og få fart på udviklingen af alternativer og et stærkere indre marked er et EU-initiativ.

I en tid med usikkerhed på verdensmarkederne og behov for fælles styrke må vi sikre os, at de regler, vi har for kemi, rammer, så vi får mest miljø og sikkerhed for pengene" - og at de europæiske virksomheder styrkes. Det bliver spændende at følge arbejdet i EU i den kommende tid. Hvis al den faglighed og indsigt, som kendetegner den danske tilgang, bruges rigtigt, kan det lægge sporene til en kemilovgivning, der er klar til nutiden og fremtidens udfordringer.

Helle Westphal, Dansk Industri

I en tid med usikkerhed på verdensmarkederne og behov for fælles styrke må vi sikre os, at de regler, vi har for kemi, rammer, så vi får mest miljø og sikkerhed for pengene



Savner du også det store overblik?

PFAS

Med Combustion IC (CIC) får du den totale mængde PFAS i dine prøver.

Med mere end 10.000 forskellige PFAS er det vigtigt at få det fulde billede.

Få hurtige og pålidelige resultater - for alle PFAS.

Med CIC efter den nye standardmetode DIN-38409-59 får du:

Selektiv bestemmelse af AOF, AOCl, AOBr og AOI i forskellige vandprøver

AOF som en hurtig, ikke-målet screening for PFAS'er

Effektivt system med meget lidt vedligeholdelse

Let at bruge, robust og pålideligt



IBT-samlingen

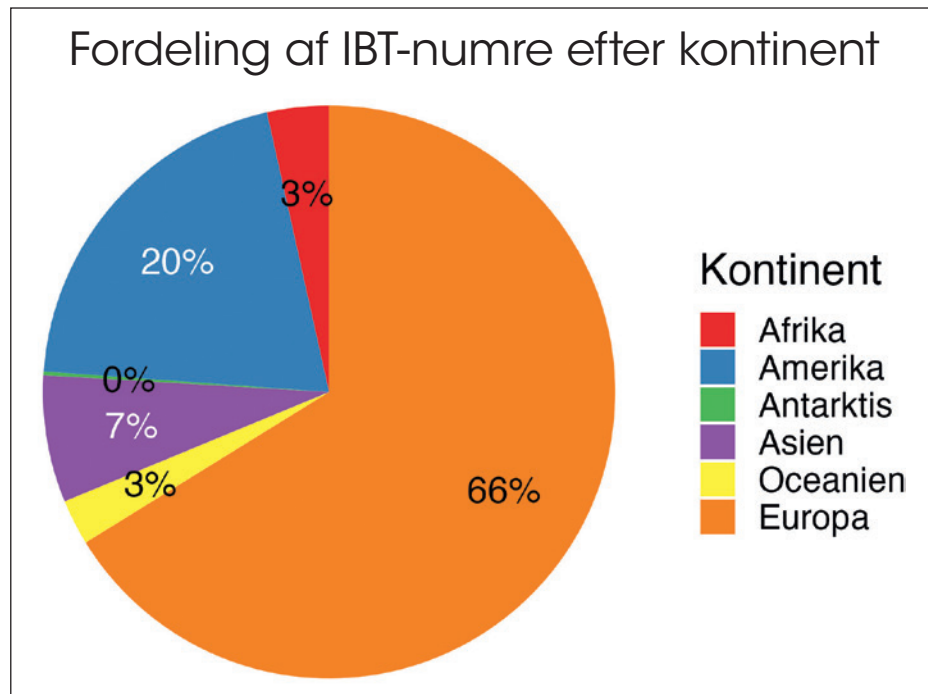
Fra biodiversitet til bæredygtige biologiske løsninger.

Af Søren Dalsgård Petersen, postdoc, og Jakob Blæsbjerg Hoof, lektor og leder af IBT Culture Collection, Institut for Bioteknologi og Biomedicin, DTU Bioengineering

Svampene står i første række, når det kommer til at finde biologiske løsninger på de udfordringer, vi mennesker står overfor, men i særdeleshed også i processer der kan skabe værdi for vores samfund. Den videnskabelige litteratur er spækket med eksempler på svampenes store potentiale og essentielle rolle i spillet med hovedparten af træer og planter. Desværre er der heller ikke i svampenes verden langt fra samarbejde og symbiose til disharmoni og kamp på livet, da nogle svampearter har specialiseret sig i kolonisering af levende systemer med store ulemper eller den ultimative pris som resultatet deraf. Det er præcis forståelsen af denne dobbeltsidighed og hvordan vi skal navigere rundt imellem bioløsninger og sygdomsmekanismer, der gør IBT Culture Collection (IBTCC, IBT-samlingen) mere relevant end nogensinde.

IBT Culture Collections svampestammer

IBT-samlingen hører i dag til gruppen af verdens større samlinger af filamentøse svampe og gær. Siden 1988, hvor IBT-samlingen blev skabt af ansatte på det daværende Institut for Bioteknologi

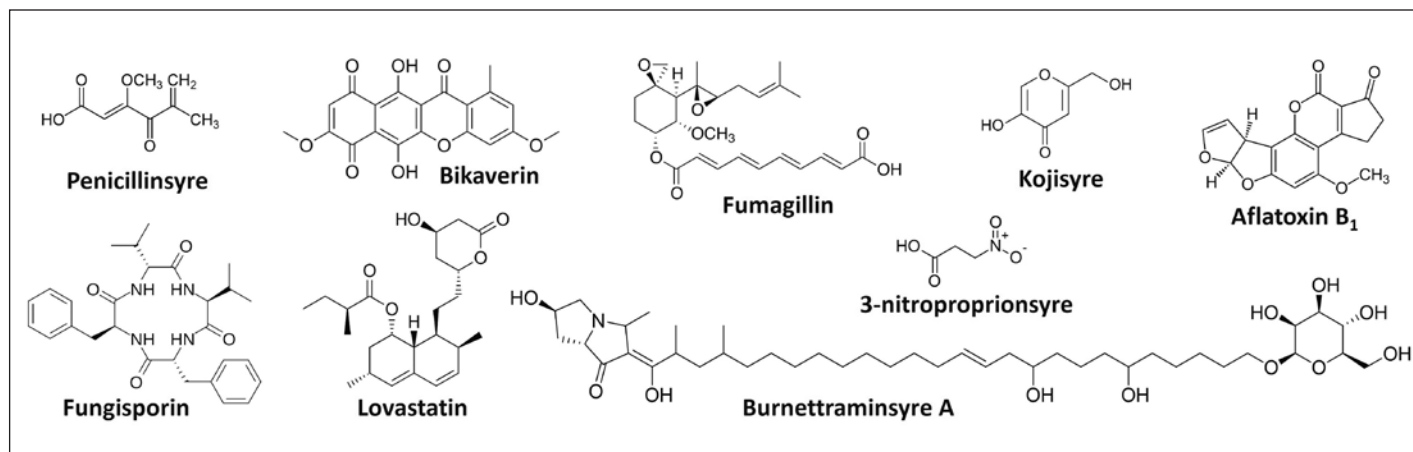


Figur 1. Den relative distribution i procent for IBT-kulturer set over verdensdele primo 2025.

ved Danmarks Tekniske Universitet (DTU) har mykologer, forskere, ansatte og studerende modtaget og indsamlet prøver, samt isoleret svampestammer, fra en bred vifte af habitater verden over (figur 1). IBT-samlingen nærmer i skrivende stund sig de 40.000 isolater fordelt på godt 1.700 svampearter, hvoraf der er flest fra rækken Sæksvampe (Ascomycota). I modsætning til

en del andre svampesamlinger, der ofte fokuserer på størst mulig taksonomisk bredde, så prioriterer IBT-samlingen også dybden inden for arten, hvor det er muligt.

Det betyder, at vi ikke blot dokumenterer forskelle mellem arter, men også variationer inden for samme art. Individet inden for samme art har netop vist sig at variere meget i produktion



Figur 2. Svampe kemi. Nogle få eksempler på den diverse kemi fra svampe. Et stof som burnettraminsyre A er sandsynligvis kun produceret af en til få arter inden for en slægt, hvorimod penicillinsyre og fungisporin kan produceres af et bredere udvalg af arter endda i mindst to forskellige slægter. Aflatoxin B₁ regnes i øvrigt for det mest potente karcinogene biologiske stof og bliver produceret af flere arter i Sektion Flavi i slægten *Aspergillus*, og hører til en gruppe af, indtil videre, ni regulerede mykotoksiner. Strukturer er alle fra Wikipedia undtagen Burnettraminsyre A strukturen, der er fra DTU Bioengineerings strukturdatabase.

Penicillium														
Svamp, opr. navn og nr.	Diameter		YES	OAT	IBT	IBT	IBT	IBT	IBT	IBT	IBT	IBT	IBT	IBT
	CYA	MEA												
1. <i>Penicillium</i> nr. 1	12	9	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14
2. <i>Penicillium</i> nr. 2	12	9	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14
3. <i>Penicillium</i> nr. 3	12	9	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14
4. <i>Penicillium</i> nr. 4	12	9	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14
5. <i>Penicillium</i> nr. 5	12	9	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14
6. <i>Penicillium</i> nr. 6	12	9	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14
7. <i>Penicillium</i> nr. 7	12	9	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14
8. <i>Penicillium</i> nr. 8	12	9	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14
9. <i>Penicillium</i> nr. 9	12	9	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14
10. <i>Penicillium</i> nr. 10	12	9	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14
11. <i>Penicillium</i> nr. 11	12	9	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14
12. <i>Penicillium</i> nr. 12	12	9	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14
13. <i>Penicillium</i> nr. 13	12	9	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14
14. <i>Penicillium</i> nr. 14	12	9	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14
15. <i>Penicillium</i> nr. 15	12	9	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14
16. <i>Penicillium</i> nr. 16	12	9	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14
17. <i>Penicillium</i> nr. 17	12	9	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14
18. <i>Penicillium</i> nr. 18	12	9	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14
19. <i>Penicillium</i> nr. 19	12	9	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14
20. <i>Penicillium</i> nr. 20	12	9	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14

Figur 3. Standardiserede fænotype-observationer for kultivering af skimmelsvampe. Et unikt datasæt bestående af tusindvis af håndskrevne dataark med observationer gennem årtier udført af professor Jens Christian Frisvad, der i skrivende stund bliver digitaliseret til søgbare datasæt, der beskriver graden af sporulering, kolonidiameter og farver. Digitaliseringsprocessen blev igangsat under covid-19 epidemien, hvor laboranter ved Sektionen for Syntetisk Biologi begyndte at overføre selve data til regneark.

af forskellige naturstoffer og enzymer, variere i deres evne til at kolonisere planter, eller undertrykke patogener. I hele svamperiget er indtil nu accepteret omkring 160.000 artsnavne, og det anslås, at der muligvis er op til 5 millioner svampearter på Jorden [1], alt efter hvilke kilder der bruges. Langt fra alle er det dog lykkedes at tæmme og dyrke til det fulde potentiale i laboratorierammer.

Forskningen og dataarven

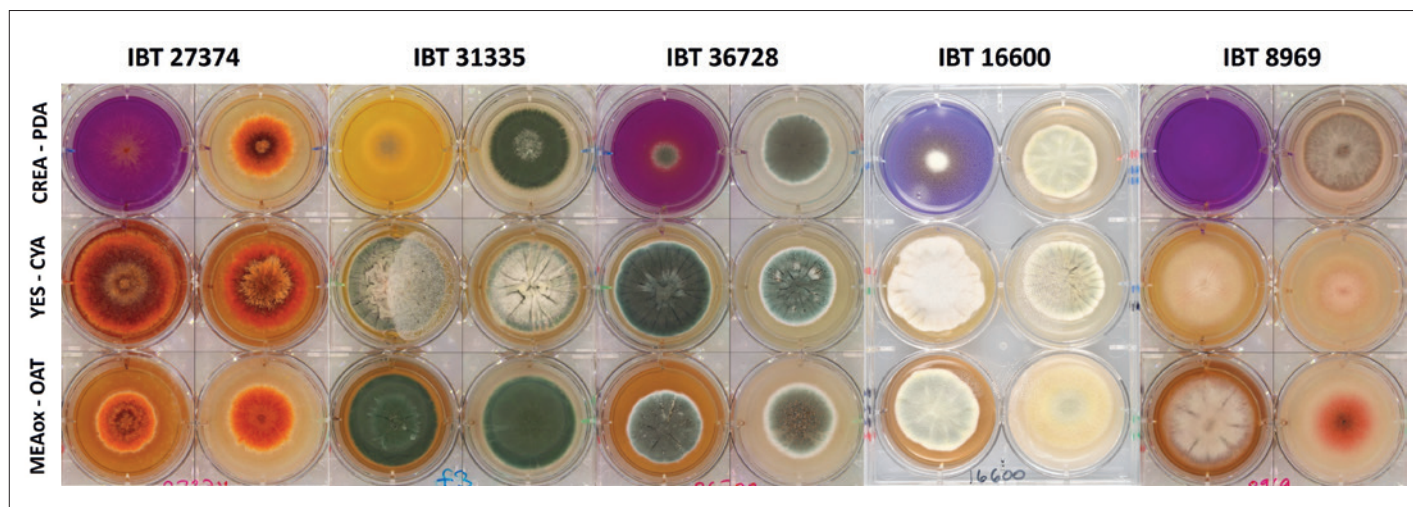
IBT-samlingen er ikke blot et kælders-

arkiv over svampeisolater, men en aktiv ressource for forskning og innovation. Målet er, at hvert isolat skal være ledsaget af detaljerede data om oprindelse, morfologi, fysiologi og metaboliske egenskaber (figur 2), hvilket muliggør målrettet søgning efter svampe med specifikke funktioner - eksempelvis til biologisk bekæmpelse af plantesygdomme eller til valg af stammer til fremtidens fødevarer. Vi er i færd med en systematisk digitalisering, hvilket vil give forskere og virksomheder

adgang og overblik over de omfattende data. Digitaliseringen omfatter blandt andet information om kemisk produktion samt årtiers systematisk dokumentation af blandt andet sporulation og svampevækst i håndskrevne noter (figur 3). Samlingen fik i 2023 sin egen hjemmeside, hvorfra det er muligt at lave søgninger og bestilling af kulturer og services i databasen [2].

Aftrykket på IBT-samlingen har over de snart fire årtier også vist sig at være påvirket af de forskningsaktiviteter, der har fundet sted på DTU-instituttet, som huser samlingen; det nuværende DTU Bioengineering. Samlingen blev etableret for at indsamle, opbevare og analysere svampekulturer inden for primært fødevarer og fødevareresikkerhed i forbindelse med mykotoksiner, samt produktion af biologisk aktive stoffer, for eksempel antibiotika. Siden da er den blevet udvidet til også at omfatte svampe inden for emner såsom indeklima, pigmenter, plantevævsnedbrydende enzymer, biologisk-kontrol organismer og fremtidens fermenterede fødevarer. IBT-samlingen havde desuden en hovedrolle i slægtssekventeringsprojektet for *Aspergillus* [3].

Derudover er IBT-samlingen i færd med at opbygge spændende tematiske delsamlinger, der, udover konkrete forskningsprojekter på instituttet, eksempelvis omfatter mikrosvampe fra jord i danske skove indsamlet i forbindelse med Silva Nova-projektet på Københavns Universitet [4], samt en omfattende DTU Campus Lyngby undersamling bestående af prøver fra 30 hold af ansatte, der deltog i et forhindringsløb.



Figur 4. Vækstforløb på 6-brøndsplader, der viser fem udvalgte svampeisolater på seks forskellige vækstbetingelser. I figuren vises det sidste billede i billedserien, der er taget ved 25°C i syv dage. Vækstmedier er fra venstre top: CREA = creatine sucrose agar, PDA = potato dextrose agar, YES = yeast extract sucrose, CYA = Czapek yeast extract agar, MEAOx = malt extract agar oxoid, OAT = oatmeal agar. På CREA giver syreproduktion en ændring fra lilla til gul. Disse seks vækstmedier er udvalgt som standard, da vi mener, at de kollektivt kan give et stærkt morfologisk vidnesbyrd på en given skimmelsvampeart.

Naturstoffer

Naturstoffer går også under sekundære metabolitter, specialiserede metabolitter. Nogle af de sekundære metabolitter, der produceres af skimmelsvampe, kaldes for mykotoxiner; en kollektiv betegnelse af stoffer, der er giftige for mennesker og andre hvirveldyr. I skrivende stund består listen for overvågede og regulerede mykotoxiner fra European Food Safety Authority (EFSA) af i alt ni toksiner/toksinfamilier: aflatoxiner, ochratoxin A, patulin, deoxynivalenol (DON), fumonisiner, zearalenone, citrinin, ergot alkaloider, T-2/HT-2 toksiner [6]. Denne liste udvides sandsynligvis med tiden, i takt med at data og tests foretages på flere mykotoxiner.

Fremtidens samling bliver mere automatiseret

I de seneste fire år har det ambitiøse forskningsprojekt "Smarter AgroBiological Screening" (SABS) arbejdet for at gøre IBT-samlingen til en avanceret "high-throughput" screeningsplatform. Med en bevilling på 26 millioner kroner fra Innovationsfonden har DTU Bioengineering og agrovirksomheden FMC været forenet i jagten på biologiske løsninger til bekæmpelse af svampesygdomme på hvedeplankulturer. I projektet har DTU's ekspertise inden for mikrobiologi, genetik, metabolomics, automation og kunstig intelligens interageret med FMC's dybe indsigt i plantebeskyttelse for at bane vejen for nye biologiske bekæmpelsesmidler. Dette har resulteret i, at en substantiel del af IBT-samlingen, både i artsdiversitet og isolatvariation inden for arter, er kultiverbare i 96-brønds mikrotiterbakker, hvilket muliggør et automatiseret robot-workflow.

Den kunstige intelligens udnyttes for eksempel også i udviklingen af billedbaseret genkendelse af skimmelsvampe til en mere pålidelig visuel identifikation på artsniveau (figur 4, side 7) [5]. Dette vil kunne medføre betydelige besparelser for kultursamlinger eller andre institutioner, der håndterer et stort antal svampe.

Afsluttende bemærkninger

IBTCC's database er fuldt funktionel, men fortsat under udvikling, og vi arbejder kontinuert på at tilføje mere metadata, overblik over projekter og brugen af stammer i forskning, relevante protokoller, vores aktiviteter, samt styrke synligheden af IBT-samlingens arv med tydelig anerkendelse til de ansatte, der gennem årene har spillet en vigtig rolle i at løfte IBT-samlingen til det niveau, den er på i dag. Og rejsen er kun lige begyndt.

E-mail:

Jakob Blæsbjerg Hoof: jblni@dtu.dk

Referencer

- Li, Y, Steenwyk, JL, Chang, Y, Wang, Y, James, TY, Stajich, JE, Spatafora, JW, Groenewald, M, Dunn, CW, Hittinger, CT, Shen, XX, Rokas, A. 2021. A genome-scale phylogeny of the kingdom Fungi. *Curr Biol* 31: 1653-1665.
- <https://dtu.bio-aware.com/>.
- <https://genome.jgi.doe.gov/portal/Aspwhosequencing/Aspwhosequencing.info.html>.
- <https://ign.ku.dk/english/silvanova/>.
- Mansourvar, M, Charylo, KR, Frandsen, RJN, Brewer, SS, Hoof, JB. 2025. Automated Fungal Identification with Deep Learning on Time-Lapse Images. *Information* 16 (2): 109.
- <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/EN/TXT/?uri=CELEX:02023R0915-20250101>.

Skatten på jordbrugskalk må være en misforståelse!

Som en del af trepartsforliget indgår en skat på den kalk, der køres ud på markerne.

Af Anker Jakobsen, kemiingeniør

Ved undfangelsen af denne skat på den kalk, der køres ud på markerne, er der formodentlig sket en sammenblanding af de forskellige kalktyper. Kalk til mørtel mellem mursten bliver "brændt", opvarmet til små 1.000°C, hvorved kalciumkarbonat (CaCO_3) omdannes til calciumoxid (CaO) og kuldioxid (CO_2), der bortgår. Der er således tale om en energikrævende og CO_2 -emitterende proces. Kalken til jordbrug graves derimod op af jorden og køres direkte på marken, og kræver således kun et minimum af energi. Man kan således forestille sig, at vores gode lovgivere har troet, at "kalk er kalk".

Næste spørgsmål er så imidlertid, om politikerne alligevel har en pointe i relation til det, der sker på marken?

At der jævnligt skal tilføres kalk, er der jo en grund til. Kalken bliver optaget af planterne og indbygget i plantens celler, hvilket man får et klart vidnesbyrd om, hvis man analyserer aske fra for eksempel halm. Og hvordan er det så lige med CO_2 , når planterne optager kalken? Her må I gode kemikolleger hjælpe! En plante kan næppe optage kridt (CaCO_3), som det er, men er afhængig af, at det løbende reagerer med syrer i jorden, så det kan optages som opløselige salte. Er dette korrekt, så vil kalken jo have afgivet noget af sit CO_2 , og er dermed en skurk?

Der er dog et men! Ligesom plantestof afgiver sit kulstof som CO_2 ved forrådnelse eller forbrænding, så vil de samme processer samtidig omdanne Ca i planten til kalk, CaCO_3 , da denne forbindelse er den stabile Ca-forbindelse på jordens overflade. Sørger landmanden for at bringe staldaffald og digstat fra biogasanlæg mv. tilbage på markerne, vil han således kun mangle det kalk, der fjernes fra systemet ved salg af halm til varmeværker (uden returnering af asken), samt den kalk, der er bundet i grisenenes knogler. For alle delene gælder imidlertid, at de et eller andet sted ender som kalk CaCO_3 . Så i relation til atmosfæren og CO_2 -balancen er landbrugskalk en, i CO_2 -mæssig sammenhæng, gratis omgang, hvorfor en særskat savner et naturvidenskabeligt grundlag.

E-mail:

Anker Jakobsen: ajj@c.dk



Foto: Wikimedia

Effektiv og pålidelig

Den alsidige ASM 340 Leak Detector

ASM 340 leverer præcis lækagemåling, hurtig responstid og et brugervenligt design. Den er ideel til applikationer inden for medicinsk teknologi, forskning, coating industrien og kemiske anlæg. Perfekt til nøjagtige lækagetests under selv de mest krævende forhold.



Part of the **BUSCH** GROUP

PFEIFFER 
VACUUM+FAB SOLUTIONS

www.pfeiffer-vacuum.com

Atmosfærisk transport af PFAS til Højarktis

Tilstedeværelsen af PFAS-forbindelser skyldes ikke kun lokale kilder, men de kan langtransporteres i luften til selv meget fjerntliggende arktiske egne.

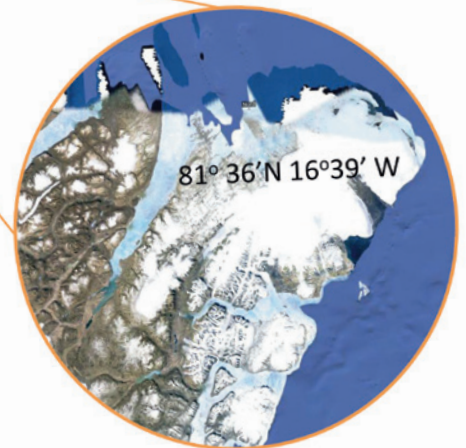
Af Henrik Skov og Rossana Bossi, Institut for Miljøvidenskab, Aarhus Universitet

PFAS står for per- og polyfluoralkylstoffer (engelsk per and polyfluoroalkyl substances). Gruppen indeholder cirka 20.000 forskellige forbindelser, og 15.000 menes at være i brug i dag. Vi har tidligere skrevet om PFAS-målinger på Villum Research Station i Nordgrønland (81°36'N og 16°40' W samt 24 meter over havoverfladen) [1,2], se figur 1.

De seneste år har der været megen fokus på lokal forurening af PFAS fra brandslukningsøvelsesområder og lufthavne her i Danmark, hvor PFAS-forbindelser er blevet anvendt dels til brandslukning og senest ved udslip fra industri, men faktisk er grønlandere, der bor på østkysten af Grønland, den befolkningsgruppe i verden der generelt har de højeste niveauer PFAS i deres blod [3].



Figur 1. Kort over Grønland med placeringen af Villum Research Station på Station Nord.



Derfor er det vigtigt at studere transportvejene af denne gruppe stoffer til Arktis.

PFAS har mange forskellige anvendelser og dermed også egenskaber, men en ting har de til fælles, og det er deres perfluorerede kulstofkæder, der gør dem yderst svære at nedbryde, og de er derfor også kaldt "forever chemicals". For den globale forurening af PFAS er de værste forbindelser dem, der kan langtransporteres (enten i gasfase eller bundet til atmosfæriske partikler), hvorefter de kan deponeres for så at optages i fødekæden efterfulgt af bioakkumulering med en mulig skadelig virkning i dyr og mennesker. I Bossi et al. (2016¹) [1] fortalte vi om målinger af gasformige PFAS-

forbindelser i luft, der er udgangsstoffer for de korresponderende syrer i nedbør efter fotooxidation.

Her vil vi præsentere de første års målinger (2021-juni 2024) af partikelbundne PFAS-forbindelser i luft på Villum Research Station i Nordøst Grønland, se figur 1. Vi har lige afsluttet analyserne af det seneste års opsamlinger. I øjeblikket er vi i gang med tolkning af resultaterne, så her giver vi det første glimt i, hvad data viser.

Metode

Målingerne foretages ved at pumpe udeluft gennem et filter efterfulgt af en cylinder fyldt med en sandwich af polyuretanskum - XAD - polyuretanskum. Partikelbundne PFAS-forbindelser opsamles på partikelfilteret, og gasfaseforbindelser fanges derefter i cylinderen. Der anvendes et opsamlingsflow på 500 L/min. i syv dage svarende til et samlet volumen på 5.040 kubikmeter ved brug af en High Volume Sampler fra Digitel. Prøveluften suges igennem et rustfrit stålør med et specielt hoved, der kun tillader partikler med en diameter mindre end 10 µm (PM₁₀ hoved) at passere.

Filtrene opbevares ved -20 grader, indtil de kan sendes hjem til vores laboratorium i Danmark, hvor de ligeledes opbevares i fryser, indtil de analyseres med væskechromatograf koblet til et massespektrometer. Detaljer om den analytiske procedure inklusive kvali-



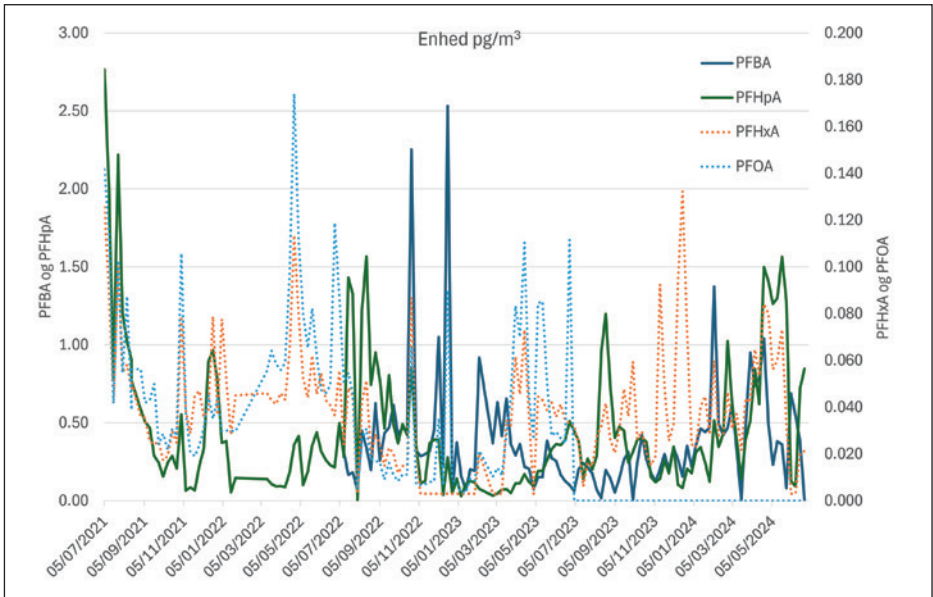
Billede af Villum Research Station.

tetssikring og kvalitetskontrol findes i [4]. Detektionsgrænser er listet i tabel 1 sammen med koncentrationer og spredningen i resultaterne. Vi har analyseret 31 PFAS-forbindelser, hvor 16 var over detektionsgrænsen.

De fire partikelbundne PFAS-forbindelser, der er fundet i de højeste koncentrationer, er PFHpA>PFBA>>PFOA>PFNA og de er vist i figur 2.

Der er stor variation over året i niveauerne. PFHpA har de højeste koncentrationer om sommeren, hvilket kan skyldes, at det er fotokemisk produkt fra 6:2 FTOH (fluortelomer alkohol) [1] og kan kun dannes ved tilstedeværelsen af sollys. PFBA har maksimumkoncentrationer om vinteren til tidligt forår (dog med et par undtagelser), hvilket falder sammen med "Arctic Haze"-perioden, hvor forurening transporteres fra vores breddegrader til Arktis. For PFHxA og PFOA er billedet noget mere broget, med store sæsonvariationer fra år til år. Dette kan måske forklares med de meget lave koncentrationer af disse stoffer og dermed store usikkerheder, der i deres tilfælde er af samme størrelsesorden som målingerne selv.

Tidsserien af disse forbindelser er for korte til at lave tendensanalyser af deres koncentrationer på nuværende tidspunkt.



Figur. 2 Tidsserie af de fire PFAS-forbindelser, der er fundet i højeste koncentrationer; PFBA, PFHpA, PFHxA og PFOA. De to første er afbilledet på venstre akse og de to sidste på højre akse, så der er mere end en faktor 10 forskel på deres niveauer. Vi har kun PFBA data fra 7. maj 2022 og frem.

Konklusion og perspektivering

Vi har målt en række PFAS-forbindelser i atmosfæren, der er kendte for at bioakkumulere og som er fundet i høje niveauer i dyr og mennesker på østkysten af Grønland. Vi fandt lave niveauer. Men disse lave niveauer kan have stor

betydning for deres tilstedeværelse i biota og i mennesker.

Vi vil i den kommende tid sammenligne modelberegninger af PFAS-koncentrationer i luften med vores målte koncentrationer, som vi har gjort tidligere for eksempel kvikksølv. Derefter vil vi beregne nedfaldet af PFAS til hele det arktiske område for at se på de geografiske forskelle og for, om det kan forklare de høje niveauer i dyr og mennesker, man har observeret på østkysten af Grønland og se, hvor stor denne kilde er i sammenligning med en mulig marin transportkilde.

E-mail: Henrik Skov: hsk@envs.au.dk

Referencer

1. Bossi, R og Skov, H. (2016¹) Neutrale organiske per- og polyfluorforbindelser transporteres til Arktisk med luften og afsættes som perfluorocarboxylsyre og perfluorosulfonsyre i sne. Dansk Kemi, 97, nr. 1/2, 2016.

2. Skov, H. Bossi, R. og Vorkamp, K. (2023). PFAS i atmosfæren. Dansk Kemi, 104, nr. 2, p 6-7.

3. Sonne, C.; Desforjes, J. P.; Gustavson, K.; Bossi, R.; Bonefeld-Jorgensen, E. C.; Long, M. H.; Rigét, F. F.; Dietz, R., Assessment of exposure to perfluorinated industrial substances and risk of immune suppression in Greenland and its global context: a mixed-methods study. Lancet Planetary Health 2023, 7 (7), E570-E579.

4. Bossi, R. Vorkamp, K. and Skov, H. (2016²) Concentrations of organochlorine pesticides, polybrominated diphenyl ethers and perfluorinated compounds in the atmosphere of North Greenland. Environmental Pollution, Vol. 217, 4-10. 10.1016/j.envpol.2015.12.026.

Forkortet navn	Fulde navn	Gennemsnits-koncentration pg/m ³	Spredning af data givet som ST.A. pg/m ³	Detektions-grænser pg/m ³
PFBA	Perfluorbutansyre	0.416	0.451	0.014
PFPeA	Perfluorpentansyre	0.032	0.030	0.014
PFBS	Perfluorbutansulfonat	0.013	0.015	0.003
PFHxA	Perfluorhexansyre	0.036	0.026	0.006
PFHpA	Perfluorheptansyre	0.438	0.481	0.006
PFOA	Perfluoroktansyre	0.044	0.035	0.007
PFNA	Perfluornonansyre	0.039	0.039	0.007
PFDA	Perfluordekansyre	0.020	0.016	0.004
PFUnA	Perfluorundekansyre	0.014	0.017	0.001
PFOSA	Perfluoroktansulfonamid	0.012	0.007	0.003
PFDoA	Perfluordodekansyre	0.012	0.009	0.003
PFTTrA	Perfluortridekan syre	0.010	0.014	0.005
PFTeA	Perfluortetradekan syre	0.006	0.006	0.005
HPFO-DA (GEN X)	Ammonium perfluor (2-metyl-3-oxahexanate)	0.011	0.009	0.005
6:2 FTSA	6:2 Fluortelomersulfonsyre	0.006	0.005	0.005
8:2 FTSA	8:2 Fluortelomer sulfonsyre	0.003	0.002	0.005

Tabel 1. Partikelbundne PFAS-forbindelser. Vist er deres forkortede navn, deres fulde navn, deres målte gennemsnit i perioden 2021-juni 2024, standardafvigelse (ST.A.) og detektionsgrænse.

Gamle processer, nye muligheder:

Nyt kemisk-biologisk koncept til CO₂-fangst og omdannelse

Oldgamle CO₂-ædende mikroorganismer kan fange CO₂ direkte fra skorstensrøg og omdanne kulstoffet til grønne molekyler.

Af Mads Ujarak Sieborg¹ og Michael Vedel Wegener Kofoed^{1,2}

¹ Institut for Bio- og Kemiteknologi, Aarhus Universitet

² Novo Nordisk Foundation CO₂ forskningscenter, Aarhus Universitet

Menneskeskabte CO₂-udledninger slår endnu engang rekord-niveauer. Størstedelen af disse udledninger stammer fra for-tyndede røggas punktkilder (se faktaboksen på side 14) fra de mange skorstene, der tårner sig op i landskabet. Denne CO₂ forventer man, i nær fremtid, skal blive en essentiel byggesten for kulstofbaserede molekyler, som kan erstatte det fossile kulstof, der bruges overalt omkring os til for eksempel brændstoffer og materialer. Nuværende metoder til kulstoffangst baseres på kemisk fangst af CO₂. Bred anvendelse af nuværende teknologier er dog udfordret af det høje energiforbrug i form af varme, som kræves for at frigive og koncentrere indfanget CO₂. Og først her, når CO₂'en er koncentreret, kan den sendes til videre raffinering til brugbare grønne molekyler i endnu en energikrævende proces.

Forskere fra Aarhus Universitet har nu udviklet og demonstreret et nyt teknologikoncept navngivet Bio-Integreret Carbon Capture and Utilization (BICCU), hvor man, i stedet for varme, anvender autotrofe mikroorganismer til energieffektivt at frigive CO₂'en fra sorbenterne, og direkte omdanne det til grønne molekyler som eddikesyre og metan ved hjælp af grøn brint.

CO₂ er fremtidens byggesten

- hvis vi effektivt kan fange og omdanne den

Adgang til energi har altid spillet en vigtig rolle i menneskets

CO ₂ punktkilder	CO ₂ -koncentration [vol. %]	Årlige emissioner* [Gt _{CO2}]
Kul kraftværker	12.0 - 15.0	15.27
Oliefyrede kedler	8.0 - 13.0	10.69
Naturgas kraftværker	7.4 - 8.6	7.49
Cementproduktion	11.5 - 33.0	2.52
Stålproduktion	21.3 - 23.0	2.70
Biogas CO ₂	40.0 - 50.0	0.07

* Emissionstal fra 2021.

Tabel 1. Eksempler på nogle af de største nuværende CO₂ punktkilder.

udvikling, og opfindelsen af dampmaskinen under den industrielle revolution i det 18. århundrede markerede en betydelig teknologisk fremgang. Den teknologiske fremgang har dog haft sin pris i form af en enorm afhængighed af fossile brændstoffer som den primære energikilde, og de globale energi- og industrirelaterede CO₂-udledninger nåede som følge heraf rekordhøje niveauer i 2023 på 37,4 Gt_{CO2}, hvilket har medført, at atmosfærens CO₂-koncentration er steget fra 280 ppm (0,028 procent) før den industrielle revolution, til 421 ppm (0,042 procent) i 2023. Et globalt fokus på udfasning af fossile brændstoffer er nu etableret, men der er stadig sektorer, hvor elektrificering er udfordret. For at imødegå denne grønne omstilling, bliver kulstoffangst og udnyttelse (CCU) af CO₂ punktkilder en central strategi til at danne nye grønne molekyler.

Størstedelen af CCU-teknologier er baseret på rene opkoncentrerede CO₂-kilder. Den mest modne teknologi til CO₂-fangst er kemiske skrubbere, hvor kemiske stoffer (sorbenter) reagerer med CO₂'en og binder den i væsken. Den klassiske sorbent til CO₂-fangst er med aminer, hvis nukleofile nitrogenatom kan facilitere forskellige CO₂-fangstmekanismer såsom basekatalyseret hydrering med tertiære aminer (reaktion 1).

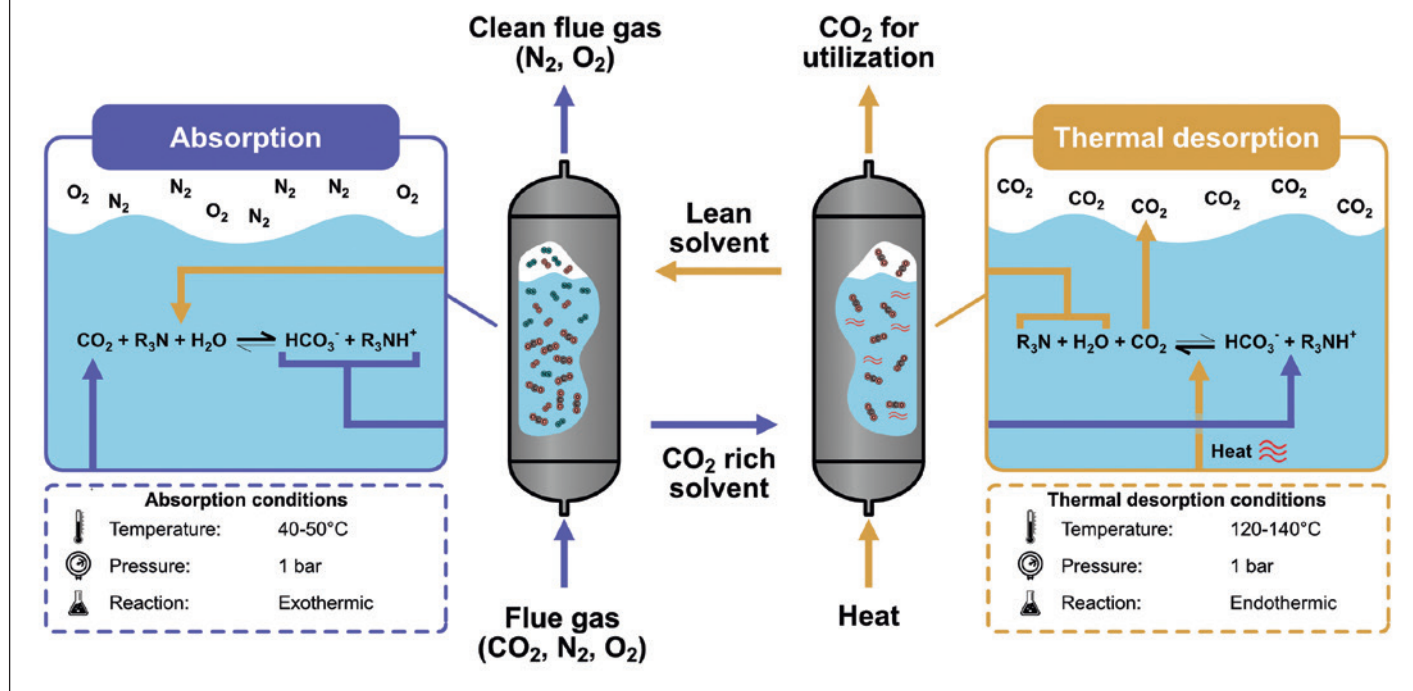


Affiniteten mellem sorbenten og CO₂ er høj. Faktisk så høj, at der skal tilføjes ~3 GJ t⁻¹ CO₂ for at frigøre CO₂'en fra sorbenten, hvilket udgør ~90 procent af energiforbruget i konventionel CO₂-fangst (figur 1). Den frigjorte CO₂ kan herfra omdannes og anvendes som byggesten til grønne kulstofbaserede molekyler. Men CO₂ er et termodynamisk stabilt molekyle med kulstofatomet i sin mest oxiderede form, så hvordan får vi det omdannet?

Mikroorganismer har gennem milliarder af år forfinet deres evne til at anvende CO₂

Visse autotrofe mikrober har gennem milliarder af år specialiseret sig i at syntetisere unikke enzymer, der kan omdanne det termodynamisk stabile CO₂-molekyle som en del af deres energimetabolisme (anaerob respiration). Dette svarer til brugen af ilt i vores egen menneskelige respiration. I modsætning til mennesker, så kan mange mikroorganismer bruge andre stoffer end ilt som oxidanter (elektronacceptorer) (NO₃⁻, Fe³⁺, SO₄²⁻, CO₂) som del af deres respiration. Autotrofe mikrober som metanogener og acetogener, bruger CO₂ i deres respiration (reaktion 2 og 3), mens ilt er giftigt for dem. Disse organismer

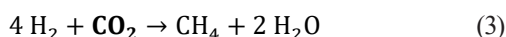
Conventional Carbon Capture



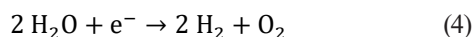
Figur 1. Konventionel kulstoffangst med kemiske sorbenter, hvor man anvender termisk energi til at øge sorbenttemperaturen til 120-140°C for at vende CO₂-bindingen til at frigive CO₂'en fra sorbenterne.

findes naturligt i iltfattige miljøer såsom i marine sedimenter, rismarker og tarmsystemer, hvor der er mangel på andre elektronacceptorer end CO₂.

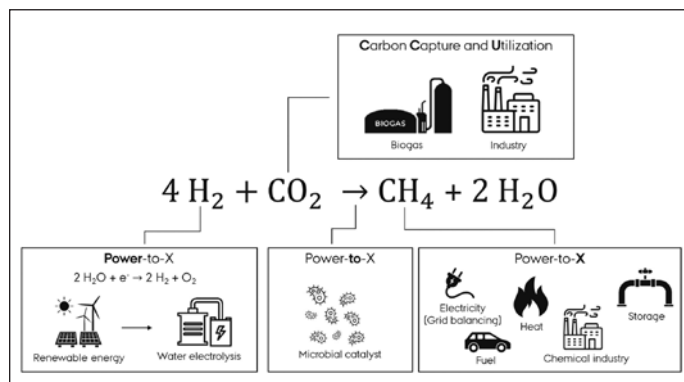
Disse mikrober anvendes allerede aktivt i biogasbranchen, hvor de medvirker til nedbrydningen af organiske stoffer under dannelse af eddikesyre (2) og metan (3). Disse processer udgør i anlæggene en integreret del af biogasproduktionen og produktionen af biometan - et grønt alternativ til fossil naturgas:



Udover deres rolle i biogasproduktion kan processerne også anvendes til omdannelse af CO₂ via tilført brint (H₂). Brinten kan her produceres ved spaltning af vand med elektrolyse drevet af grøn energi (reaktion 4), såkaldt Power-to-X. Mikroorganismerne kan således anvendes til produktion af kemisk energi i grønne molekyler fra grøn strøm. Sådanne processer kan dog også spille en rolle i fangst og omdannelse af CO₂ (CCU):



De mikrobielle processer til omdannelse er ældgamle (3,5 milliarder år), mens ilt først kom til for 2,4 milliarder år siden. Siden da har de levet i anoxiske miljøer, hvor ilt ikke er til stede. For mange af organismene er ilt derfor giftigt. Biometanisering, som er brugen af autotrofe metanogene mikrober til omdannelse af CO₂, er en teknologi, der derfor udelukkende er blevet anvendt til at fange CO₂ fra biogas, da det ikke indeholder O₂. Herudover indeholder biogas en høj CO₂-koncentration (~45 procent) og metan CH₄ (~55 procent), hvilket gør den til et ideelt udgangspunkt for produktionen af metan via tilført brint. CO₂ fra biogas udgør dog kun en minimal andel (<1 procent) af de tilgængelige CO₂-kilder, mens



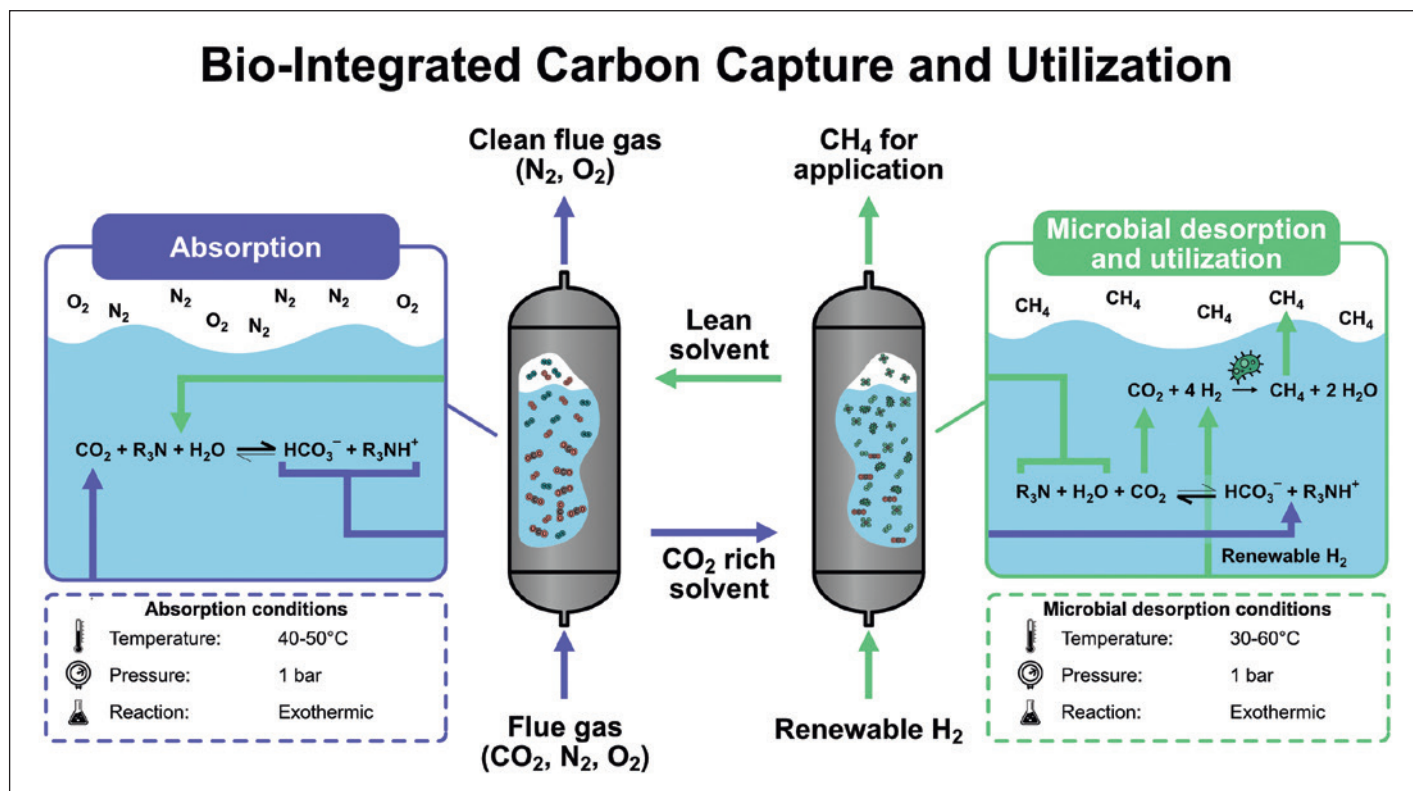
Figur 2. Biometanisering af CO₂ til CH₄ ved brug af grøn H₂ katalyseret af autotrofe metanogene mikroorganismer.

hoveddelen af de menneskeskabte CO₂-udledninger kommer fra røggasser (tabel 1).

I modsætning til biogas, så kan røggas ikke anvendes direkte til produktion af metan eller eddikesyre på grund af dens lave indhold af CO₂ og høje indhold af N₂, O₂ og forskellige urenheder. Der er derfor behov for oprensning af CO₂, hvis vi skal udnytte CO₂ fra røggasser til produktion af brændstoffer og kemikalier.

Bio-integreret kulstoffangst og -udnyttelse (BICCU): En ny biologisk tilgang til CO₂-fangst og omdannelse

Kemisk absorption, den nuværende mest modne CO₂-fangst-teknologi blev udviklet for næsten 100 år siden. Det er dog enormt energi-intensivt at få sorbenterne til at slippe CO₂'en efter fangst med termisk energi (figur 1), hvilket er en stor begrænsning i forhold til dens udbredelse. Forskere på Aarhus Universitet har derfor haft forstørrelsesglasset fremme for at undersøge, om man kan integrere brugen af mikroorganismer



Figur 3. Bio-Integrated Carbon Capture and Utilization (BICCU) er en ny bioteknologisk fremgangsmåde til at omdanne CO_2 fra fortyndede punktkilder ved at kombinere CO_2 -fangst med kemiske sorbenter og biologisk faciliteret CO_2 frigivelse og omdannelse.

med CO_2 -fangst for på den måde at udnytte styrkerne ved at kombinere kemi og bioteknologi, og de har her opdaget, at mikroorganismer kan bruges til at frigøre og omdanne CO_2 direkte fra sorbenterne. Ved at undersøge interaktionerne mellem CO_2 -fangstsorbenter og autotrofe mikroorganismer har de opdaget, at der kan etableres et synergistisk forhold mellem sorbenternes evne til at fange og binde CO_2 og mikrobernes evne til at frigive CO_2 fra sorbenterne og omdanne det til grønne biobaserede produkter.

Ved kontinuerligt at fjerne den lille mængde opløst CO_2 forskydes ligevægten fra HCO_3^- mod CO_2 , og processen foregår derfor med koncentrationsgradienten og kræver langt mindre energi end nuværende konventionelle termiske løsninger (~3.6 GJ $\text{t}^{-1} \text{CO}_2$ reduktion). Teknologikonceptet er blevet navngivet Bio-Integrated Carbon Capture and Utilization (BICCU), da den integrerer biologiske processer og CO_2 -fangst, og således erstatter den termiske CO_2 desorptionsenhed med en bioreaktor. Ved at kombinere frigørelse og omdannelse reduceres både energien til CO_2 -fangst og omdannelse, samt behov og omkostninger til ekstra enheder man normalt anvender til fangst og omdannelse af CO_2 , herunder oplagring og transport af CO_2 'en (figur 3).

Opdagelsen af dette synergistiske forhold mellem kemiske sorbenters evne til at fange og binde CO_2 , og autotrofe mikroorganismer til at frigive og omdanne CO_2 , har dog ikke været

ligetil. Sorbentudviklingen til kulstoffangst startede allerede i 1930'erne, men med et fokus på for eksempel at udvikle kemiske sorbenter, der er termostabile med en minimal flygtighed og reduceret behov for desorptionsvarme. Disse egenskaber har begrænset betydning i BICCU, hvis biomedierede CO_2 -desorption foregår ved lavere temperaturer af 30-60°C. Derimod fandt forskerne, at mange af de konventionelle sorbenter har naturlige antimikrobielle egenskaber, som begrænser brugen af dem i bioreaktorer til BICCU. Derfor arbejder mikrobiologer, procesingeniører og kemikere på Aarhus Universitet nu tæt sammen om forskning og udvikling i grænsefladen mellem kemi og biologi for at udvikle systemer, der kan fange og omdanne CO_2 fra skorstenene til grønne produkter. Med den fortsatte udvikling håber forskerne på at udvikle ny bioteknologi, der kan understøtte udnyttelsen og værdiskabelsen af CO_2 selv fra svært tilgængelige kilder som røggas.

E-mail:

Mads Ujarak Sieborg: Mus@bce.au.dk

Michael Vedel Wegener Kofoed: Mvk@bce.au.dk

Referencer

- M.U. Sieborg, A.K.H. Nielsen, L.D.M. Ottosen, K. Daasbjerg, M.V.W. Kofoed, Bio-integrated carbon capture and utilization: at the interface between capture chemistry and archaeal CO_2 reduction, Nat. Commun. 15 (2024) 7492. <https://doi.org/10.1038/s41467-024-51700-3>.
- M.U. Sieborg, J.M.S. Oliveira, L.D.M. Ottosen, M.V.W. Kofoed, Flue-to-fuel: Bio-integrated carbon capture and utilization of dilute carbon dioxide gas streams to renewable methane, Energy Convers. Manag. 302 (2024) 118090. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2024.118090>.
- A.K.H. Nielsen, L.D.M. Ottosen, M.V.W. Kofoed, Development of membrane bioreactor for conversion of flue Gas- CO_2 to C1 and C2 biomolecules, Chem. Eng. J. 499 (2024) 155780. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2024.155780>.
- J.M.S. Oliveira, L.D.M. Ottosen, M.V.W. Kofoed, Continuous biomethanation of flue gas- CO_2 using bio-integrated carbon capture and utilization, Bioresour. Technol. 399 (2024) 130506. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.biortech.2024.130506>.

CO₂-kilder

Over 99 procent af de industrielle CO_2 punktkilder som for eksempel røggasser består kun af 7-33 procent CO_2 (tabel 1, side 12) i en fortyndet sammensætning af kvælstof (N_2), ilt (O_2), vanddamp (H_2O), svovloxider (SO_x) og kvælstofilter (NO_x). Disse stoffer har negativ indflydelse på omdannelse og kvaliteten af det endelige produkt og CO_2 'en skal derfor fanges og opkoncentreres.

Chemical ionization mass spectrometry in atmospheric studies

Advances in chemical ionization mass spectrometry can improve our understanding of atmospheric composition.

Af Varun Kumar, Institut for Miljøvidenskab, Aarhus Universitet

The Earth's atmosphere is composed of various human-made and natural gases and aerosols (tiny particles). A complete identification and quantification of these constituents is required to have a thorough understanding of their effects on Earth's climate, indoor and outdoor air quality, and human health. However, the chemical characterization of these constituents is extremely challenging because of the enormously high number of species and their distinct physical and chemical properties.

Advances in mass spectrometry based techniques

Mass spectrometry-based techniques have been popular for many decades to identify substances in the atmospheric samples. Initial applications included use of gas chromatography (GC), and liquid chromatography (LC) coupled to mass spectrometers (GC-MS and LC-MS) to identify constituents of atmospheric mixtures using offline analysis [1,2].

Although these techniques are highly chemically specific, they can only resolve a fraction of species present in atmospheric samples. In addition, the usage of offline techniques is limited by the need of sample pre-treatment and their low time resolution. A major development in pursuit of real-time analysis of atmospheric aerosols came in the form of aerosol mass spectrometer (AMS) in the early 2000s [3]. This instrument samples aerosol particles in real time which are subsequently vaporized and then ionized using electron impact (EI) ionization. The ionized species are then detected by a mass spectrometer.

Although the information on bulk characteristics such as total mass of

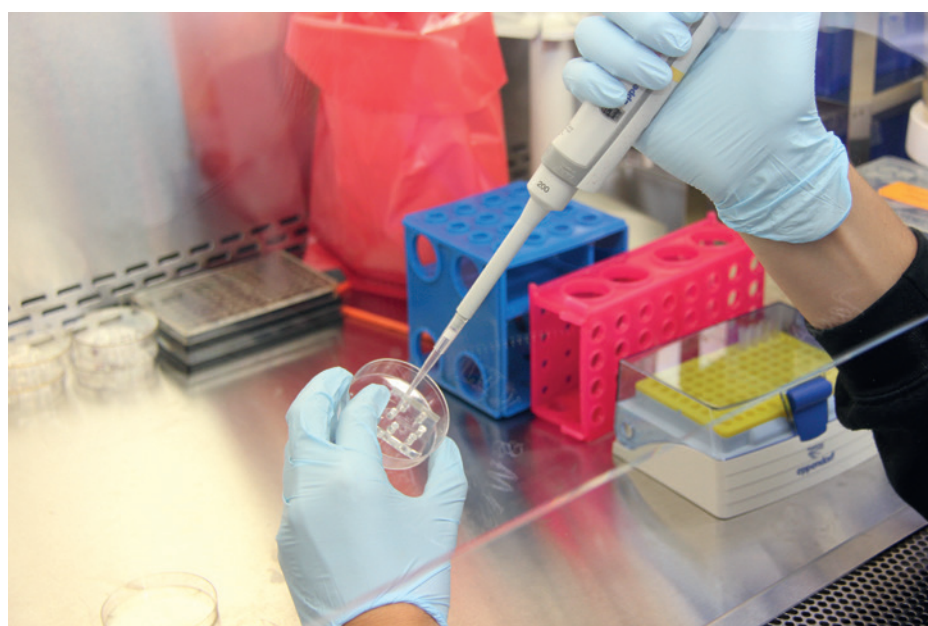


Photo: Pixabay.

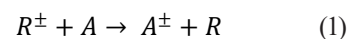
different aerosol species make this instrument highly popular and important, the use of hard ionization (EI, where 70eV electrons are bombarded on samples), however, results in high degree of sample fragmentation and hence limited molecular information can be obtained. In recent years, the advancement of mass spectrometry technology has led to developments of instruments based on soft ionization techniques capable of providing molecular level characterization of atmospheric constituents both in the gas- and particle phases in real time.

Chemical ionization mass spectrometry (CIMS) is one such technique which has stood out from other analytical techniques in the last decade and is now one of the most widely used tools for atmospheric chemistry research. Over the years, improvements in CIMS technology have made it more sensitive, faster, and accurate. These advancements help scientists measure even tiny amounts of gases and aerosols in the atmosphere

at a very high time resolution (seconds to minutes), leading to a better understanding of pollution sources, chemical reactions in the air, and their impact on climate and human health.

Basics of CIMS

The basic concept of CIMS is based on ion molecule reactions (IMRs) where a reagent ion (R^+) undergoes collisions with analyte molecules (A) in the gas-phase and leads to the production of a product ion (A^+) which contains intact molecular structure of the analyte plus a neutral byproduct (R). The ionization of analyte A happens with minimal energy transfer and thus very limited fragmentation.



The charged analyte ions are then focused and transported using electric fields and ion optics to a mass spectrometer (e.g., TOF, Quadrupole, Orbitrap) where

they are separated based on their mass-to-charge (m/z) ratio and a mass spectrum of analyte is produced. A basic configuration of CIMS is shown in figure 1.

The high selectivity and sensitivity of CIMS lies in its ionization chemistry, which relies on reagent ions to selectively ionize target molecules via ion-molecule reactions (IMRs). The choice of reagent ion is, therefore, critical in determining the type of compounds detected. Different reagent ions have been developed in recent years to expand the range of measurable species.

The common reagent ions in positive mode include H_3O^+ , NO^+ , C_6H_6^+ , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}^+$, NH_4^+ , and protonated amines, while negative mode includes I^- , $\text{CH}_3\text{C}(\text{O})\text{O}^-$, CF_3O^- , Br^- , and NO_3^- [5]. Reagent ions are typically generated using various sources such as radioactive ion sources (e.g., ^{210}Po), X-ray, or vacuum ultraviolet (VUV) ion sources. Table 1 summarizes a few common reagent ions and the class of compounds they are used to detect. Please note that the list of reagent ions listed, and the examples of species detected by the respective reagent ion is not exhaustive.

Recent applications of CIMS in atmospheric chemistry research

Advancements in CIMS have enabled more precise and comprehensive measurements of various atmospheric species, including volatile organic compounds (VOCs), highly oxygenated molecules (HOMs), and organic aerosols (OA), providing deeper insights into their formation, evolution, and environmental impacts.

Detection of atmospheric VOCs from traditional and emerging sources

Volatile organic compounds (VOCs) are critical components of the Earth's atmosphere, influencing air quality and

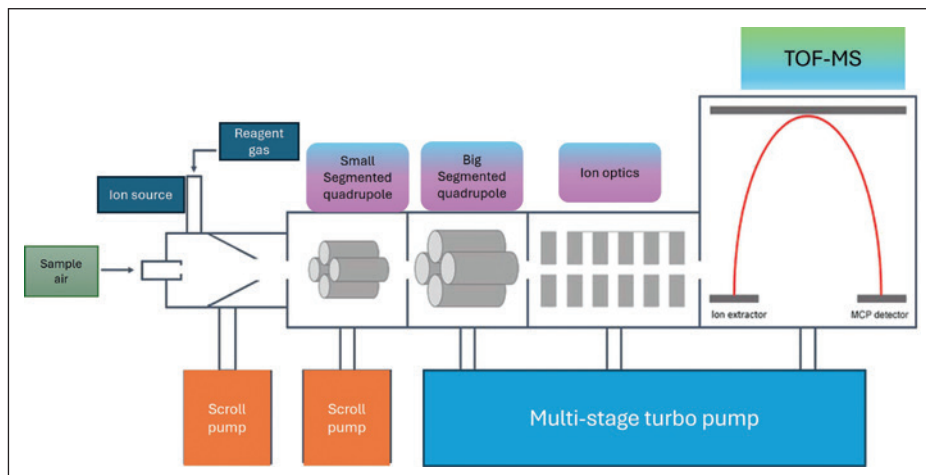


Figure 1. An illustrative diagram of a basic CIMS configuration. Adapted from Sanchez et al. (2016) [4].

climate. Recent development in proton transfer reaction mass spectrometry (PTR-MS), which is a widely employed type of CIMS [6], in detecting and quantifying VOCs have significantly improved sensitivity and resolution, allowing for the detection of VOCs at very low concentrations (pptv levels). These instruments have been used in both laboratory and field studies to measure VOCs from biogenic sources (e.g., forests) and anthropogenic sources (e.g., urban emissions, wildfires) [7,8].

Highly oxidized molecules (HOMs)

Highly oxygenated molecules (HOMs) are a class of organic compounds with six or more oxygen atoms, formed through autoxidation processes involving peroxy radicals ($\text{RO}_2^\bullet$) [9]. HOMs are significant contributors to secondary organic aerosol (SOA) formation due to their low volatility. CIMS employing NO_3^- as reagent ion (i.e., NO_3^- -CIMS) has been widely used to study HOMs formed from the oxidation of monoterpenes, isoprene, and aromatic VOCs [10,11]. Additionally, NO_3^- -CIMS coupled with a special inlet

for aerosols i.e., (Filter Inlet for Gases and AEROSols; FIGAERO) has been used to measure particle-phase HOMs, providing insights into their role in aerosol growth and aging [12].

Real-time OA bulk and surface molecular composition

Real-time measurements of organic aerosol (OA) molecular composition are crucial for understanding aerosol formation and aging processes. Various types of CIMS techniques have been successfully deployed in both laboratory and field studies, providing near-molecular level characterization of OA. For example, extractive electrospray ionization (EESI)-MS and FIGAERO-CIMS have been used to study the molecular composition of OA [13,14] in both field and laboratory studies.

Conclusions

Chemical ionization mass spectrometry has revolutionized the study of atmospheric chemistry by providing highly sensitive and precise measurements of atmospheric aerosols and trace gases.

Reagent ion	Source	Examples of few classes of species detected
H_3O^+	Water vapour	Compounds with proton affinity larger than water (e.g., volatile organic compounds (VOCs) except small alkanes)
NO^+	Ultrahigh purity air	Carbonyl species, small branched alkenes
$(\text{C}_6\text{H}_6)_2^+$	Benzene	dimethyl sulfide, isoprene, terpenes
NH_4^+	Ammonia	Oxygenated VOCs, highly oxidised molecules (HOMs), amines
I^-	CH_3I	HONO , N_2O_5 , OVOCs, HOMs
Br^-	CH_2Br_2	HOMs, halogen species
$\text{CH}_3\text{C}(\text{O})\text{O}^-$	Acetic anhydride	Majority of organic acids
NO_3^-	Nitric acid (HNO_3)	sulfuric acid, HOMs, nitroaromatics

Table 1. Common reagent ions and the class of compounds they are used to detect.

Continuous improvements in ionization techniques, instrument design, and data analysis methods have expanded its applications, making it a critical tool for environmental monitoring, pollution control, and climate research. As technology advances, CIMS will continue to play a significant role in understanding the complex chemical processes occurring in our atmosphere, ultimately helping to improve air quality and mitigate climate change.

E-mail:

Varun Kumar: varunkm@envs.au.dk

References

1. J.D. Surratt *et al.*, "Chemical Composition of Secondary Organic Aerosol Formed from the Photooxidation of Isoprene," *J Phys Chem A*, vol. 110, no. 31, pp. 9665-9690, Aug. 2006, doi: 10.1021/jp061734m.
2. J. Warneke, R. Bandur, and T. Hoffmann, "Capillary-HPLC-ESI-MS/MS method for the determination of acidic products from the oxidation of monoterpenes in atmospheric aerosol samples," *Anal Bioanal Chem*, vol. 385, no. 1, pp. 34-45, 2006, doi: 10.1007/s00216-006-0340-6.
3. J.T. Jayne *et al.*, "Development of an Aerosol Mass Spectrometer for Size and Composition Analysis of Submicron Particles," *Aerosol Science and Technology*, vol. 33, no. 1-2, pp. 49-70, 2000, doi: 10.1080/027868200410840.
4. J. Sanchez, D.J. Tanner, D. Chen, L.G. Huey, and N.L. Ng, "A new technique for the direct detection of HO₂ radicals using bromide chemical ionization mass spectrometry (Br-CIMS): initial characterization," *Atmos Meas Tech*, vol. 9, no. 8, pp. 3851-3861, 2016, doi: 10.5194/amt-9-3851-2016.
5. W. Zhang, L. Xu, and H. Zhang, "Recent advances in mass spectrometry techniques for atmospheric chemistry research on molecular-level," *Mass Spectrom Rev*, vol. 43, no. 5, pp. 1091-1134, 2024, doi: <https://doi.org/10.1002/mas.21857>.
6. B. Yuan, A.R. Koss, C. Warneke, M. Coggon, K. Sekimoto, and J.A. de Gouw, "Proton-Transfer-Reaction Mass Spectrometry: Applications in Atmospheric Sciences," *Chem Rev*, vol. 117, no. 21, pp. 13187-13229, Nov. 2017, doi: 10.1021/acs.chemrev.7b00325.
7. Y. Liang *et al.*, "Emissions of organic compounds from western US wildfires and their near-fire transformations," *Atmos Chem Phys*, vol. 22, no. 15, pp. 9877-9893, 2022, doi: 10.5194/acp-22-9877-2022.
8. A.R. Koss *et al.*, "Non-methane organic gas emissions from biomass burning: identification, quantification, and emission factors from PTR-ToF during the FIREX 2016 laboratory experiment," *Atmos Chem Phys*, vol. 18, no. 5, pp. 3299-3319, 2018, doi: 10.5194/acp-18-3299-2018.
9. F. Bianchi *et al.*, "Highly Oxygenated Organic Molecules (HOM) from Gas-Phase Autoxidation Involving Peroxy Radicals: A Key Contributor to Atmospheric Aerosol," *Chem Rev*, vol. 119, no. 6, pp. 3472-3509, Mar. 2019, doi: 10.1021/acs.chemrev.8b00395.
10. M. Ehn *et al.*, "A large source of low-volatility secondary organic aerosol," *Nature*, vol. 506, no. 7489, pp. 476-479, 2014, doi: 10.1038/nature13032.
11. U. Molteni *et al.*, "Formation of highly oxygenated organic molecules from aromatic compounds," *Atmos Chem Phys*, vol. 18, no. 3, pp. 1909-1921, 2018, doi: 10.5194/acp-18-1909-2018.
12. A. Mutzel *et al.*, "Highly Oxidized Multifunctional Organic Compounds Observed in Tropospheric Particles: A Field and Laboratory Study," *Environ Sci Technol*, vol. 49, no. 13, pp. 7754-7761, Jul. 2015, doi: 10.1021/acs.est.5b00885.
13. V. Kumar *et al.*, "Highly time-resolved chemical speciation and source apportionment of organic aerosol components in Delhi, India, using extractive electrospray ionization mass spectrometry," *Atmos Chem Phys*, vol. 22, no. 11, pp. 7739-7761, 2022.
14. J. Cai *et al.*, "Characterization of offline analysis of particulate matter with FIGAERO-CIMS," *Atmos Meas Tech*, vol. 16, no. 5, pp. 1147-1165, 2023, doi: 10.5194/amt-16-1147-2023.

LabDays 2025

- trade fair for laboratory technology

AARHUS 10-11 SEPTEMBER



Der er brug for lange måleserier af miljøparametre

Kontinuerlige, kvalitetssikrede målinger af kemiske, fysiske og biologiske miljøparametre giver uundværlig information. Det gælder også for Grønland.



Af Jens Liengaard Hjorth, adjungeret professor ved Aarhus Universitet, Institut for Miljøvidenskab

Hvis man skriver en ansøgning, hvor man forklarer, at man gerne vil have penge til at fortsætte med at måle det samme, som man har målt i de sidste 30 år, så vil nogle tænke, at nu må det snart være på tide at finde på noget nyt! Det er imidlertid i nogle tilfælde forkert tænkt, fordi kontinuiteten netop kan være meget vigtig. Det vil jeg prøve at begrunde i det følgende. Baggrunden for dette indlæg er Miljøstyrelsens beslutning om, at man fra sommeren 2025 vil ophøre med at finansiere målingerne af en række luftforurenende gasser samt tungmetaller og miljøskadelige organi-

ske forbindelser på "Villum Research Station" (i det følgende kaldet VRS) på østsiden af den allernordligste del af Grønland. Jeg vil gennem nogle eksempler vise, at målingerne på VRS giver vigtig information.

Hvordan kontrollerer man, om vores bestræbelser på at nedbringe luftforureningen virker? Og hvordan observerer man klimaforandringernes indflydelse på atmosfærens kemi? Der er mange typer af undersøgelser, som kan være nyttige i den sammenhæng, både målinger og modelberegninger, men helt fundamentalt er det at have kontinuerlige målinger, år efter år, af de parametre, man ønsker at følge. Det handler om at afdække og forstå tendenser i koncentrationerne af for eksempel drivhusgasser som kuldioxid og metan,

eller luftforurenende stoffer som NO_x og ozon (der tillige er en drivhusgas) såvel som kviksølv og andre tungmetaller og organiske forbindelser som PFAS. Det er også vigtigt at følge, hvordan atmosfærens indhold af partikler ændrer sig med hensyn til antal, størrelse og kemisk sammensætning. Partiklerne har betydning for sundhed, men også en ofte overset betydning for klimaet.

Et eksempel baseret på sulfat

Nødvendigheden af at basere analyser af tendenser på lange tidsserier af observationer kan illustreres ved målingerne af sulfat i partikler ved VRS. Sulfat er en komponent af partikler i atmosfæren. Kilderne er både naturlige, for eksempel oxidation af naturligt emitterede svovlforbindelser og sulfat indeholdt i havsaltpar-

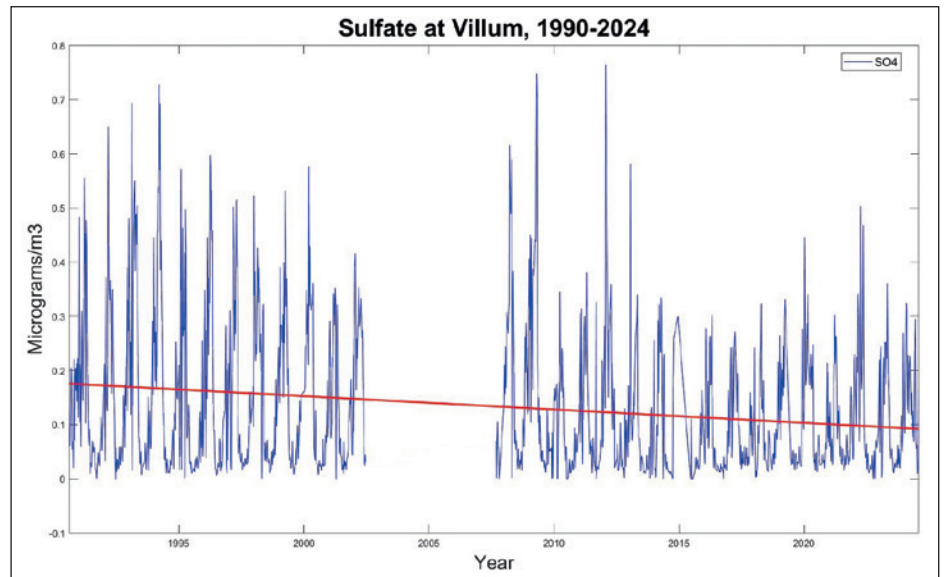
tikler, og menneskeskabte. Sidstnævnte skyldes hovedsageligt forbrænding af fossile brændstoffer. Da det menneskeskabte bidrag til sulfat i Europa og Nordamerika er blevet kraftigt reduceret i de seneste år på grund af miljølvgivning, så forventer man en nedgang i sulfatkonzentrationerne målt på VRS. Kurven vist i figur 1 afspejler da også en reduktion i sulfatniveauet, når man ser på hele forløbet. Hvis man i stedet nøjes med at sammenligne udvalgte perioder, som kunne repræsentere nogle målekampanjer, så vil man kunne finde kombinationer af perioder, der viser en klar stigning i sulfatkonzentrationerne og andre, der viser en meget stærk nedgang. Problemet er selvfølgelig, at sulfatniveauet, som mange andre miljøparametre, afhænger af mange faktorer, for eksempel meteorologiske forhold, der kan vise store år-til-år variationer.

POP'er og tungmetaller

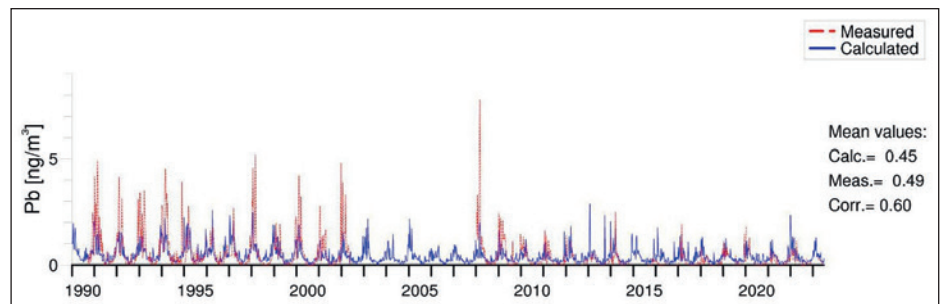
Atmosfærens kemi i det arktiske område afhænger meget af den transport af luftforurening, der foregår ved, at luftmasser fra for eksempel Europa når op til Arktis. Målingerne ved VRS tjener derfor til at forbedre vores forståelse af ændringer i emissioner og klimatiske forhold i stor skala, herunder de ændringer, der skyldes de voldsomme klimaforandringer i det arktiske område. Blandt andet har man testet modeller ved at sammenligne deres resultater med målingerne på VRS (se et eksempel i figur 2). Der er dog også målinger, som direkte vedrører miljø- og sundhedsproblemer på Grønland.

Det gælder for eksempel målingerne af de såkaldte POP'er. Det er en række syntetiske organiske forbindelser med meget lang levetid og skadevirkninger på mennesker og miljø, kendte under fællesbetegnelsen "Persistent Organic Pollutants". Produktion og brug af disse forbindelser er blevet forbudt eller stærkt begrænset gennem den såkaldte Stockholm Konvention, der trådte i kraft i 2004 og som løbende bliver opdateret.

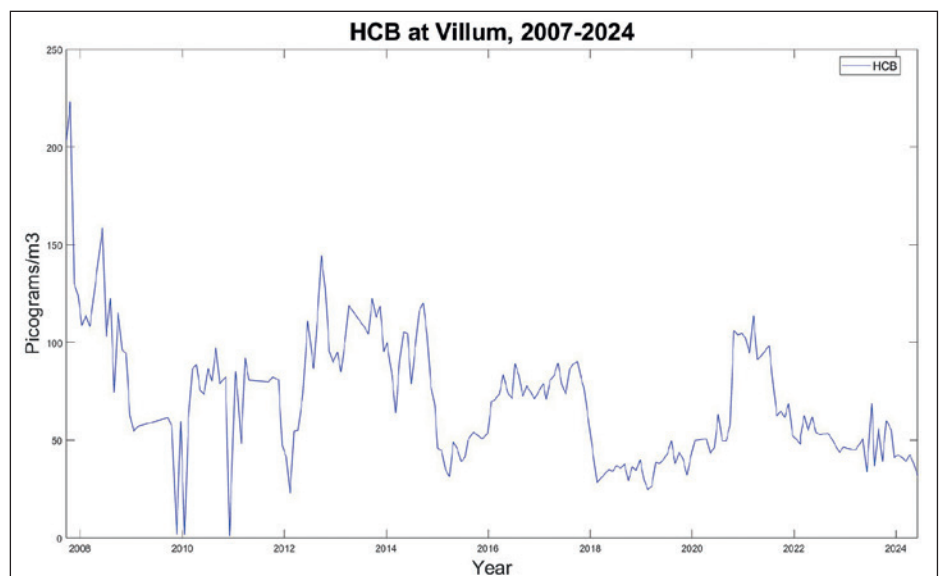
Mange af disse forbindelser er blevet målt gennem en årrække på VRS på Grønland som et bidrag til det internationale program AMAP (Arctic Monitoring and Assessment Programme). Målingerne omfatter pesticider som Lindan, PCB (PolyChlorinated Biphenyls) forbindelser og HCB (Hexa-ChloroBenzene (vist på figur 3)). Nogle PFAS (Per- and PolyFluorinated Alkyl Substances) forbindelser har status som POP, mens andre tilhører gruppen CEAC (Chemicals of Emerging Arctic Concern), som er forbindelser, der mis-



Figur 1. Ugemiddelværdier af sulfat opsamlet på filtre ved VRS. Den røde linje viser tendensen i værdierne, beregnet med mindste kvadraters metode. Maksima i forårsperioderne skyldes transport af luftmasser fra forurenede områder.



Figur 2. Sammenligning af målte og beregnede værdier af bly (Pb) ved VRS. Beregningerne er foretaget med DEHM (the Danish Eulerian Hemispheric Model).



Figur 3. Ugentlige middelværdier af HCB målt ved VRS.

tænkes for at have samme skadevirkninger som POP'erne, men som endnu ikke er kommet på Stockholm Konventionens liste. Et studie, der undersøgte en gruppe på 350 personer fra inuitbefolkningen, fandt, at de, når den

typiske kostsammensætning tages i betragtning, er udsat for den højeste PFAS-belastning målt i verden [1].

Tungmetaller er en anden gruppe stoffer, der som POP'erne ophobes i levende organismer og derved kan nå skadelige

niveauer, også hos mennesker. Kviksølv (kemisk betegnelse Hg) vækker speciel bekymring i Grønland, også i dette tilfælde har grønlænderne en ubehagelig verdensrekord som den befolkning, der, ifølge AMAP, har verdens højest målte gennemsnitlige kviksølvniveau i blodet. Kviksølv er blevet målt på VRS siden 1999 (se figur 4).

Ozon

Ozon i stratosfæren har fået meget omtale, men ozon i den lavere del af atmosfæren, troposfæren, er også af stor interesse, fordi den er en drivhusgas, den er giftig og den spiller en central rolle i de fotokemiske processer, der foregår i troposfæren. Resultatet af ozonmålingerne ved VRS er vist i figur 5.

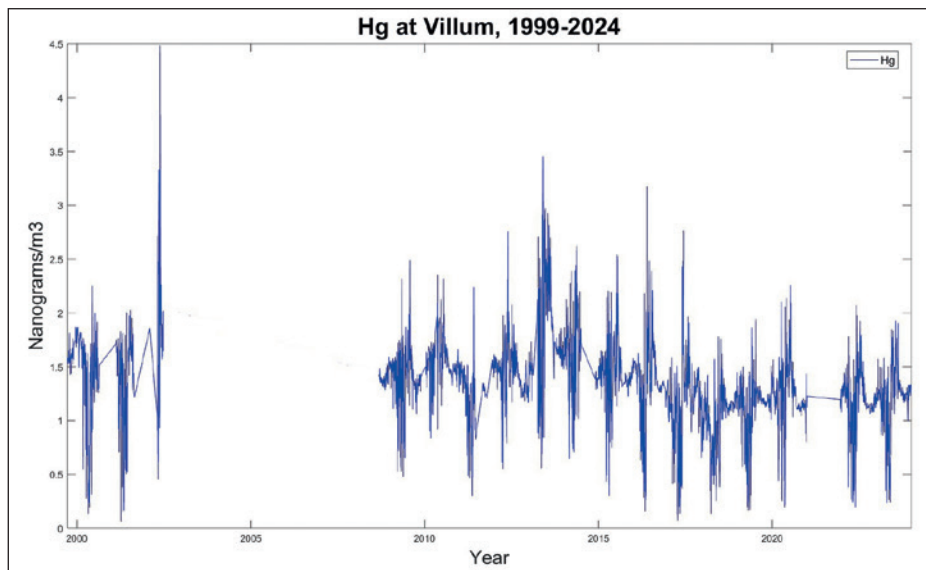
Som for sulfatdataene er der en periode fra 2002 til 2007, hvor der ingen observationer er. Det skyldes, at man i denne periode ikke kunne få målingerne finansieret. Desværre er det netop i denne periode, man kan se, at der er sket en væsentlig ændring af ozonkoncentrationen. Det ville have været interessant at have hele forløbet beskrevet.

Miljøforskning i Grønland

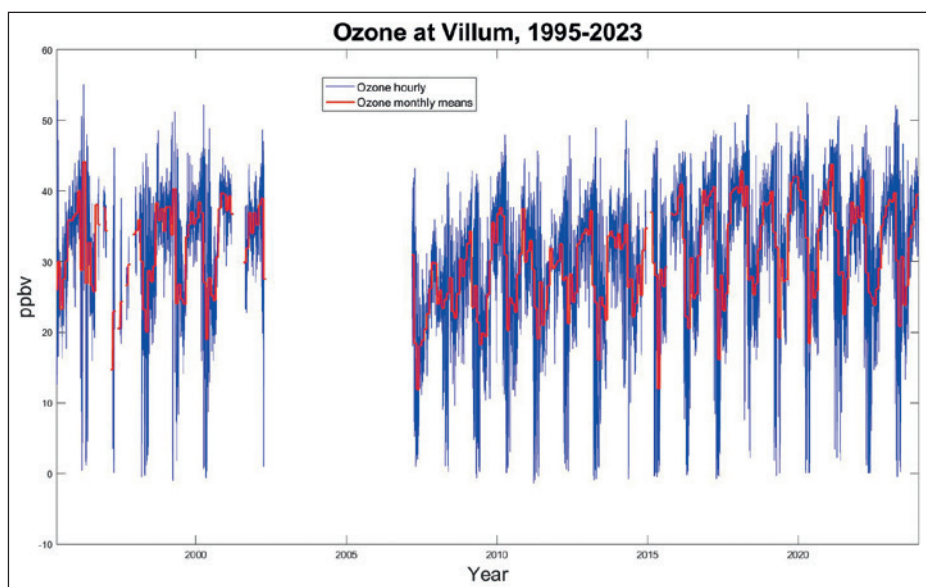
Den finske professor Markku Kulmala fra universitetet i Helsinki kan vel betegnes som verdens førende forsker, når det gælder partikelfysik og kemi i atmosfæren. Han lancerede for nogle år siden et initiativ til at skabe et netværk af 1.000 veludstyrede målestationer fordelt over hele verden, der både skulle måle og monitorere fysiske, kemiske og biologiske parametre [2]. Selvom Markku Kulmalas initiativ er blevet mødt med velvilje fra mange, så er det uden tvivl svært at realisere, ikke mindst i den nuværende konfliktfyldte geopolitiske situation, der jo også rammer forskningssamarbejde, specielt selvfølgelig med Rusland.

Der er dog for mig at se ingen tvivl om, at Kulmalas idé fortjener megen opmærksomhed. Hvis den blev realiseret, ville det kunne få meget stor betydning for vores forståelse af de globale klima- og miljøændringer. I hvert fald bør vi ikke bevæge os i den modsatte retning og formindske målekapaciteten i områder, hvor den i forvejen er meget begrænset.

Konsekvenserne af manglen på data fra Rusland er et hovedpunkt i en artikel, der sidste år blev offentliggjort i "Nature Climate Change" [3]. Forfatterne undersøger, i hvor høj grad de eksisterende målestationer giver et dækkende billede af de forskellige økosystemer, der findes i det arktiske



Figur 4. Daglige middelværdier af atomart kviksølv målt ved VRS.



Figur 5. Time- og månedsmiddelværdier af ozon målt ved VRS.

område, som jo i de seneste år er blevet særligt vigtig, fordi klimaforandringerne her foregår hurtigere end på lavere breddegrader. De finder, at manglen på data fra Rusland giver en væsentlig forringelse af dækningen, men konstaterer samtidigt, at selv med de russiske stationer inkluderet, er dækningen mangelfuld. Altså en meget dårlig baggrund for yderligere at svække forskningsindsatsen i det arktiske område!

Det er derfor ekstra ærgerligt, at Danmark nedprioriterer målinger i Arktis. Således stopper målingerne beskrevet ovenfor af atmosfærisk langtransport af forurening til Grønland på grund af halvering i bevilling i forhold til tidligere. Dette virker besynderligt set i lyset af den geopolitiske situation og selvfølgelig også på baggrund af, at disse målinger hjælper med til at forstå årsagen til, at

grønlændere ofte har høje niveauer af for eksempel kviksølv i kroppen.

E-mail:

Jens Liengaard Hjorth:

jens.hjorth@envs.au.dk

Referencer

1. Sonne, C., Desforbes, J.P., Gustavson, K., Bossi, R., Bonefeld-Jorgensen, E.C., Long, M.H., Rigét, F.F., Dietz, R., 2023. Assessment of exposure to perfluorinated industrial substances and risk of immune suppression in Greenland and its global context: a mixed-methods study. *Lancet Planet Health* 7, E570-E579.
2. Kulmala, M., 2018. Build a global Earth observatory. *Nature* 553, 21-+.
3. López-Blanco, E., Topp-Jorgensen, E., Christensen, T.R., Rasch, M., Skov, H., Arndal, M.F., Bret-Harte, M.S., Callaghan, T.V., Schmidt, N.M., 2024. Towards an increasingly biased view on Arctic change. *Nat Clim Change* 14.

Prisen på grisen:

Hvad koster oprensning af beskidt CO₂?

Hvor rent er CO₂ fra CO₂-fangst? Og hvor dyrt er det at oprense CO₂? Denne artikel giver indsigt i nogle af udfordringerne ved at implementere en global CO₂ infrastruktur.

Af Ebbe Hauge Jensen^{1,2},
Rikke Cilius Pedersen³,
Isaac Appelquist Løge¹,
Gcinisizwe Msimisi Dlamini¹,
Randi Neerup¹, Christian Riber²,
Brian Elmegaard³,
Jonas Kjær Jensen³ og
Philip Loldrup Fosbøl¹

¹ Institut for Kemiteknik, DTU

² Rambøll Danmark

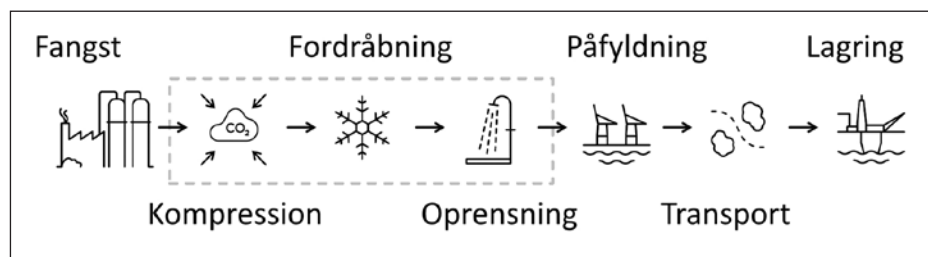
³ Institut for Byggeri og Mekanisk Teknologi, DTU

CO₂-fangst, udnyttelse og lagring, eller Carbon Capture and Storage (CCUS), er et afgørende teknologisk redskab i værktøjskassen for at holde den globale temperaturstigning under 1,5°C. CCUS hjælper med at reducere CO₂-udledninger ved at fange CO₂, før det når atmosfæren og lagre det i undergrunden eller nyttiggøre det i værdifulde produkter. For at den fangede CO₂ kan flyde frit fra udleder til forbruger eller lagring, skal der en global infrastruktur til, med transnationale rørledninger, midlertidig lagring undervejs og definerede samarbejder mellem producenter og aftagere.

Der findes et utal af måder at fange CO₂ på, og der findes lige så mange aftagere af den oprensede CO₂. Heri ligger en af de store udfordringer, nemlig at den indfangede CO₂ kan have forskellige urenheder, og aftagere kan have forskellige krav til renheden. At lade de strengeste modtagerkrav være definerende for renheden tillader en universel infrastruktur, men kan være en dyr løsning.

Hvorfor CO₂-renhed er vigtig

Dette er eksemplificeret i et nyligt opråb

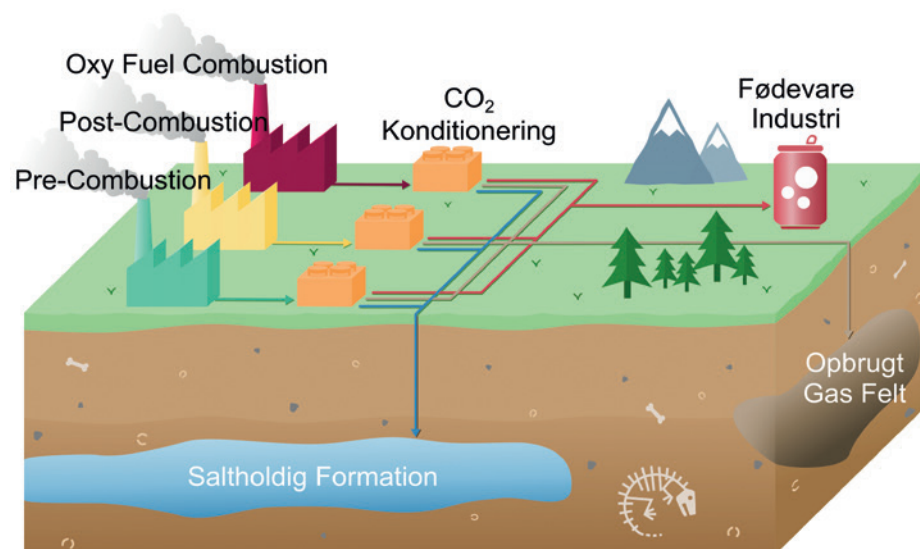


Figur 1. CO₂'s rejse fra den er fanget, til den skal lagres. Konditionering, som er et fokus i denne artikel, er indrammet i en stiplede kasse.

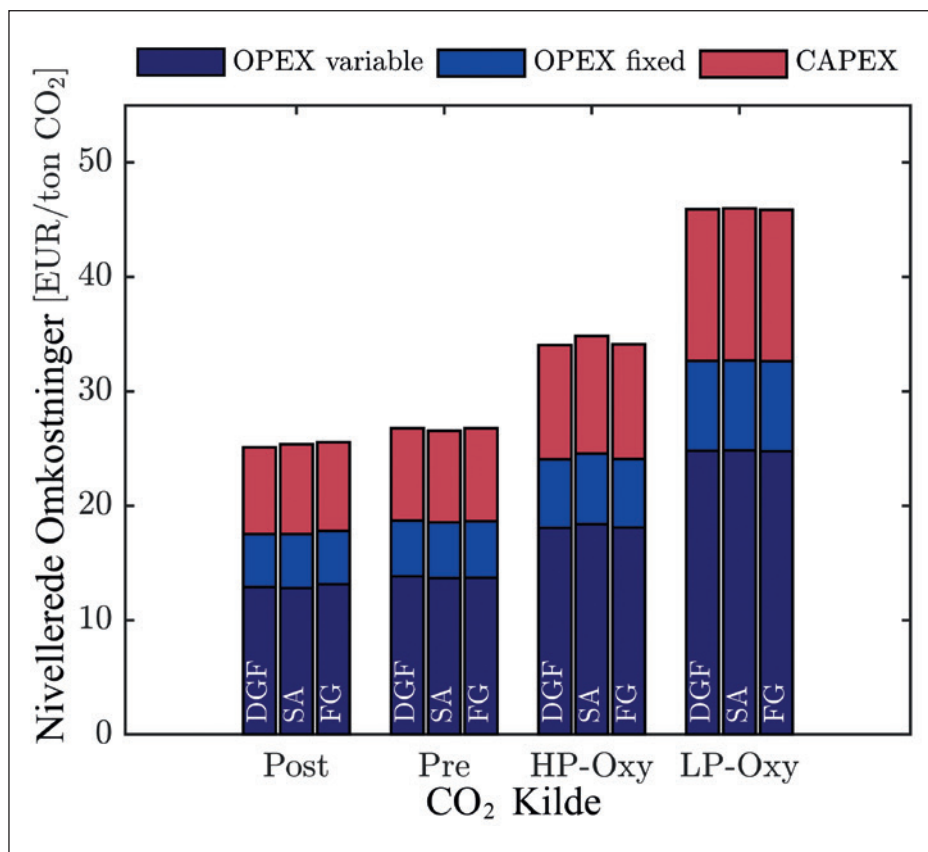
om standarder i CO₂-værdikæden, hvor nordeuropæiske interessenter understreger, at renhedsgraden af den fangede CO₂ skal ensrettes for at kunne transporteres, opbevares eller bruges [1]. Hvis renhedsstandarden bliver sat for højt, vil det betyde ekstraudgifter til oprensning. Hvis den bliver sat for lavt, kan det med-

føre udfordringer med at transportere og lagre den.

Fanget CO₂ indeholder ofte forskellige urenheder som vanddamp, kvælstof, ilt og spormængder af svovloxider (SOx) og nitrogenoxider (NOx), og andre lignende stoffer. Sammensætningen af urenheder og koncentrationen af CO₂



Figur 2. Designet af forskernes studie. Her er der vurderet, hvordan CO₂, fanget på tre forskellige måder, bliver konditioneret, og hvilke aftagere det derefter har.



Figur 3. Prisen på grisen. Her kan den overordnede pris ses for, hvor meget det koster at konditionere CO₂ fra forskellige afsendere til forskellige modtagere.

afhænger af dens kilde og den anvendte fangstmetode. Derfor skal CO₂'en typisk konditioneres, dvs. fordråbes eller komprimeres (figur 1), for at kunne blive transporteret i lastbiler, skib eller rørledninger.

Disse urenheder komplicerer processen i forhold til at transportere, opbevare eller anvende CO₂'en. Hvis der er vand til stede i den CO₂, man vil transportere, kan det forårsage korrosion i rørledninger [2]. Samtidig kan urenheder som kvælstof og ilt påvirke CO₂'ens faseopførsel - altså balancen mellem hvornår CO₂ er på fast-, væske- eller gasform. Dette gør transporten væsentligt mere udfordrende.

Og for anvendelsen, hvis CO₂ skal bruges til fødevarerindustrien, skal den være næsten ren (nej tak til SO_x og NO_x i sodavand og øl!). På den anden side kan der være nogle andre krav til CO₂, som skal gemmes væk i undergrunden, til langtidsopbevaring.

Konditionering koster

Konditionering koster og den endelige pris afhænger af, hvilken kilde CO₂'en kommer fra, og hvor den skal hen.

En undersøgelse udført af forskere ved Danmarks Tekniske Universitet (DTU) afslører prisen på urenheder. Omkostningerne ved at konditionere

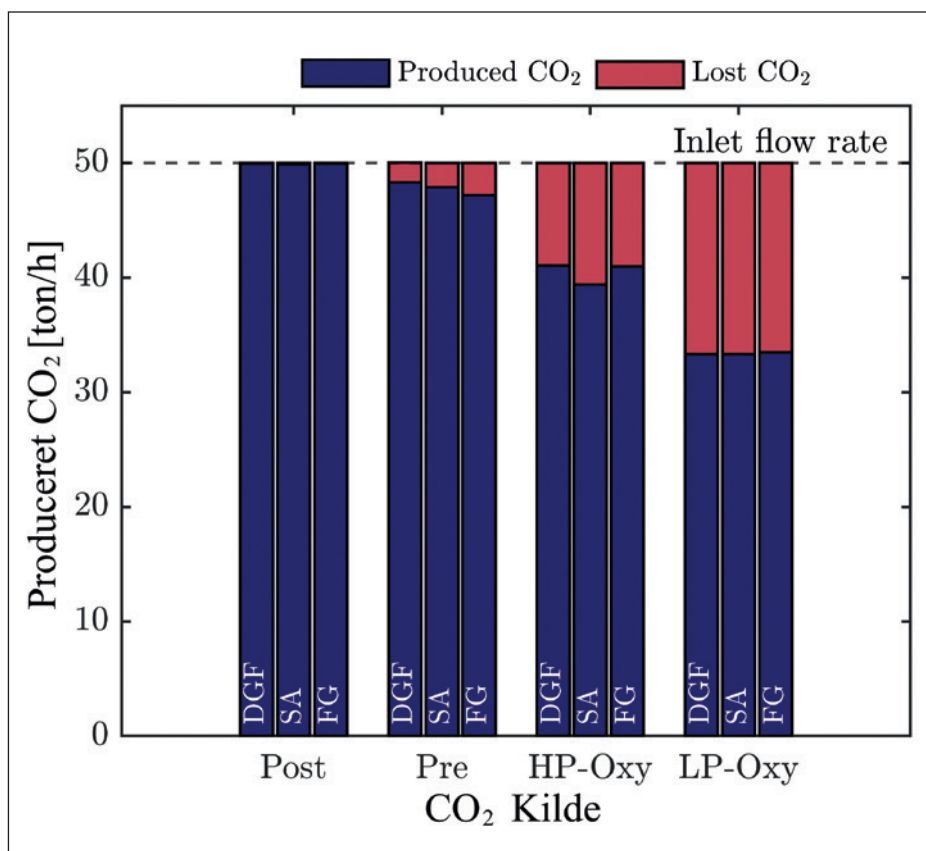
CO₂ afhænger i høj grad af niveauet af urenheder i den fangede gas [3]. Undersøgelsen omhandlede konditionering af den CO₂, som kom ud af fire forskellige fangstmetoder, og leveret til tre forskellige aftagere. Forskernes designsystem er afbilledet i figur 2, side 21.

Den nye undersøgelse fra DTU er til dato den mest omfattende og detaljerede analyse af udgifter ved konditionering af CO₂. Tidligere studier har typisk fokuseret på fjernelsen af hovedkomponenterne, men har sjældent taget alle urenheder med i analysen. Det nye studie undersøger, hvad prisen er for at oprense CO₂ fra sammensætninger fra de tre mest udbredte fangstmetoder til tre kommercielle standarder. Forskerne fra DTU har undersøgt, hvad det koster at oprense CO₂ i virkelighedsnære situationer, fra tre forskellige fangstgasser til tre forskellige aftagerkrav.

Hvor meget koster konditionering?

Før vi ser på forskernes resultater, må vi have et overblik over, hvilke typer udgifter der er ved konditionering.

Konditionering indebærer mange proces tekniske trin, og hver komponent i den proces har en pris. Investeringen i



Figur 4. Grafen viser, hvordan der bliver produceret mindre CO₂ i nogle af de tilfælde, som forskerne undersøgte. Her viser den blå farve, hvor meget CO₂ der bliver produceret fra konditioneringsprocessen, mens den røde farve indikerer, hvor meget der er blevet tabt.

anlægget kaldes CAPEX. Dertil kommer forbrug; det kan være kølemateriale, strømforbrug, løn til personale, vedligehold og andre utensilier. Dette kaldes OPEX.

Studiet viste, at omkostningerne ved konditionering af CO₂ var meget afhængige af de forskellige CO₂-kilder, hvorimod aftagerens specifikationer havde en mindre indflydelse. Forskerne viste, at aftagerkrav maks. har en 5 procent indvirkning på den totale pris, hvorimod sammensætningen af kilden kunne betyde en fordobling af prisen. Hovedkonklusionen er vist i figur 3.

De gennemsnitlige omkostninger til konditionering varierede fra 25 EUR/t CO₂ for oprensning af "ren" CO₂ til 46 EUR/t CO₂ for "beskidt" CO₂. For at forstå denne prisforskel er det nødvendigt at forstå, hvilke dele der giver anledning til den højere pris.

Den totale CAPEX for at oprense CO₂ fra fangstmetoden, der producerede den "rene" CO₂, var cirka 32 millioner euro og op til 37 millioner euro for "beskidt" CO₂. Til sammenligning var OPEX 7 millioner EUR/år for "ren" CO₂ og 9 millioner EUR/år for "beskidt" CO₂.

Dette er måske mange tal, men konklusionen er, at der ikke, umiddelbart, er så stor forskel på rent og beskidt CO₂, da CAPEX ændres fra 32 MEUR til 37 MEUR og for OPEX ændres fra 7 MEUR/år til 9 MEUR/år.

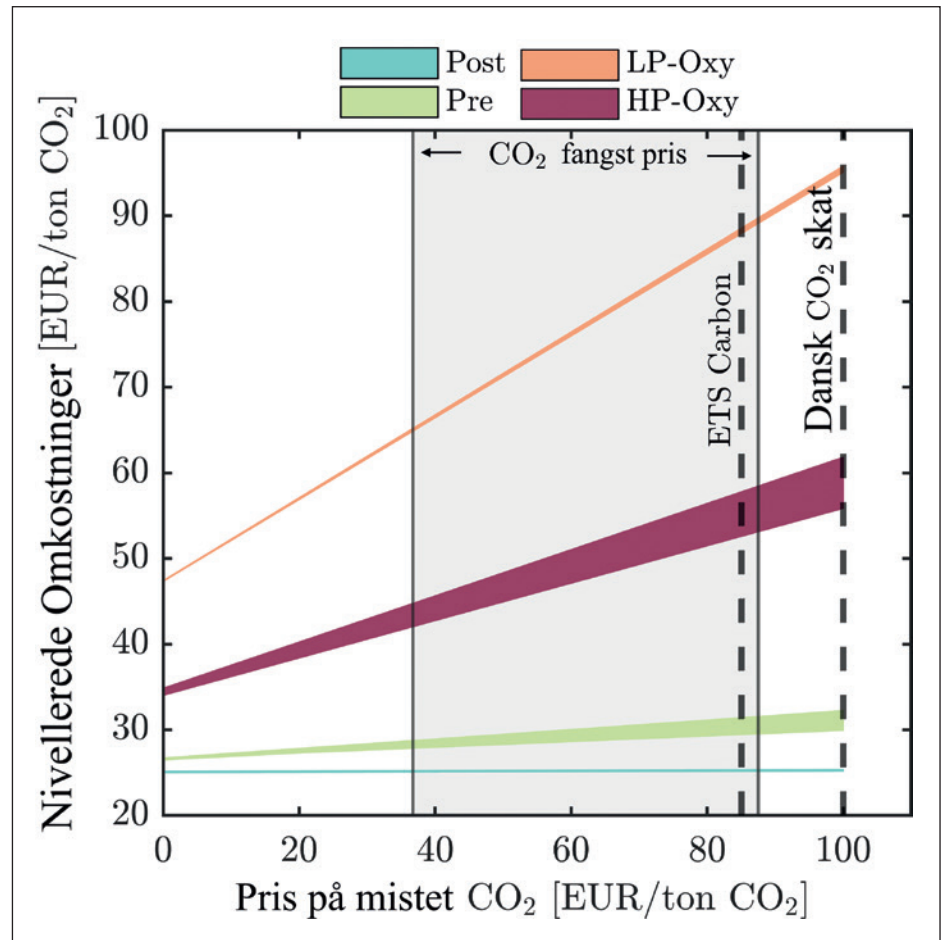
Den store prisforskel kommer derfor et andet sted fra. Nemlig fra mængden af CO₂ man kan få ud af de forskellige metoder (figur 4). Men fordi der er nogle urenheder, som kun kan komme væk, når man ventilerer gassen, så bliver der lukket en stor mængde CO₂ ud, når kilden er oxy-fuel. Så fordi man er nødt til at ventilere 0, 5, 20 og 33 procent af gassen, man får ind, så bliver oxy-fuel meget dyrere per produceret ton CO₂ med det systemdesign, der er brugt i undersøgelsen.

Derfor er prisen på CO₂ vigtig. For der er en udgift, der ikke er blevet introduceret endnu. Nemlig hvor meget et ton CO₂ koster. Den endelige politiske eller industrielle standard vedrørende renheden af CO₂ vil derfor have stor indflydelse på, hvad CO₂-konditionering vil koste (figur 5).

Hvad har vi så lært?

Undersøgelsen viser tydeligt, at valget af konditioneringsomkostningerne afhænger meget af, hvilken CO₂-kilde man har, da det store udslag i prisen er, hvor meget CO₂ man mister i oprensningsprocessen.

Det vigtigste at tage med herfra er,



Figur 5. Prisen på at oprense CO₂ er afhængig af prisen på CO₂. Her har forskerne lavet en undersøgelse af, hvordan prisen på CO₂ kan påvirke konditioneringsprisen.

at urenheder i CO₂ ikke bare er en teknisk udfordring - det har direkte økonomiske konsekvenser. Hvis CO₂ skal bruges i industrien og opbevares sikkert i store mængder, kræver det en større forståelse af, hvor en global CO₂ infrastruktur kan designes for at muliggøre CO₂ fra forskellige kilder, uden at alt skal renses til den højeste renhedsgrad.

I den globale CO₂ infrastruktur skal der tænkes over, hvordan *source* og *sink* bliver matchet, så det bliver billigst for samfundet. Det åbner mange interessante spørgsmål om, hvorvidt alle kilder virkelig skal oprenses til samme grad, og om det skal i et fælles rør og kan "udligne" hinanden. Diskussionen kommer så ved, at den billigste løsning for samfundet måske skaber ulige fordelinger af udgifter mellem forskellige anlægsejere. For eksempel kan vi have to nærliggende anlæg, hvor det ene producerer CO₂ med mange urenheder og det andet ikke gør. Kan vi så nøjes med at oprense det ene og blande dem og derved nå kravene fra slutforbrugeren? Skal de to anlæg så dele udgiften på oprensningen af den ene strøm? En anden mulighed er at blande de to strømme sammen inden

konditionering. Muligvis kan det gøre det billigere at oprense den "beskidte" delstrøm, men det vil selvfølgelig blive dyrere for den "rene" delstrøm. Er CO₂-producenterne villige til at gå på kompromis med den billigste løsning? Spørgsmålet bliver: hvem skal betale for den renhed, der i sidste ende stilles krav om.

Kort sagt: Renhed koster, men det er en omkostning, vi ikke kan ignorere, hvis vi skal nå vores klimamål.

E-mail:

Isaac Appelquist Løge: isacl@kt.dtu.dk

Referencer

1. Neerup, R. *et al.* A Call for Standards in the CO₂ Value Chain. *Environ Sci Technol* **56**, 17502-17505 (2022).
2. Buit, L., Ahmad, M., Mallon, W. & Hage, F. CO₂EuroPipe study of the occurrence of free water in dense phase CO₂ transport. in *Energy Procedia* vol. 4 3056-3062 (2011).
3. Jensen, E.H. *et al.* The cost of impurities: A techno-economic assessment on conditioning of captured CO₂ to commercial specifications. *International Journal of Greenhouse Gas Control* **141**, 104309 (2025).



Foto: Wikimedia

Er kokain protoneret, når det binder til dopamintransporteren?

Vi har undersøgt, hvordan pH-forholdene er, når lægemidlet binder til dets vigtigste target.

Af Marie Louise Gram og Mikael Bols, Kemisk Institut, Københavns Universitet

Lægemidler eller ”drugs” virker ved at binde til proteiner og derved pacificere eller aktivere dem. Da mere end halvdelen af alle lægemidler indeholder en aminogruppe kunne noget tyde på, at aminogruppen er vigtig for binding til proteinet. Aminer er den organiske kemis baser, og det er derfor nærliggende at tænke sig, at en aminogruppe i et ”drug” reagerer med en syregruppe i proteinet og danner et salt (figur 1A). Alternativt kan aminen interagere med carboxylsyren og danne en hydrogenbinding (figur 1B).

Disse to situationer er, skønt ganske simple, ikke så lette at se forskel på, blandt andet fordi det kun er få nanomol

”drug”, der er bundet i proteinets bindingslomme. Men vi har, som diskuteret i vores tidligere artikel i Dansk Kemi, udviklet en metodik, hvorved det kan gøres [1]. Denne metode har vi nu brugt på kokain [2].

Kokain bliver protoneret, når det binder til sit vigtigste target, dopamintransporteren. Først, hvorfor er det overhovedet vigtigt at vide, om et lægemiddel, som for eksempel kokain, binder på den ene eller anden måde? Det er det fordi, når vi skal designe nye og forbedrede lægemidler, er det vigtigt at vide, om de skal ligne en positivt ladet forbindelse eller en neutral specie. Det har også betydning for, hvor stærk en base en aminogruppe i lægemidlet bør være for at give den bedste binding.

De fleste kender kokain (figur 2), et lille alkaloid fra kokaplanten, som

et berygtet misbrugsstof, men det er faktisk også et lægemiddel, der anvendes til bedøvelser i forbindelse med øjenoperationer. Medicinalkemisk er man interesseret i at lave antagonist af kokain, der kan anvendes i misbrugsbehandling, og i den forbindelse er en bedre forståelse af kokains interaktion med proteinet vigtig.

I vores metode sætter man en speciel gruppe, en antracen, på det lægemiddel, man vil undersøge, som fluorescerer, når lægemidlet er protoneret - eller rettere - den udsender ikke lys, når der er en aminogruppe tæt på, som har et frit elektronpar. Vi fremstillede kokain-analoger, hvorpå der var fastgjort antracener med en kæde af varierende længde og udstøbning til aminogruppen. Et af stofferne, **1** (figur 2), bandt med kokains target dopamintransporteren med høj

affinitet - faktisk 10-15 gange bedre end kokain. Samtidig har **1** den egenskab, at når dets aminogruppe er protoneret, fluorescerer den og udsender lilla lys. Vi kan derved se, hvad der sker, når **1** binder i bindingslommen af proteinet. Vi ser, at anthracengruppen begynder at fluorescere og altså, at stoffet **1** er protoneret, når det er bundet - altså er på formen **1, H⁺** (figur 2).

Nu ved vi, at **1** er protoneret i dopamintransporterens bindingslomme, men betyder det, at kokain er det? Strengt taget ikke, men i og med at **1** og kokain har meget lignende strukturer, og kokain er en betydeligt stærkere base, er det meget sandsynligt, at kokain også er protoneret.

pK_a-værdi og styrke af binding

En anden interessant ting vi fandt ud af, var, at den syregruppe kokain og **1** interagerer med i proteinet har en overraskende høj pK_a-værdi. Det kan man finde ud af ved at måle hæmningen af kokain, **1** og andre lignende inhibitorer ved forskellig pH [2]. Ved at plotte den reciproke hæmningskonstant mod pH får man en kurve (figur 3), hvor man kan aflæse syrekonstanterne af inhibitoren, som vi i forvejen kender, og den gruppe inhibitoren binder til. Den gruppe ved vi, er sidekæden på asparaginsyre nummer 79 i proteinet, og vi kan se, at den har pK_a 7.7-8.2 afhængig af, om proteinet er den menneskelige udgave eller fra en rotte.

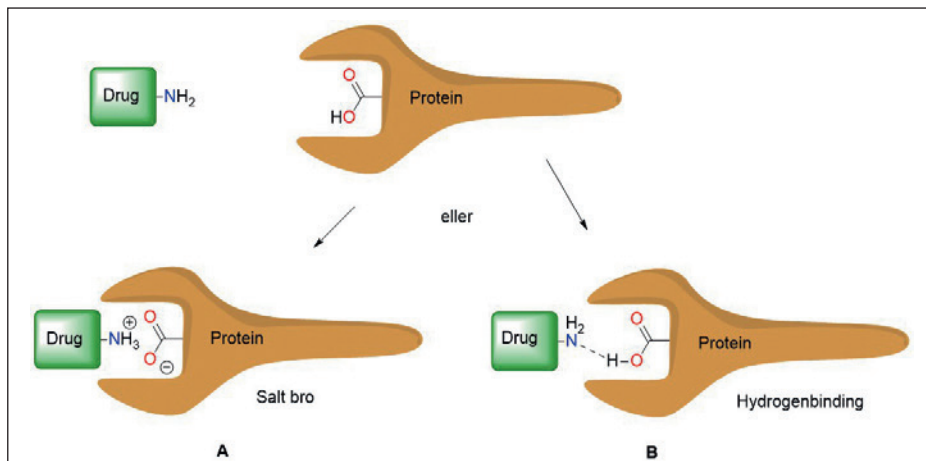
Det betyder, at syregruppen, når proteinets bindingslomme er tom, er protoneret, og må afgive sin proton for at kunne binde kokain. Det koster energi og gør, at bindingen mellem kokain og dopamintransporter er svagere, end hvis syre/basestyrken af de to bindingsgrupper var bedre tilpasset. Kokaplanen har altså ikke udviklet en inhibitor, der er specielt egnet til at binde til dopamintransporteren fra mennesket, hvilket jo passer med, at der findes syntetiske inhibitorer, der er 1.000 gange stærkere. Men den er god nok til, at vi stadig anvender kokain som lægemiddel, samt at det er et misbrugsdannende stof med stigende rekreativt forbrug verden over.

E-mail:

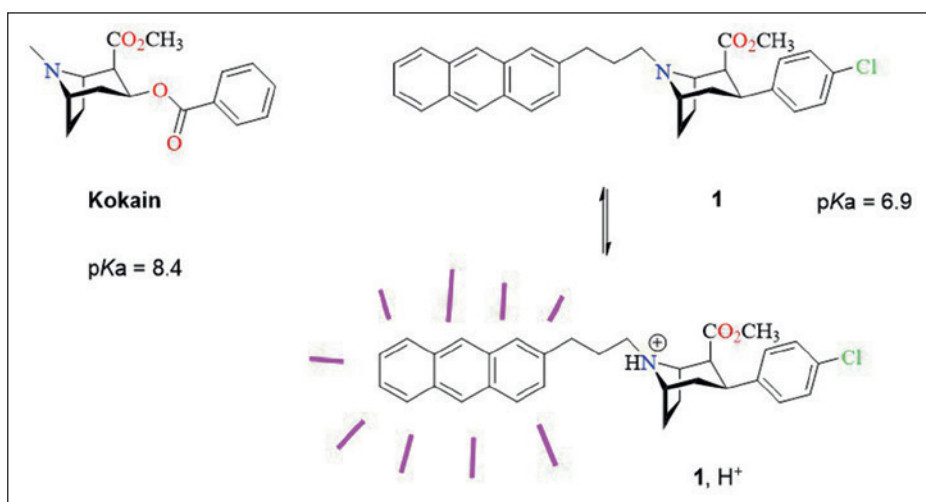
Mikael Bols: bols@chem.ku.dk

Referencer

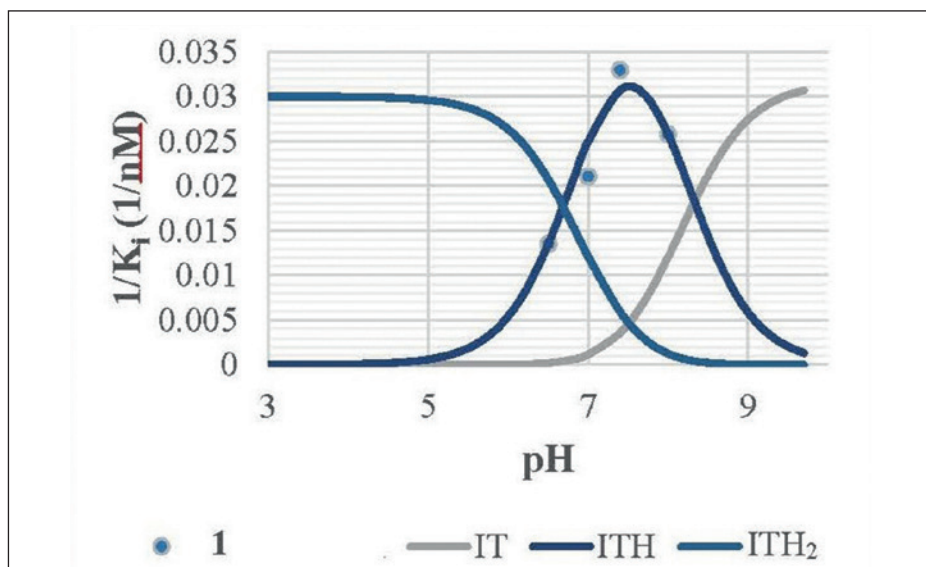
1. M.L. Gram and M. Bols, Måling af pH med inhibitorer, *Dansk Kemi*, 2023, **104**, 16-19.
2. M.L. Gram, J.M. Warren, E.L. Madsen, J.C. Nielsen, C.J. Loland and M. Bols, Is Cocaine Protonated When it Binds to the Dopamine Transporter?, *JACS Au*, 2025, DOI:10.1021/jacsau.4c00952.



Figur 1. Når et "drug" binder til sit target-protein, kan aminogruppen enten danne en saltbro eller en hydrogenbinding til proteinet.



Figur 2. Strukturen af naturstoffet og lægemidlet kokain og analogen **1**, som udsender lilla fluorescerende lys, når den er i den protonerede form **1, H⁺**. Både kokain og **1** er baser, hvor den konjugerede syre, altså den protonerede amin, har en pK_a-værdi på henholdsvis 8.4 og 6.9.



Figur 3. Diagram, der viser den reciproke hæmningskonstant for **1**'s hæmning af den humane dopamintransporter som funktion af pH (blå prikker). Data følger en kurve, der svarer til, at **1** binder til en gruppe med pK_a 8.2 på en måde, hvor de to grupper deler en proton (mørkeblå kurve). Vi kan samtidig se, at den ikke passer med en kurve, hvor både carboxylsyre og **1** er protoneret (blå), eller hvor ingen af dem er protoneret (grå).

Trinatriumhexafluor... *hvad for noget?*

I år fejrer man internt i IUPAC 20-året for offentliggørelsen af *The Red Book* (i det følgende blot "RB2005") med anbefalinger vedrørende uorganisk-kemisk nomenklatur. Er det noget at fejre? Var *den* noget at fejre? Burde IUPAC's Division VIII, som officielt hedder *Chemical Nomenclature and Structure Representation Division*, for længst have udsendt en opdateret version og trukket de mest kontroversielle forslag i RB2005 tilbage? Eller skal man netop ikke alt for ofte komme med nye regler, som lærebogsforfattere, tidsskriftredaktører, regulerende myndigheder, kemikaliefirmaer og undervisere principielt straks burde lægge sig efter?

Hvad var kontroversielt i RB2005?

Prisen for mest provokerende nye navn må nok gå til **dioxygenchlorid** for det, vi allesammen altid har kaldt chlor-dioxid. Også **heptaoxygendichlorid** og tilsvarende navne for brom- og iodforbindelser. I et muligvis ikke så vellykket forsøg på at hjælpe brugerne ved at simplificere, så man ikke skulle huske forskellige grundstofremser til forskellige navnetyper, flyttede man nemlig til nomenklaturformål oxygen fra nogle gange at stå mellem fluor og chlor til at stå altid mellem svovl og iod (eller astat, om man vil), så man altså ignorerede elektronegativitetskriteriet. Begejstringen i folket var ikke overvældende.

Støkiometriske navne og formler skulle i RB2005 ordnes primært alfabetisk (for positive og negative komponenter hver for sig). Dvs. kryolit (figur 1), med formelen Na_3AlF_6 , som alle ville kalde trinatriumaluminiumhexafluorid, skulle ifølge reglerne være aluminiumtrinatriumhexafluorid med formlen AlNa_3F_6 . Likes udeblev... Ville man beskrive det som dobbeltsalt, blev det til formlen $\text{AlF}_3 \cdot 3\text{NaF}$ og navnet aluminiumtrifluorid — natriumfluorid (1/3), en notation med en lang, lang bindestreg (en "em" dash), som er en notorisk pestilens rent typografisk.

RB2005 ændrede endvidere betegnelserne (præfikserne) for anioniske ligander i kompleksforbindelser som fluorid, chlorid, bromid, iodid, cyanid



Figur 1. Kryolit, som de fleste vil have hørt om i år, også om etymologien bag mineralnavnet (*kryos* = is, *lithos* = sten). Her handler det imidlertid hverken om historie eller politik, men om kemisk nomenklatur, hvor kryolit er et udmærket eksempel, diskuteret i hovedteksten.

Foto: Creative Commons Attribution 3.0 Unported license, Attribution: Kelly Nash. Foto fundet via de.wikipedia 6/3-2025 og kopieret fra Wikimedia Commons, fil Cryolite-439936.jpg. Billedet er ikke ændret. Det viser kryolit fra Ivittuut, Grønland, med indlejret brunt siderit (jernspat, dvs. FeCO_3).

osv. fra "o-formerne" (fluoro, chloro osv.) til "ido-formerne" (fluorido, chlorido osv.). Igen: Det var for at gøre det enklere (fluorid → fluorido osv. snarere end fluorid → fluoro) og lettere at skelne fra substituentpræfikserne fluoro, chloro osv. i organisk-kemisk substitutiv nomenklatur (som på dansk bare er fluor, chlor osv.). Og igen kan man ikke sige, at IUPAC blev oversvømmet af sympatitilkendegivelser.

Kryolit indeholder ionen $[\text{AlF}_6]^{3-}$, så navnet som kompleksforbindelse skulle nu være trinatriumhexafluoridoaluminat(3-), som nogen var ved at få galt i halsen i overskriften.

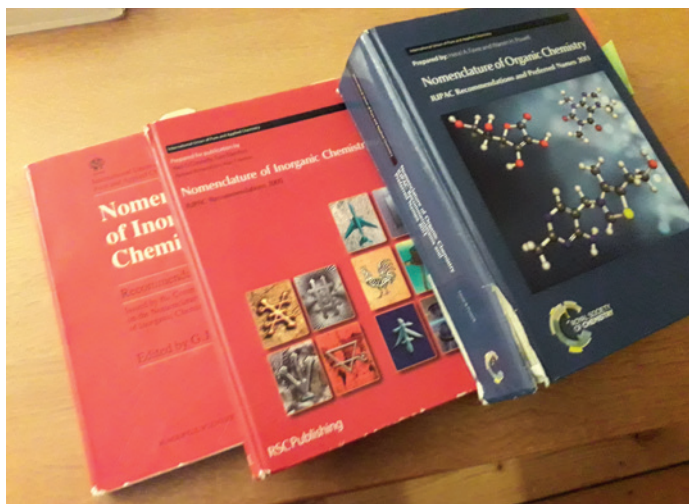
Ladningstal eller oxidationstrin angivet ved romertal?

Hedder det jern(II)chlorid eller jern(2+)chlorid? Svaret er ja. Med andre ord, RB2005 tillod begge former og angav

ikke regler for et valg mellem dem. Hvis man ser sig lidt rundt i periodesystemet, er der rimeligvis forbindelser, hvor man ville vægre sig ved at bruge ladningstal, lad os sige phosphor(V)oxid eller svovl(I)chlorid. Man ville næppe bruge phosphor(5+) eller svovl(1+) her, da disse ioner ikke er til stede i de pågældende forbindelser. Nogle ville nok foretrække diphosphorpentaoxid (eventuelt tetraphosphordecaoxid) eller disvovldichlorid, navne som jo også siger lidt mere.

Hvad så med jern(3+)chlorid? Tja, det er formelt et korrekt navn. Er der ioner Fe^{3+} til stede? Forbindelsen indeholder i fast fase nogle udstrakte chloridojernenheder i en lagstruktur og i gasfasen dimerer og monomerer, se for eksempel [1], så måske vil man hellere bare kalde den jern(III)chlorid.

Kort sagt: at både ladningstal og romertal er tilladte, betyder ikke, at



Figur 2. De røde bøger fra hhv. 1990 og 2005 og den blå kæmpe fra 2013. Godt brugte arbejds eksemplarer.

kemikere vil anvende dem i flæng og tillægge dem helt samme betydning.

For restriktiv?

I RB2005 anvistes følgende notationer vedrørende oxidationsstal noteret som romertal: *enten* på linjen i parentes efter grundstoffets navn *eller* i formler som superskript, for eksempel: mangan(II)dimangan(III)tetraoxid eller $\text{Mn}^{\text{II}}\text{Mn}^{\text{III}}_2\text{O}_4$. Det har vist sig vanskeligt at bekæmpe hybridnotationen Mn(II), mens mangan^{II} nok er sjældnere. Men er der nogen god grund til at udelukke disse to sidste?

“Preferred names” eller ikke?

Som nævnt i faktaboksen angav *The Blue Book* foretrukne navne, nærmere betegnet for alle de organiske forbindelser, der blev navngivet systematisk ved *substitutiv* nomenklatur samt et par andre nomenklaturtyper. RB2005 havde *ikke* foretrukne navne. Hvorfor ikke? Og hvad med den næste røde bog?

Et problem ville være støkiometriske navne, hvor der er et antal lige gode muligheder:

- jern(II)chlorid, jern(2+)chlorid, jern(II)chlorid
- phosphorpentaoxid, diphosphorpentaoxid, tetraphosphor-decaoxid, phosphor(V)oxid – dækker disse navne præcis det samme?

Og hvad med de i alt fire systematiske navne for kryolit ovenfor?

Så kort og godt er det svært at forestille sig foretrukne støkiometriske uorganiske navne. Koordinationsnavne er derimod strukturelle, og man kunne godt forestille sig at lave regler for foretrukne navne for *koordinationsenheder*, selv om jeres ærbødige ikke umiddelbart er sikker på, at det her i 2020'erne opfylder et behov og er besværet og tiden værd. Hvis blot et navn ud fra reglerne éntydigt specificerer en bestemt forbindelse, er det formentlig med nuværende computerteknologi ligegyldigt, om det også er unikt. Og når navngivne koordinationsenheder indgår i støkiometriske forbindelser, har vi balladen igen: Skal kryolit hedde natriumhexafluorido...osv. eller trinatrium...osv.

Nærværende forfatter er ikke bekendt med opfølgende studier af udbredelsen af de foretrukne navne fra BB2013. En kendsgerning er, at det ikke er ualmindeligt, at navne på internettet anføres som IUPAC-navne uden at være det, og nogle gange endda som foretrukne uden at være det.

På vej mod den næste røde bog

I Division VIII er man nu, med tætte forbindelser til kolle-

ger i Division II, IV og V, i gang med at forberede den næste røde bog. Læserne må meget gerne tænke over, hvad der kunne være godt at få tilføjet eller ændret i bogen og/eller den ledsagende *Brief Guide* nævnt i faktaboksen. Lige nu er der et arbejde i gang med at gennemarbejde og udvide reglerne for navngivning med κ -konstruktioner, som er et redskab til specifikation af bindinger mellem ligander og centralatomer. Andre emner, der vil blive tilgodeset, er uorganiske polymerer; *metallacycles* (engelsk; hvad mon de skal hedde på dansk?), dvs. forbindelser, hvor et eller flere atomer fra d-blokken er indsat i ringe, der i øvrigt består af carbonatomer og heteroatomer fra grupperne 15 til 17; polyboraner; faststofforbindelser, herunder emner som *nanopartikler* og *carbonnanorør*; stereokemi af især koordinationsforbindelser m.m.

Ture Damhus, formand for Nomenklaturudvalget,
editor@kemisknomenklatur.dk

TD indrømmer sig medskyldig: var som frivillig i bemeldte Division VIII medforfatter til RB2005, til *Principles* og til begge *Brief Guides* omtalt i faktaboksen.

Referencer

1. C.E. Housecroft, A.G. Sharpe: *Inorganic Chemistry* [5th Edition, Pearson 2018]. Section 21.9, Group 8: iron.
2. <https://iupac.org/what-we-do/books/redbook>.
3. <https://iupac.qmul.ac.uk/BlueBook/PDF>.
4. <https://iupac.org/what-we-do/books/principles>.
5. <https://iupac.org/what-we-do/nomenclature/brief-guides>.
6. T. Damhus, P.J. Henrichsen: Nybrud i kemisk retskrivning, Dansk Kemi 106 # 1 (2025) 22-24.

Nogle af IUPAC's forskellige nomenklaturudgivelser

RB2005 er den fjerde i en række af uorganisk-kemiske nomenklaturanbefalinger, der kom i hhv. 1957, 1970, 1990 og 2005. Selv er RB2005 tilgængelig som PDF-fil [2]. I RB2005, afsnit IR-1.6, gav man en oversigt over de vigtigste ændringer i forhold til RB1990.

I Division VIII arbejdede man også med *The Blue Book* (organisk-kemisk nomenklatur) frem til 2013, hvor den 2,76 kilo tunge bog (jf. figur 2) kom på markedet. Den efterfulgte den blå bog fra 1979 og en lyseblå bog fra 1993. Heldigvis er der nu en online-version af mastodonten tilgængelig [3].

BB2013 indeholdt et meget omfattende system af anbefalinger af *preferred names*, lad os kalde dem *foretrukne navne* på dansk. De var fastlagt som svar på kritik af IUPAC for at give for mange muligheder for acceptable navne – hvilke navne skulle man bruge i patentskrifter, lovgivning, tidsskriftartikler osv.? Der var dog ikke i BB2013 foretrukne navne for aminosyrer, carbohydrater, naturstoffer m.fl., hvor man har nogle vedtagne ikkesystematiske stamnavne og særlige regler for brug af dem.

I bogen *Principles of Chemical Nomenclature* [4] finder man korte fremstillinger af de vigtigste typer af nomenklatur og i Table P10 deri en nyttig liste over trivialnavne med oversættelser til systematiske navne. Endnu kortere destillater af anbefalingerne findes i de såkaldte *Brief Guides* for uorganisk og organisk nomenklatur og polymernomenklatur [5].

Kemisk Forenings Nomenklaturudvalg blev grundigt introduceret i boks 1 i [6]. På udvalgets hjemmeside (kemisknomenklatur.dk) findes danske oversættelser af de to *Brief Guides* for uorganisk og organisk nomenklatur.

Bliv fri for begroning: Del 2

Overfladens rolle.

Af Isaac Appelquist Løge¹ og Benaiah U. Anabaraonye²

¹ DTU Kemiteknik, Center for Energy Ressource Engineering (CERE)

² DOTC, Danish Offshore Technology Center

I den første del af denne artikelserie undersøgte vi, hvordan uønsket begroning - fouling - opstår i forskellige systemer, og hvilke konsekvenser det kan have. Vi så, hvordan geotermiske anlæg, membranfiltrering og varmevekslere lider under mineralaflejninger. I denne artikel vender vi blikket mod et afgørende aspekt i, hvorfor fouling opstår: overfladen, hvorpå begroningen foregår.

Overfladens betydning for begroning

Måden fouling opbygger sig på over tid, afhænger ikke kun af væskens sammensætning, men også af selve overfla-

den, som det sætter sig på. Overfladens struktur og egenskaber kan enten forværre eller mindske begroning [1]. Figur 1 illustrerer forskellige overflader, hvor begroning kan ske. Her vises eksempler på mønstrede overflader og forskellige materialer.

Forskning viser, at en ru overflade kan accelerere hastigheden af begroning, fordi små ujævnheder i en overflade kan give krystallerne flere steder at fæstne sig på. Desuden kan krystaller, der er groet på en ru overflade, vokse sammen på en mere kaotisk måde, hvilket gør, at de kan binde sig tættere til hinanden [2]. På den anden side kan en glat overflade reducere risikoen for ophobning, fordi færre krystalstrukturer kan få fodfæste.

Men det er desværre ikke så simpelt. Når man skal bestemme en overflades påvirkning på begroning, er der mange faktorer, som spiller ind. For bedst

muligt at blive fri for begroning, skal man derfor have godt styr på, hvilken indflydelse overfladen har.

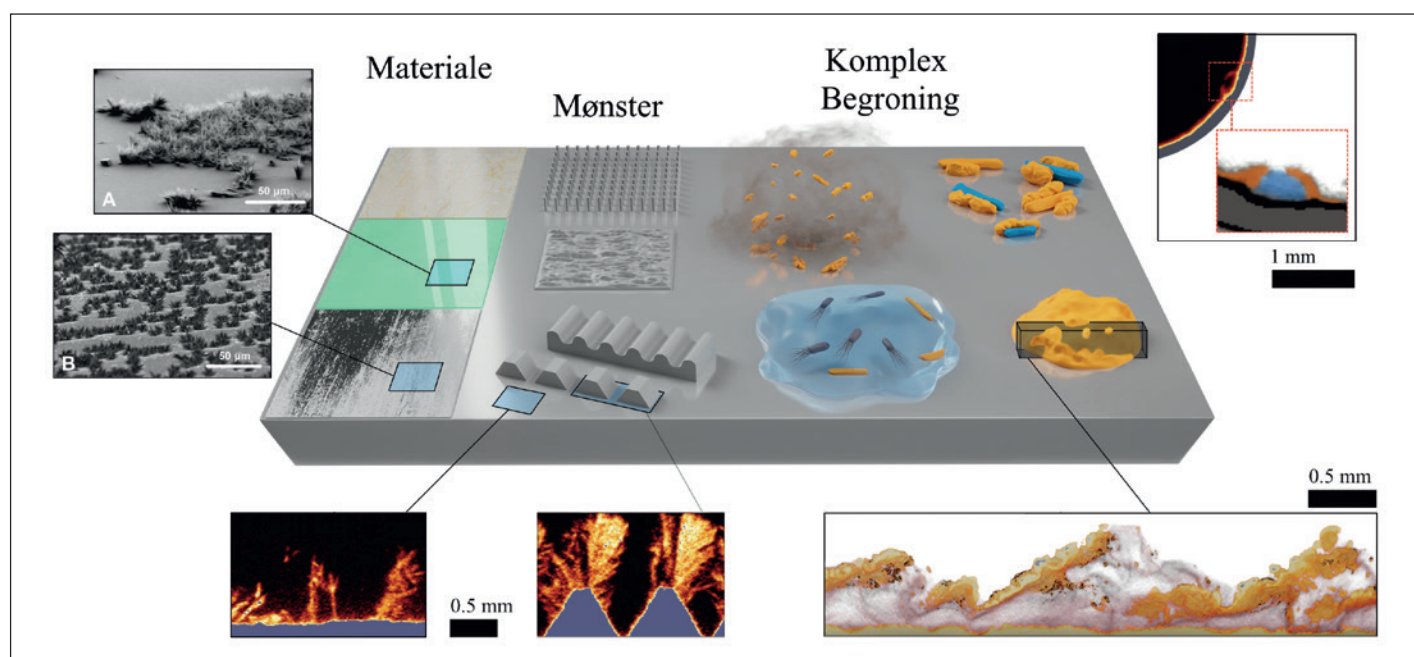
Mønstrede overflader kan minimere begroning

Forskere har vist, at hvis man laver et strategisk design af sin overflade, kan det have en mindskende effekt på fouling [3]. Dette kan for eksempel være ved at skære sin overflade i et bestemt mønster. Man kan lave sin overflade på en måde, som fremmer krystallernes løsrivelse. På den måde vil man få mindre vækst over tid. Det kan gøres ved, at en overflade skaber turbulens i væsken, som gør, at der er en større kraftpåvirkning på overfladen, og at krystallerne løsner sig lettere [4]. Dette betyder, at i stedet for en tyk, fastsiddende belægning, kan der opstå en cyklus af opbygning og løsrivelse, hvilket gør det lettere at fjerne begroningen ved rengøring eller naturlig erosion.

Overfladebehandling som en løsning på begroning

Udover at lave mønstrede overflader, kan man også coate sin overflade. For at mindske fouling har forskere udviklet en række coatings, der ændrer overfladens egenskaber. To eksempler på dette er:

- *Liquid infused surfaces (LIS)*: Inspireret af naturen har forskere udviklet overflader, der imiterer blade med vandafvisende egenskaber og forhindrer fastsiddende belægninger [5].
- *Magnetiske belægninger*: Visse materialer kan anvendes til at skabe en



Figur 1. Overfladens materialesammensætning og mønster kan påvirke, hvordan begroning opstår. Højre: Her vises eksempler på, hvordan enten plast eller stål kan give begroning med meget forskellige former. Elementer i figuren er genbrugt med tilladelse fra Jin et al. [8] og Løge et al [9-11].

dynamisk interaktion med aflejringer, der gør dem lettere at fjerne [6].

Liquid Infused Surfaces (LIS)

En klassisk tilgang til at skabe LIS er at anvende en porøs overflade - for eksempel en polymer- eller metalstruktur - som bliver infunderet med en væske, der har lav overfladespænding. Ideen er inspireret af kødædende planter, der udskiller et tyndt lag væske på deres overflade, så insekter ikke kan få fodfæste. I praksis kan man bruge silikone- eller fluorbaserede olier, der trænger ned i de mikroskopiske porer, så overfladen fremstår jævn og "glat" for eventuelle aflejringer. Materialer som PTFE (teflon) fungerer ofte som grundlag for disse porøse strukturer, fordi de er hydrofobe og kemisk stabile.

Fordelen er, at de faste partikler i væsken eller krystalstrukturen har svært ved at binde sig på en overflade, der hele tiden er "våd" med en uforenelig væske. På den måde bliver aflejring enten helt forhindret eller i det mindste løst, så den er nemmere at skylle væk. LIS-teknologien er særligt interessant for medicinsk udstyr, fødevareproduktion samt varmevekslere, hvor man ønsker så lidt begroning som muligt og i øvrigt vil undgå aggressive rengøringsmetoder.

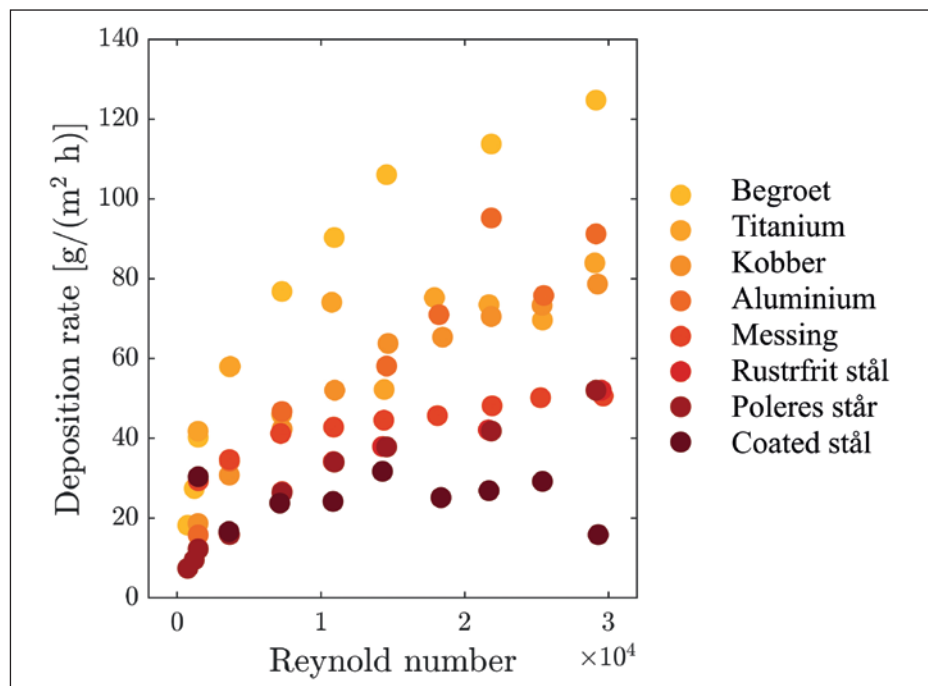
Magnetiske belægninger

Magnetiske belægninger er et andet lovende værktøj i kampen mod fouling. Her integreres magnetiske partikler - for eksempel jernoxid (Fe_3O_4) - i overfladestrukturen eller i en separat coating, der kan påføres det ønskede materiale. Fordelen er, at man kan bruge eksterne magnetfelter til at påvirke aflejringerne på overfladen: Krystaller eller biologisk materiale, som forsøger at sætte sig, kan ofte ikke få stabilt fæste, hvis belægningen hele tiden "vibrerer" eller forstyrres magnetisk.

I nogle systemer kan man endda skifte polarisering eller intensiteten af magnetfeltet, så belægningen nærmest "ryster" potentielle aflejringer væk. Teknologien er stadig under udvikling, men viser lovende resultater i laboratorieforsøg.

Hvorfor er forudsigelse af overfladens rolle i fouling så udfordrende?

Selvom vi ved meget om, hvordan fouling dannes, forbliver forudsigelsen af begroningens vækst en udfordring. Der er en kompleks interaktion mellem krystaller og overflader, hvilket gør, at vækstrater er svære at forudsige. Hastigheden begroning kan ske med, kan variere op til fem gange, alt efter



Figur 2. Begroning af CaSO_4 på forskellige overflader, testet ved en række flowhastigheder.

hvilken overflade de gror på [7]. Figur 2 viser, hvordan forskere testede begroning af CaSO_4 på forskellige overflader og så forskellige vækstrater.

Dertil kommer, at når krystallerne har nået en bestemt størrelse, vil de også begynde at knække af. Den styrke, som de har hæftet sig fast på overfladen, og dermed hvor meget der skal til at rive dem, er ikke særlig godt forstået. De fleste modeller fokuserer primært på, hvor hurtigt et lag dannes, men ignorerer den løsrivelse, der finder sted. Ved at inkludere mekanismer for, hvordan belægninger løsriver sig, kan vi opnå mere præcise beregninger og dermed bedre planlægge vedligeholdelse og forebyggende behandlinger.

Hvordan kan overflader hjælpe med, at du bliver fri for begroning?

For at bekæmpe fouling effektivt er det ikke nok blot at fjerne de opbyggede lag - vi skal forstå samspillet mellem væske, overflade og tid. Fremtidens løsninger vil sandsynligvis kombinere forbedrede overfladematerialer med mere præcise modeller, der kan forudsige både vækst og løsrivelse af belægninger.

I takt med at forskningen skrider frem, bliver vi klogere på, hvordan vi kan bruge overfladevidenskab til at designe systemer, hvor fouling ikke blot reduceres, men bliver en forudsigelig og håndterbar del af vedligeholdelsen.

E-mail:

Isaac Appelquist Løge: isacl@kt.dtu.dk

Referencer

1. Bogacz, W. *et al.* Impact of roughness, wettability and hydrodynamic conditions on the incrustation on stainless steel surfaces. *Appl Therm Eng* **112**, 352-361 (2017).
2. Keysar, S., Semiat, R., Hasson, D. & Yahalom, J. Effect of Surface Roughness on the Morphology of Calcite Crystallizing on Mild Steel. *J Colloid Interface Sci* **162**, 311-319 (1994).
3. Eroini, V., Neville, A., Kapur, N. & Euvrard, M. Preventing Scale Formation Using Modified Surfaces. in *Corrosion* 1-15 (2011).
4. Løge, I.A. *et al.* Scale attachment and detachment: The role of hydrodynamics and surface morphology. *Chemical Engineering Journal* **430**, 132583 (2021).
5. Villegas, M., Zhang, Y., Abu Jarad, N., Soleymani, L. & Didar, T.F. Liquid-Infused Surfaces: A Review of Theory, Design, and Applications. *ACS Nano* **13**, 8517-8536 (2019).
6. Masoudi, A., Irajizad, P., Farokhnia, N., Kashyap, V. & Ghasemi, H. Antiscaling Magnetic Slippery Surfaces. *ACS Appl Mater Interfaces* **9**, 21025-21033 (2017).
7. Løge, I.A. & Anabaraonye, B.U. The importance of detachment processes in modelling crystallization fouling. *Chemical Engineering Journal* **497**, 154642 (2024).
8. Jin, H.Q., Athreya, H., Wang, S. & Nawaz, K. Experimental study of crystallization fouling by calcium carbonate: Effects of surface structure and material. *Desalination* **532**, 115754 (2022).
9. Løge, I.A., Anabaraonye, B.U. & Fosbøl, P.L. Growth mechanisms for composite fouling: The impact of substrates on detachment processes. *Chemical Engineering Journal* **446**, 137008 (2022).
10. Løge, I.A. *et al.* Scale attachment and detachment: The role of hydrodynamics and surface morphology. *Chemical Engineering Journal* **430**, 132583 (2021).
11. Løge, I.A. *et al.* Revealing the complex spatiotemporal nature of crystal growth in a steel pipe: Initiation, expansion, and densification. *Chemical Engineering Journal* **466**, 143157 (2023).

Kompakt pumpe kombinerer høj ydelse med støjsvag drift

Pfeiffer Vacuum+Fab Solutions, et medlem af den globale Busch Group, har lanceret HiScroll 46, et nyt medlem af HiScrollpumpe-serien. Nyheden fås med enkelt- og 3-fasede motorer og har et lille fodaftryk, stærk ydeevne og støjsvag drift. Den er 18 kilo lettere end sammenlignelige produkter på markedet, hvilket gør den både mere effektiv og brugervenlig. Størrelse gør den ideel til analytiske og industrielle applikationer, laboratorier, forskningsfaciliteter og endda Semicon-anvendelser, hvor pladsen er trang.

En af de vigtige egenskaber ved den nye pumpe er dens støjsvage drift. Den enfasede motor har et lydtryksniveau på kun 50 dB(A), hvilket gør den til en

af de mest støjsvage vakuumpumper på markedet. Ydermere anvender den kun 280W, og sluger markant mindre energi end mange andre scroll- eller flertrins Roots-vakuumpumper.

Den er udstyret med et Harting-stik og kræver kun en enkelt ledningsopsætning for at matche den lokale strømforsyning. Efter denne indledende installation kan pumpen nemt betjenes ved blot at tage stikket ud og sætte det i igen.

HiScroll 46 har en høj tolerance over for vanddamp. Den specielle patent-anmeldte gasfunktion muliggør en vanddampkapacitet på op til 530 g/t for enkeltfaset strømforsyningsvariant. Dette gør den til en passende valgmulighed til anvendelser med højt vandindhold,



såsom frysetørring og kryogene processer. Dens alsidighed strækker sig til anvendelse inden for massespektrometri, coating, ætsning eller destillation.

Yderligere oplysninger:

Pfeiffer Vacuum+Fab Solutions
PR-ansvarlig Sabine Neubrand

E-mail:

Sabine.Neubrand@pfeiffer-vacuum.com

KORT NYT

Plantemikrobiom-forsker modtager Novonesis Biotechnology Prize 2025

Den tyske professor og mikrobiolog Julia Vorholt modtager Novonesis Biotechnology Prize. Hendes arbejde har ændret måden, vi tænker plantesundhed på. Hendes innovative forskning i plantemikrobiomer vurderes at have potentiale til at revolutionere landbruget.

Planter lever ikke i isolation. Ligesom vi mennesker er afhængige af tarmbakterier til vores fordøjelse og immunitet, har planter også hele samfund af gavnlige mikrober, der lever både på og inden i dem. Disse allierede, der er usynlige for det blotte øje, hjælper planterne med at bekæmpe patogener, modstå stress fra det omkringliggende miljø og vokse mere kraftigt.

Men hvordan fungerer disse mikrobielle samfund? Og kan vi udnytte deres styrke til at gøre landbruget mere bæredygtigt? Netop disse spørgsmål har været drivkraften bag professor Julia Vorholts forskning. Udgangspunktet for Julia Vorholts forskning har været at isolere og identificere individuelle bakterier (i alt flere hundrede forskellige arter fra blade), hvilket til sidst gjorde det muligt for hende og hendes team at konstruere afgrænsede mikrobielle samfund, der koloniserer planter under kontrollerede forhold i laboratoriet. Ved at studere dem både hver for sig og i et væld af kombinationer afdækkede teamet interaktioner,



der fremmer planternes modstandsdygtighed og vækst. Hendes team har også opdaget, at planter bruger specifikke molekyllære komponenter til at opretholde et afbalanceret mikrobiom - parallelt med hvordan forstyrrelser i immunitet kan føre til dysbiose i det menneskelige mikrobiom.

- Det er en meget stor ære at modtage denne pris, siger Julia Vorholt, der er professor i mikrobiologi ved ETH Zurich. Denne anerkendelse er meget overvældende, og den understreger vigtigheden af at forstå mikrobielle samfund og deres rolle i plantesundhed, tilføjer hun.

Kilde: Novo Nordisk Fonden

Om Novonesis Biotechnology Prize

Novonesis Biotechnology Prize tildeles som en anerkendelse af fremragende forskning eller teknologiske bidrag, der fremmer udviklingen af bioteknologisk videnskab til innovative løsninger. Prisen uddeles årligt af Novo Nordisk Fonden og har til formål at øge kendskabet til bioteknologisk grundforskning og anvendt forskning.

Prisen ledsages af 5 millioner kroner, der omfatter:

- 4,5 millioner kroner til prismodtagerens forskning
- 0,5 millioner kroner til prismodtageren personligt.

Derudover bevilger fonden 0,5 millioner kroner til afholdelse af et internationalt symposium inden for modtagerens forskningsfelt(er).



KEMISK FORENING

Universitetsparken 5
DK-2100 København Ø

www.chemsoc.dk

The Danish Chemical Society
Founded 1879

Årsmøde i Kemisk Forening

Årsmødet i Kemisk Forening finder sted den 19. juni 2025 i Mærsk Tårnet, Københavns Universitet. Dette års møde vil byde på en spændende hovedsession med fremtrædende talere:

- Prof. Sophie Beeren (DTU, Danmark)
- Prof. Sabine Flitsch (University of Manchester, UK)

Deltag sammen med førende forskere, branchefolk og studerende i en dag med banebrydende diskussioner, netværk og videnskabelig udveksling.

For mere information, besøg vores hjemmeside: kemiskforening.com.

iGAS

Interessegruppe for Gasanalyse
afholder i samarbejde med IDA Kemi temamøde om

IDA
Kemi™

Klimaforandringer og deres virkninger

Tirsdag den 27. maj 2025 kl. 13.00 - 17.00

Auditoriet, NFA (Det Nationale Forskningscenter for Arbejdsmiljø), Lersø Parkallé 105, DK-2100 København Ø

Vær med til det næste symposium om virkningerne af klimaforandringerne og mekanismerne bag dem. Vi skal høre mere om klimamodeller og deres fremskrivninger af klimaforandringer samt havniveaustigning og dens potentielle påvirkninger. Ud over effekterne vil mekanismerne bag dem,

herunder arktiske metanemissioner samt betydningen af flygtige organiske stoffer fra planter, blive dækket. Vi vil også høre om kausal inferens og neurale netværk anvendt på det marine kulstofkredsløb og se på danske emissionsopgørelser af klimagasser.

- | | | |
|---------------|--|------------------------------|
| 13.00 | Welcome and introduction | Jakob Klenø Nøjgaard, NFA |
| 13.10 | Climate modeling | Eigil Kaas, NBI |
| 13.35 | Climate models and projections of future climate | Peter Langen, AU |
| 14.00 | Danish Projections: Earth's Ice Sheets and Multi-Meter Sea-Level Rise | William Colgan, GEUS |
| 14.25 | Causal Inference and Neural Networks applied to past & future of the marine carbon cycle | Marcus Jochum, NBI |
| 14.50 | Coffee/tea/cake | |
| 15.15 | Danish Emission Inventories for greenhouse gasses | Ole-Kenneth Nielsen, AU |
| 15.40 | Arctic methane emissions | Torben Røjle Christensen, AU |
| 16.05 | Plant VOC emissions and climate change | Riikka Rinnan, KU |
| 16.30 – 17.00 | Questions, summary, conclusion | Jakob Klenø Nøjgaard, NFA |

Alle er velkomne. Der er ingen mødeafgift.

Tilmelding skal foretages senest onsdag den 21. maj 2025 til:

Jakob Klenø Nøjgaard, NFA, e-mail: jkn@nfa.dk eller IDAs mødetilmelding:

<https://ida.dk/arrangementer-og-kurser> – søg på arr. nr.: 360240

Ingeniørforeningen, IDA | Kalvebod Brygge 31-33 | 1780 København V | Tlf.: 33 18 55 23

Luka Katrine Agerbo | website: ida.dk | e-mail: luka@ida.dk

Intelligent Chemistry Biolab A/S Automation Specialist

Biolab A/S Custom Solutions

Liquid dispensing - Vial handling - Measurement of weight- pH - and a lot more...

JASCO

Advanced Spectroscopic & Purification Solutions

SP Scientific

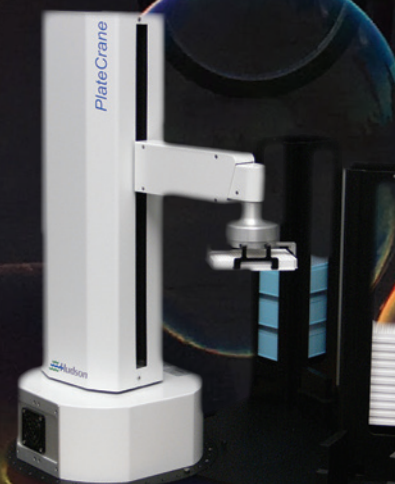
Automated Sample Concentration - Freezedrying

Gilson and Hudson Robotics Inc.

Advanced Automation solutions.

Rheosense - Viscosity on 15ul

Advanced Viscosity profiles



The only limitation is your imagination



Biolab A/S
Sindalsvej 29
DK-8240 Risskov
+45 8621 2866
sales@biolab.dk
www.biolab.dk