

A low-angle photograph looking up into the canopy of a tree. The leaves are a mix of vibrant green and bright yellow, indicating autumn. The dark, intricate branches of the tree crisscross the frame against a clear blue sky. The lighting is bright, creating a sense of depth and texture in the foliage.

Bæredygtig
kemi i fremtiden

Udviklingen i den kemiske forskning har afgørende indflydelse på hele samfundets udvikling. Kemisk viden har allerede ført til en langt bedre udnyttelse af de naturligt forekommende resurser. Med syntesen af medikamenter har kemien nedbragt dødeligheden hos mennesker og dyr, og den fører os fortsat mod endnu ukendte muligheder. Dette kapitel giver et indblik i, hvordan kemi kan bidrage til et mere bæredygtigt samfund.

Kemiens oprindelse

Ca. 500 år før Kristus fremførte den græske filosof Demokrit begrebet atom (atom betyder udelelig), som den ultimative byggesten hvoraf alt bestod. Begrebet blev dog hverken accepteret af datidens førende filosof Platon eller af hans elev Aristoteles. Aristoteles udbredte i stedet idéen om, at alt jordisk udgår fra fire elementer: jord, luft, ild og vand. Denne opfattelse var dominerende i mange århundreder, og ud fra det udgangspunkt forsøgte alkymister at fremstille guld fra jern. Først mange århundreder efter Aristoteles' død publicerede Dalton i 1803 sin atomteori, og efterfølgende kom Mendeleevs periodiske system, som i dag rummer over 100 grundstoffer. Daltons atomteori anses normalt for starten på den moderne kemi, og siden da har kemien fået en stadig større plads og betydning i samfundet.

I kølvandet på forskningens resultater er der dog hyppigt fulgt en del vanskeligheder og debat. Nogle diskussioner har haft etisk karakter, som brugen af genmodificering, andre resultater har ført til mere håndgribelige problemer som forurening samt øget belastning af naturressourcerne.

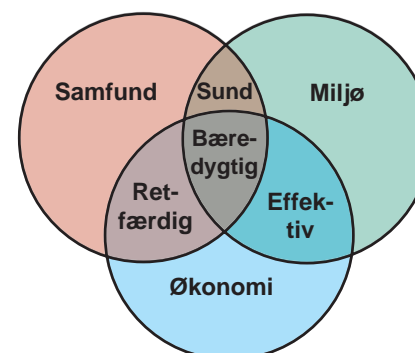
Hvad er en bæredygtig udvikling?

FNs Verdenskommission for Miljø og Udvikling definerede i Brundtlandrapporten "Vores fælles fremtid" (1987) begrebet *bæredygtig udvikling*. "En udvikling som opfylder den nuværende generations behov uden at bringe fremtidige generationers muligheder for at opfylde deres behov i fare."

Det er selvfølgelig uhyre vanskeligt at afgøre, hvilken betydning det har for fremtidens generationer, at vi i dag søger at opfylde vores behov. Hjælper vi fremtidens befolkning ved at udvikle samfundet, eller ødelægger vi det for dem ved at opbruge en del af de resterende resurser? Nedenstående figur illustrerer sammenhængen mellem samfund, miljø og økonomi, og hvad der kræves for at opnå en bæredygtig udvikling.

Figuren opererer med tre centrale udviklingsmæssige behov; samfundsmæssige, miljømæssige og økonomiske. Udvikling i den enkelte gruppe er isoleret ikke meget værd, men hvor grupperne overlapper hinanden, skabes en mere positiv udvikling. Således angives for eksempel, at hvor der er overlap mellem samfund og miljø skabes en sund udvikling.

Denne udvikling kan imidlertid være økonomisk uhensigtsmæssig. Først hvor der er samspil mellem alle tre områder, kan man tale om en egentlig bæredygtig udvikling.



Bæredygtig udvikling kræver synergi mellem samfund, miljø og økonomi. Først hvor der er samspil mellem alle tre områder, kan man tale om en egentlig bæredygtig udvikling.

Et af problemerne med fortolkningen af, hvorvidt noget er bæredygtigt eller ej, er, at dette afhænger af tidspunktet, hvor man anskuer

resultatet. At vurdere fremtidens udvikling er selvfølgelig særdeles problematisk. Skulle det eksempelvis ske, at fusionsenergi realiseres som fremtidens næsten ubegrænsede energikilde, og at CO₂-koncentrationen i atmosfæren derved bevæger sig tilbage til tidligere niveauer, vil vi have al den energi, vi har brug for, og samtidigt have undgået uoprettelige skader på klimaet som følge af drivhuseffekten. Hvis dette scenarium realiseres, vil det derfor faktisk være bæredygtigt at anvende alle jordens fossile energireserver som kul, olie og naturgas her i nutiden. Vi kan imidlertid ikke se ind i fremtiden, så vores udgangspunkt for at tale om en bæredygtig udvikling beror udelukkende på, om tiltagene virker bæredygtige i dag.

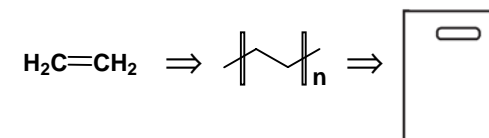
Hvordan anvendes de fossile resurser, og er det bæredygtigt?

I dag benyttes 5-10 % af de indvundne fossile resurser til fremstilling af mere end 95 % af de kemikalier, der indeholder carbon. I USA benyttes 60 % af de fossile resurser, som ikke anvendes til energi, til petrokemiske reaktioner. Ved petrokemisk menes kemiske reaktioner,

Dagligdagsprodukter med petrokemisk baggrund

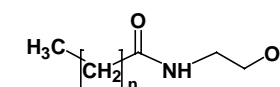
Plastik

En plastikpose, som den man køber i supermarkedet, er lavet af polyethylen, der består af mange ethenenheder. Kulbrintene ethen (CH₂CH₂) er den simpleste monomer til polymerisering, og den fremstilles primært ud fra råolie.



Shampoo

I mange shampooer tilsættes forbindelser, som stammer fra petrokemiske processer. I den senere tid er nogle af disse blevet mistænkt for, sammen med andre forbindelser, at danne kræftfremkaldende stoffer. Som følge heraf substitueres disse stoffer i højere grad med udvalgte naturstoffer (f.eks. cocoamid), der besidder lignende egenskaber.



Cocoamid MEA, findes i kokosnødder.

hvor reaktanten stammer fra fossile brændstoffer. Eksempelvis fremstilles næsten al plastik på baggrund af petrokemiske reaktioner. Derudover benyttes de fossile resurser bl.a. også til asfalt. Den kemiske industri er fuldstændig afhængig af de fossile resurser, da også mange ikke-carbonholdige produkter fremstilles herfra. For eksempel produceres hydrogen, der anvendes til produktion af ammoniak (NH₃), fra den fossile resurse methan (CH₄).

De resterende 90-95 % af de fossile råstoffer benyttes til at udvikle energi. Energien holder vores boliger varme, forsyner os med elektricitet og driver transportsektoren. På nuværende tidspunkt er det kun en meget lille del af vore transportmidler, der benytter brændstof baseret på vedvarende energi. Der kommer dog flere og flere køretøjer, som kan benytte alternative brændstoffer som ethanol (CH₃CH₂OH), biodiesel og hydrogen. Teknologierne er dog endnu ikke så veludviklede, at de rigtigt er slået igennem, men med de stigende oliepriser er der et stort incitament til at udvikle alternative brændstoffer.

Jordens fossile energiresurser er ikke ubegrænsede, og de fleste prognoser viser, at resurserne sandsynligvis er udtømte inden for en overskuelig årrække. Forudsigelser fra 2001 peger på, at olien vil være brugt op inden for

de næste 40 år og naturgassen om ca. 60 år, såfremt forbruget ikke ændres radikalt. Resurserne ophører ikke fra den ene dag til den anden, men når produktionen ikke længere kan dække efterspørgslen, vil der opstå alvorlige problemer, og den globale økonomi vil sandsynligvis afgørende forandres. De danske reserver af fossile resurser har en væsentlig lavere levetid end gennemsnittet. Med den nuværende indvindingshastighed vil reserveerne af olie og gas være udtømt inden, der er gået 15 år, såfremt der ikke opdages helt nye reserver, eller udvikles væsentlig mere effektive udvindingsmetoder.

Forbrænding af fossile resurser danner carbondioxid (CO₂). Siden mennesket fra sidste halvdel af 1700-tallet begyndte at brænde de fossile brændstoffer af i større mængder, er atmosfærens indhold af CO₂ steget til over det dobbelte af indholdet inden industrialiseringen. CO₂ er en drivhusgas, der medvirker til at holde på jordens varme. Gennemsnitstemperaturen på jorden uden drivhusgasser ville således ligge langt under frysepunktet. Store mængder drivhusgasser i atmosfæren er dog problematisk, da dette med stor sandsynlighed får temperaturen til at stige, hvilket igen medfører smeltning af indlandsis og gletsjere, stigning af verdenshavens niveau, voldsomme oversvømmelser og muligvis også andre

naturkatastrofer. Det er derfor ønskværdigt at finde mere miljøvenlige alternativer til de fossile brændstoffer. Et brugbart alternativ må ikke medvirke til ophobningen af CO₂ i atmosfæren, og begrebet CO₂-neutral er blevet indført for at betegne sådanne mere miljøvenlige energikilder og processer. At en proces er CO₂-neutral betyder, at processen ikke afgiver yderligere CO₂ til atmosfæren, end hvad den selv oprindeligt har optaget fra atmosfæren under dannelse af eventuelle reaktanter. Det er for eksempel CO₂-neutralt at brænde træ i en pejs. Der dannes også væsentlige mængder CO₂ i blandt andet den kemiske industri, og det er derfor også vigtigt at minimere CO₂-udledningen herfra.

I 2005 blev Kyoto-aftalen ratificeret, og der blev for alvor sat politisk fokus på at mindske udledningen af drivhusgasser. De deltagende lande forpligtede sig til at reducere deres udledning af drivhusgasser med minimum 5 % af værdien for 1990 inden år 2012. EU-landene har i fællesskab forpligtet sig til en samlet reduktion på 8 %. Danmark har dog forpligtet sig til at mindske udledningen med hele 21 %. Reelt set skal udledningen reduceres yderligere, da den danske udledning af CO₂ i praksis steg fra 1990 til 1995. Dette gør sig også gældende for andre deltagerlande, og med det in mente synes målet for Kyoto-aftalen umiddelbart ikke særligt realistisk, medmindre der sker en betydelig teknologiudvikling.

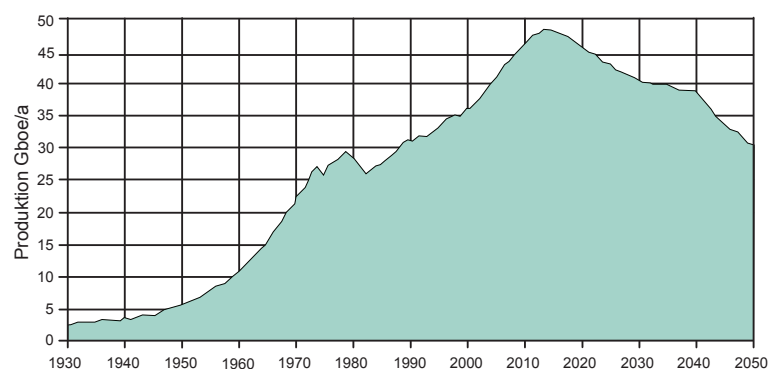
E-faktor til måling af affaldsmateriale

Det har altid været et problem for den kemiske industri at begrænse affaldsmængderne. Hvert år genereres store mængder af affald, og selv om råstofferne kan stamme fra fornybare resurser som biomasse, er vejen til det endelige produkt ikke nødvendigvis bæredygtig eller miljøvenlig.

På baggrund af affaldsmængden for et givet produkt er der udviklet en metode til at klassificere en given proces. Ved hjælp af denne metode beregnes en E-faktor (E står for Environmental), der udtrykker hvor meget affald, der genereres per produktenhed. E-faktoren er defineret som massen af affaldsmateriale i forhold til masse af produkt.

$$E\text{-faktor} = \frac{m_{\text{affald}}}{m_{\text{produkt}}}$$

Ved affaldsmateriale forstås de produkter, som ikke kan anvendes videre samt reagenser og solventer (opløsningsmidler), der ikke kan genanvendes. Hvis en proces har en lav E-faktor, genereres der således kun lidt affald pr. masseenhed af produktet, hvilket dog ikke er ensbetydende med, at processen totalt genererer mindre affald end en proces med en højere E-faktor. Eksempelvis kan fremstillingen af kemikalier i stor skala, såsom methanol (CH₃OH), sammenlignes med fremstillingen af medicinalvarer, f.eks. viagra. E-faktorerne er typisk hhv. 1 og 100 for de to procesområder, men den årlige affaldsmængde er hhv. 100.000 ton og < 2.000 ton. Den store forskel i affaldsmængderne skyldes, at der produceres væsentlig mindre mængder af medicinalvarer. E-faktoren er derfor kun en rettesnor, men kan benyttes, hvis der skal vælges mellem flere fremstillingsmetoder af samme produkt. E-faktoren afspejler endvidere ikke affaldets giftighed eller skadelighed, der naturligvis er en vigtig faktor. Om affaldet består af vand eller saltsyre, siger E-værdien således intet om.



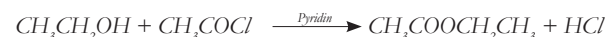
Scenarium for olieproduktionen på verdensplan. Efter år 2015 forventes den samlede produktion at falde, da der næppe længere opdages nye oliereservoirer. (Gboe = milliard tønder olie ækvivalenter).

E-faktorer for fremstilling af ethylacetat

E-faktoren udregnes for to mulige fremstillingsmetoder for ethylacetat. Beregningerne er foretaget under antagelse af, at der er 100 % omdannelse af reaktanterne, samt at selektiviteten for ethylacetat ligeledes er 100 %, altså at der kun produceres ethylacetat og ikke nogle biprodukter. I 1991 blev der på verdensplan produceret 700.000 ton ethylacetat. Ethylacetat (EtOAc) anvendes hovedsageligt som solvent (opløsningsmiddel) i farve- og lakindustrien, men anvendes også ved fremstilling af antibiotika.

Fremstillingsmetoder:

A: Fremstilling af ethylacetat ud fra ethanol og eddikesyrechlorid



Den dannede saltsyre kan omdannes til salt (NaCl) og vand ved tilsætning af natriumhydroxid.

Det antages, at der fremstilles 1 kg EtOAc. For at beregne mængden af affald der generes, er det nødvendigt at omregne masse til stofmængde.

$M(\text{EtOAc}) = 88,1 \text{ g/mol}$; $M(\text{pyridin}) = 79,1 \text{ g/mol}$; $M(\text{HCl}) = 36,5 \text{ g/mol}$

$n = m/M$

$n(\text{EtOAc}) = 1000\text{g}/(88,1 \text{ g/mol}) = 11,35 \text{ mol}$

Det ses, at EtOAc og HCl dannes i ækvivalente mængder, hvilket betyder, at der dannes samme stofmængde saltsyre som EtOAc. På den baggrund er det så muligt at beregne massen af den dannede saltsyre. Pyridin ($\text{C}_5\text{H}_5\text{N}$), der anvendes som solvent, skal også indgå i beregningen. Pyridin er en heterocyklisk aromatisk forbindelse, der virker som base. Det antages, at den anvendte mængde af pyridin er ækvivalent med stofmængden af EtOAc.

$m(\text{pyridin}) = n \cdot M = 11,35 \text{ mol} \cdot 79,1 \text{ g/mol} \cdot 0,001 \text{ kg/g} = 0,90 \text{ kg}$

$m(\text{HCl}) = 11,35 \text{ mol} \cdot 36,5 \text{ g/mol} \cdot 0,001 \text{ kg/g} = 0,41 \text{ kg}$

E-faktor = $(m(\text{HCl}) + m(\text{pyridin})) / m(\text{EtOAc}) = 1,3$

B: Fremstilling af ethylacetat ud fra ethanol og eddikesyre



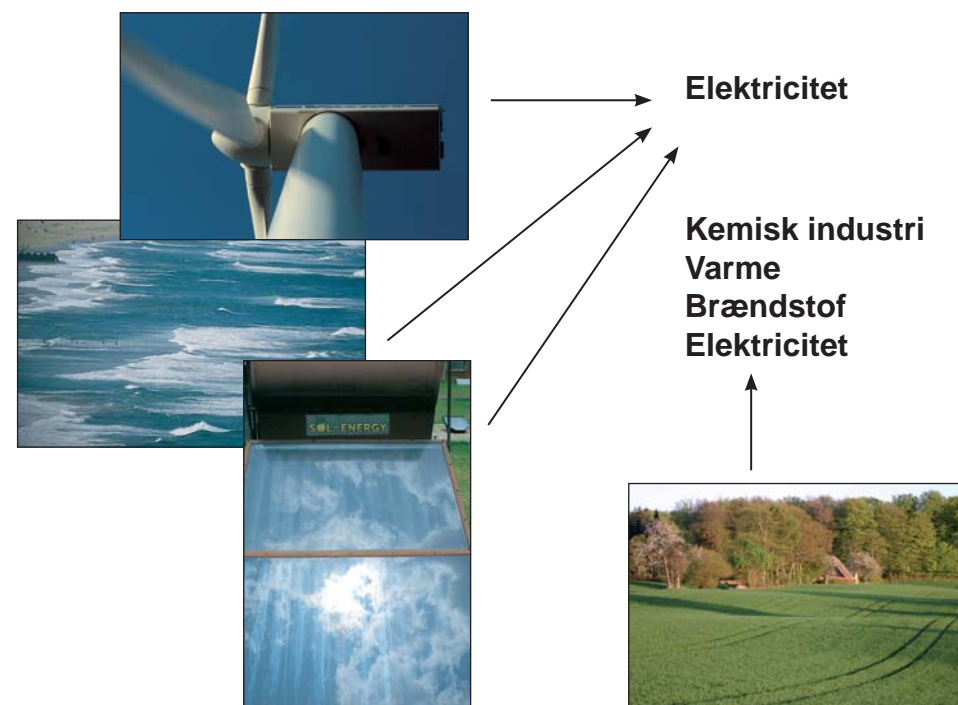
Der regnes igen på fremstillingen af 1 kg EtOAc.

$M(\text{H}_2\text{O}) = 18,0 \text{ g/mol}$

Under forudsætning af at vandet kan genbruges, er E-faktoren nul. Antages vandet som affald fås:

$m(\text{H}_2\text{O}) = 11,35 \text{ mol} \cdot 18,0 \text{ g/mol} \cdot 0,001 \text{ kg/g} = 0,20 \text{ kg}$

E-faktor = 0,2



Alternative energikilder er typisk særlig velegnede til produktion af elektricitet, eksempelvis vind, bølger og sol, der opfanges af vindmøller, bølgeenergianlæg og solceller. Biomasse kan ud over energiproduktion anvendes til fremstilling af kemikalier og brændstof.

Alternativer til fossile resurser

Inden for kemisk forskning og industri opfattes bæredygtighed i vid udstrækning som synonym med ”grøn” kemi, altså miljøvenlig, og ikke baseret på fossile resurser, der kun meget langsomt kan gendannes.

Der er en række alternativer til de fossile brændstoffer. I Danmark er vindmølleindustrien langt fremme, Norges foretrukne alternative energikilde er vandkraft, mens islændingenes er geotermisk varme. Andre muligheder er for eksempel solenergi, bølgeenergi, atomkraft m.m. Alle disse alternativer er særligt velegnede til produktion af elektricitet, hvorimod et andet alternativ, biomasse, kan anvendes både til el- og varmeproduktion såvel som til produktion af kemikalier i den kemiske industri.

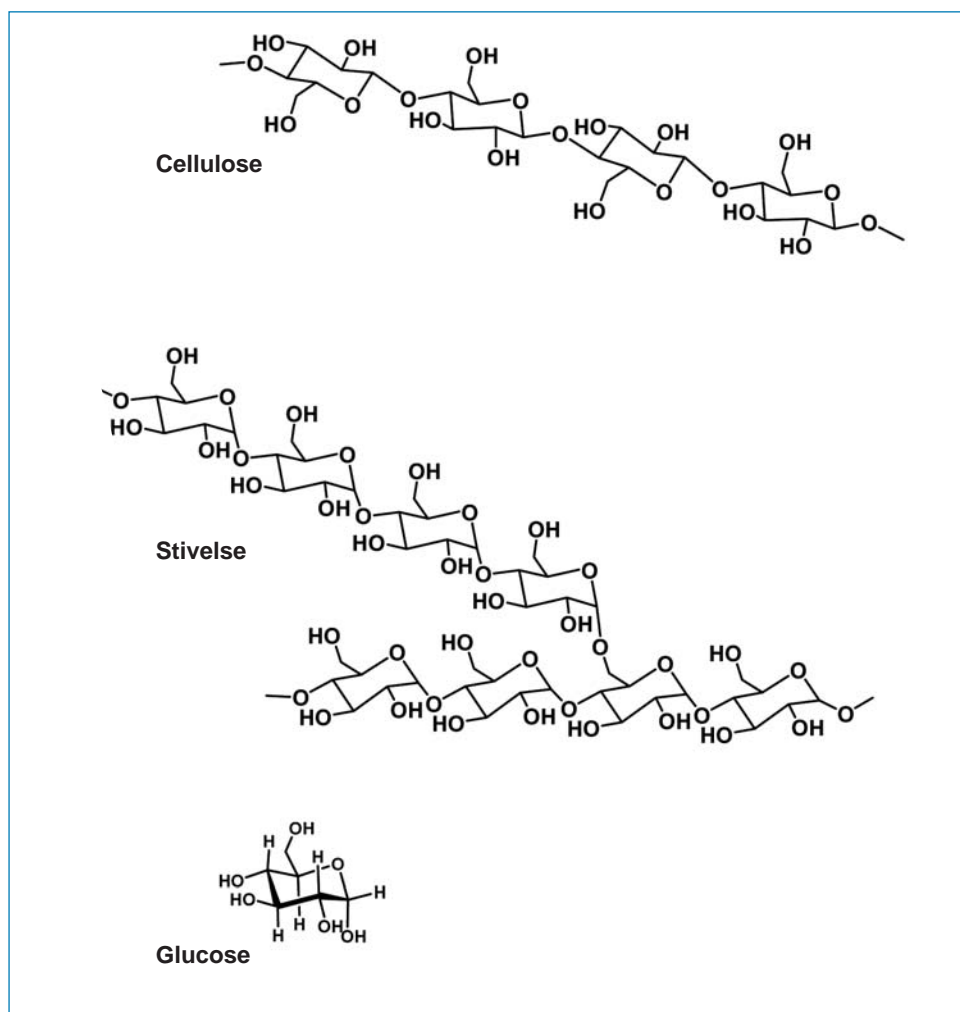
Solens indstråling er uden sammenligning den største energikilde på jorden. Solen leverer årligt så enorme mængder af energi, at vores samlede behov ville kunne dækkes mere end 10.000 gange alene fra indstrålingen over landområderne. Kun en brøkdel af denne energi bliver imidlertid udnyttet, og det er derfor nærliggende at finde metoder til at udnytte en større andel af solens energi.

Planter og træer vokser vha. fotosyntese. I fotosyntesen forbruges solenergi, carbondioxid og vand til dannelse af kulhydrater som stivelse og cellulose samt oxygen.



Ved at udnytte spildprodukter, som for eksempel halm fra landbruget, kan noget af denne solenergi genvindes i form af varme og elproduktion (ved forbrænding i et kraftvarmeværk) eller i form af syntetisk fremstillede kemikalier som ethanol, hydrogen og benzin. Kulhydrater som stivelse og cellulose er hovedbyggestenene i næsten alt levende, og i princippet kan de, ligesom de fossile brændstoffer, nedbrydes til vand og carbondioxid uanset, hvor komplekst sammensat de er.

Glucose er et sukkerstof og grundbyggestenen i cellulose. Store mængder af cellulose bliver brugt som brænde, hvorved kun brændværdien udnyttes. Der er således et stort potentiale i anden brug af cellulose som for eksempel råmateriale til andre kemiske forbindelser. Der foregår intensiv forskning i metoder til at omdanne sukker til enten benzin eller hydrogen. Ved omdannelse af sukker til benzin undgår man ulempen ved at skulle udvikle nye motorer, da det fortsat er samme type brændstof blot dannet ud fra vedvarende råmaterialer.



Glucose er grundbyggestenen i både cellulose og stivelse. Den eneste forskel på stivelse og cellulose er i bindingerne mellem glucoseenbederne.

Hydrogen kan fremstilles direkte fra sukker, men foruden hydrogen dannes også CO_2 i processen, hvilket som nævnt ikke er ønskværdigt. Imidlertid er sukker oprindeligt dannet ved fotosyntese, som forbruger CO_2 , så hele processen er CO_2 -neutral. Sukker kan endvi-

dere omdannes til andre brugbare kemikalier som f.eks. eddikesyre (CH_3COOH), der på nuværende tidspunkt fremstilles ud fra petrokemiske reaktanter. Der produceres 8,3 millioner ton eddikesyre årligt på verdensplan.



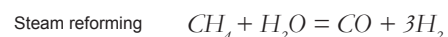
Professor Claus Hviid Christensen og ph.d. studerende Betina Jørgensen forsker i, hvordan kemien kan bidrage til en bæredygtig udvikling. Her taler de om brændselsceller.

CO₂ produktion ved petrokemisk produktion af eddikesyre

Den mest anvendte proces til fremstilling af eddikesyre er **Monsanto processen**. Her reagerer methanol med CO og danner eddikesyre ved hjælp af en rhodium katalysator.



CO bliver dannet ved steam reforming (en reaktion hvor vand oxiderer en carbonholdig forbindelse til CO og hydrogen) af methan. Methanol dannes ud fra CO og hydrogen.



Da der forbruges CO til produktionen af methanol, er det nødvendigt at udføre steam reforming på methan to gange per dannet eddikesyremolekyle for at fremstille udgangsstofferne CO og methanol. Ved steam reforming af methan udnyttes kun 2/3 til at danne produkter. Den resterende 1/3 benyttes som varmekilde til processen, der er energikrævende (endoterm), hvorved der dannes CO₂. Forbrændingen af methan sker efter følgende reaktion:



I det følgende beregnes den mængde CO₂, der genereres ved produktionen af et ton eddikesyre (AcOH).

$$m(\text{AcOH}) = 1 \text{ ton}; M(\text{AcOH}) = 60 \text{ g/mol}; M(\text{CO}_2) = 40 \text{ g/mol}$$

Stofmængden af eddikesyre:

$$n(\text{AcOH}) = m/M = 1 \cdot 10^6 \text{ g} / 60 \text{ g/mol} = 1,67 \cdot 10^4 \text{ mol}$$

For hver mol eddikesyre er der brugt to mol CO => $n(\text{AcOH}) = \frac{1}{2} n(\text{CO})$

For hver mol CO der dannes, er der forbrugt 3/2 mol methan => $n(\text{CO}) = \frac{2}{3} n(\text{CH}_4)$

For hver mol methan der bruges, dannes der 1/3 mol CO₂ => $n(\text{CH}_4) = 3 n(\text{CO}_2)$

På baggrund af dette ses det at $n(\text{AcOH}) = \frac{1}{2} \cdot \frac{2}{3} \cdot 3 n(\text{CO}_2) = n(\text{CO}_2) = 1,67 \cdot 10^4 \text{ mol}$

$$m(\text{CO}_2) = M \cdot n = \underline{0,7 \text{ ton}}$$

Det skal nævnes, at der i denne beregning ikke er taget højde for CO₂-dannelse i forbindelse med opvarmningen af syntesereaktoren m.m.

Det er også muligt at fremstille eddikesyren fra bioethanol

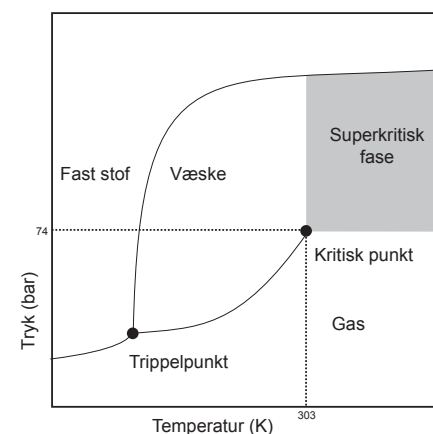


Herved bliver processen CO₂-neutral, så længe der ikke tages højde for opvarmning af reaktor m.m.

Kan CO₂-udspil udnyttes til bæredygtig kemi?

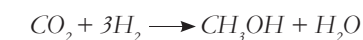
Udnyttelse og genindvinding af de enorme mængder CO₂, der afgives til atmosfæren fra de store kul- og oliefyrende kraftværker, ville kunne mindske drivhusproblemerne og være et afgørende skridt mod en bæredygtig udvikling.

CO₂ er en gas ved stuetemperatur og atmosfærisk tryk. Når temperaturen er 30°C og trykket 74 bar, når det såkaldte kritiske punkt for CO₂. Her er det ikke muligt at skelne mellem gasfase og væskefase, og CO₂ har da egenskaber svarende til begge faser. CO₂ i denne tilstand kaldes for superkritisk CO₂ (se figuren). Det har vist sig, at superkritisk CO₂ kan være et velegnet solvent i organiske reaktioner, hvor det træder i stedet for flygtige organiske og mere miljøskadelige opløsningsmidler. Derudover kan superkritisk CO₂ anvendes til oprensning af metal, da det kan fjerne uønskede organiske forbindelser samt rester af bearbejdningsvæsker. Hvis brugen af superkritisk CO₂ foregik i større skala, ville det være muligt derved at udnytte lidt af det uønskede CO₂.



Fasediagram for CO₂. Ud over det kritiske punkt er også angivet trippelpunktet. Ved trippelpunktet findes CO₂ i alle tre tilstandsformer, dvs. både som væske, gas og faststof.

Det er endvidere muligt at omdanne CO₂ til methanol ved reaktion med hydrogen.



Omdannelsen af CO₂ er særlig interessant i lyset af den voksende debat om ”methanol-samfundet” som alternativ til det ”fossile samfund”, altså et fremtidigt samfund baseret på methanol som energibærer. Methanol er et anvendeligt stof til produktion af kemikalier og syntetiske brændsler, og det kan endvidere anvendes direkte i visse brændselsceller (læs mere i kapitlet ”Brint og brændselsceller”).

Bæredygtig fremstilling af hydrogen

Der er øget fokus på brugen af hydrogen som brændstof, og det har vist sig nødvendigt med nye metoder til fremstilling af hydrogen. Det er fortsat mest økonomisk at fremstille hydrogen ud fra de fossile resurser, men det er til gengæld ikke bæredygtigt. Hvis et ”brint-samfund” (med hydrogen som den vigtigste energibærer) skal realiseres, skal produktionen baseres på bæredygtige metoder. Ellers er der kun vundet ganske lidt miljømæssigt. En mulig teknik er elektrokemisk spaltning af vand (elektrolyse). Da 70 % af jorden er dækket af vand, er dette umiddelbart lovende. Derudover gendanner brændselsceller det spaltede vand under dannelse af energi. Spaltningen af vand kræver elektricitet, men hvis elektriciteten bliver genereret af vedvarende energikilder, så vil processen være CO₂-neutral og bæredygtig (såfremt elprisen er billig nok). Mulige energikilder kunne være sol, vind og vandkraft.

Halm som muligt alternativ til fossile brændstoffer

Et andet alternativ til de fossile brændstoffer er bioethanol, der er ethanol fremstillet ved fer-

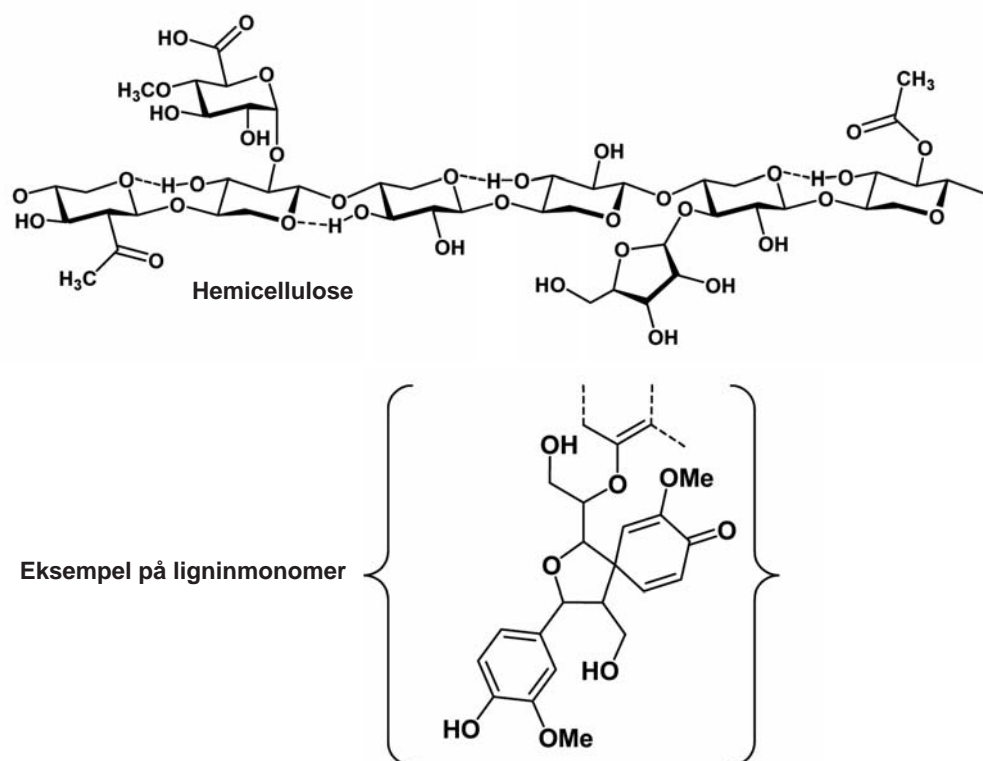
mentering af biomasse som f.eks. halm. Først nedbrydes råmaterialet (halmen) ved hjælp af enzymer (hydrolyse), hvorefter nedbrydningsprodukterne, der typisk kan være glucose, omdannes til ethanol ved forgæring.



Der forskes for tiden i at optimere sammensætningen af enzymerne, således at sværere nedbrydelig biomasse, f.eks. lignocellulose, bliver lige så let anvendelig som f.eks. stivelse. Lignocellulosen udgør hovedparten af halm, og hvis udnyttelsen skal optimeres, er det nødvendigt, at ikke kun stivelsen, men også lignocellulosen, omdannes til ethanol. Lignocellulose består af lignin (20-30 %), cellulose (30-50 %) og hemicellulose (20-40 %)

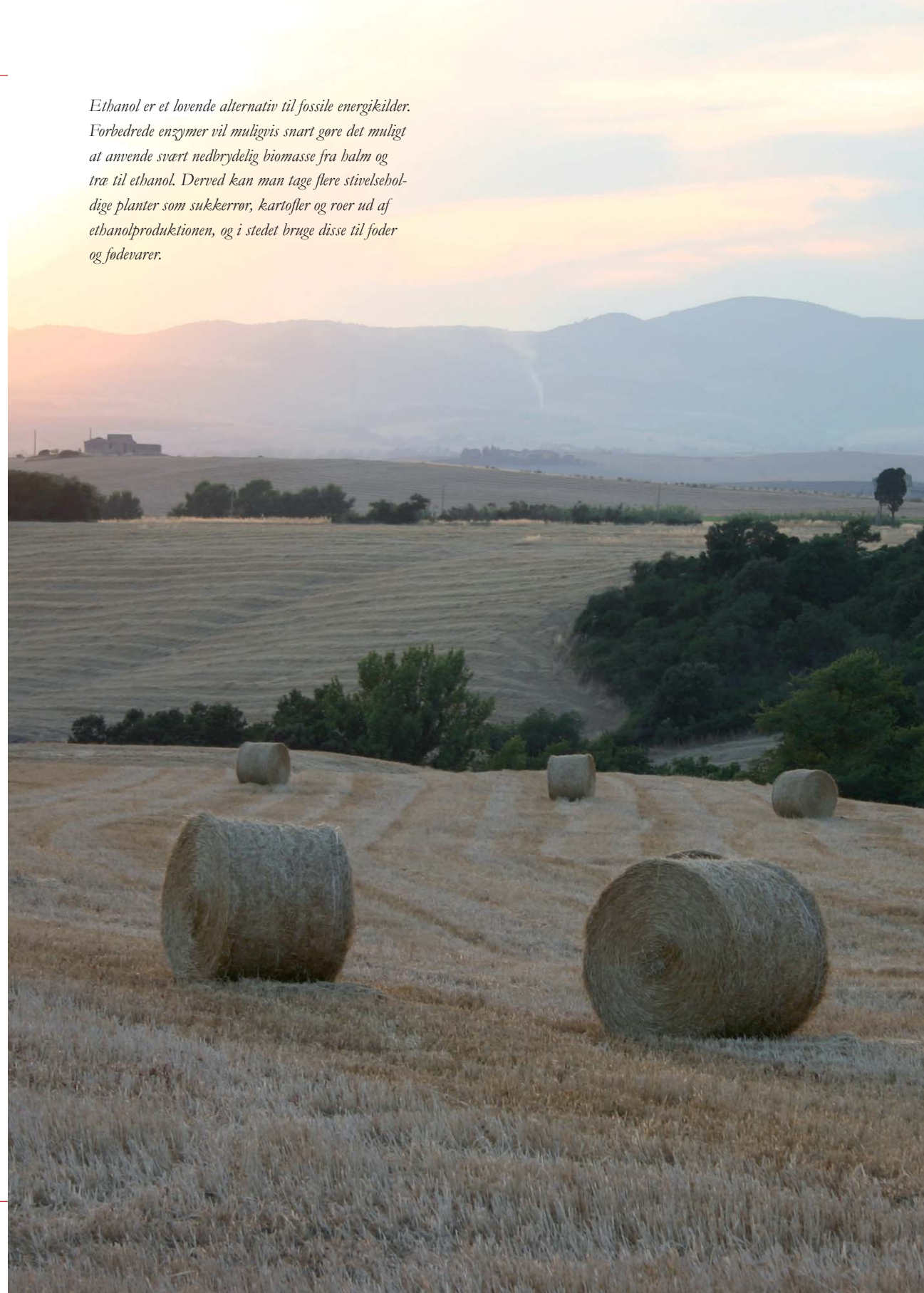
Anvendelse af bioethanol i transportsektoren

Et potentielt anvendelsesområde for bioethanol er transportsektoren. Næsten alle biler kan uden modifikationer køre på en ethanol/benzin blanding med op til 10 % ethanol. Der produceres også biler, der kan køre på næsten 100 % ethanol. Hovedparten af bilerne, der fremstilles med hensigt på at køre på ethanol/benzin-blandinger, kan benytte varierende brændstofsammensætning og kaldes *alternierende brændstof køretøjer (AFV)*. Nogle AFVer kan køre med blandinger fra 0 til 85 % ethanol, og bilens computer registrerer sammensætningen af brændstoffet og regulerer efterfølgende tændingen samt forholdet mellem luft og brændstof, så der sker en optimal udnyttelse af brændstoffet.



Eksempler på de carbonholdige forbindelser som lignocellulose indeholder udover cellulose.

Ethanol er et lovende alternativ til fossile energikilder. Forbedrede enzymer vil muligvis snart gøre det muligt at anvende svært nedbrydelig biomasse fra halm og træ til ethanol. Derved kan man tage flere stivelseholdige planter som sukkerrør, kartofler og roer ud af ethanolproduktionen, og i stedet bruge disse til foder og fødevarer.



I Brasilien er der allerede lang tradition for at anvende ethanol som brændstof, og her kan benyttes næsten 100 % ethanol i mange motorer. Benzin tilsættes kun som et denatureringsmiddel, så ethanol ikke kan drikkes. Der er endda lovgivning i Brasilien, som kræver, at alle køretøjer med forbrændingsmotor skal benytte en blanding af ethanol og benzin med et minimum indhold af ethanol på 26 %.

Også i USA begynder E85 (85 % ethanol/benzin blanding) at vinde indpas på brændstofmarkedet. Prisen er nu den samme eller i nogle stater lavere end prisen på almindelig benzin. Ethanol bruges også i transportsektoren som tilsætning i små mængder til benzinen, hvorved oktantal kan reguleres uden tilsætning af blyholdige forbindelser.

Anvendelse af bioethanol i den kemiske industri

Bioethanol kan benyttes i den kemiske industri som substituent for de petrokemiske reagenser. Det er for eksempel relativt simpelt at omdanne ethanol til syntesegas (CO , CO_2 og H_2), der er byggestenen i flere kemiske processer. På verdensplan fremstilles 23 millioner ton bioethanol årligt, hvilket er ca. tre gange så meget som mængden af eddikesyre. Bioethanol ville i dag nemt kunne erstatte produktionen af eddikesyre, men dog kun en lille brøkdel af den samlede produktion af carbonholdige kemikalier.

Det er forholdsvis enkelt at omdanne bioethanol til enten eddikesyre eller ethen. Produkterne vil medføre reduktion af CO_2 -udslip, da bioethanol stammer fra fornybare resurser, og dermed er CO_2 -neutral i modsætning til den nuværende petrokemiske produktion af stofferne.

Eddikesyre:



Ethen:



	Årlig produktion (ton/år)	Pris (Kr/kg)
Bioethanol	23·10 ⁶	1,55
Eddikesyre	8·10 ⁶	3,71
Ethen	120·10 ⁶	1,85

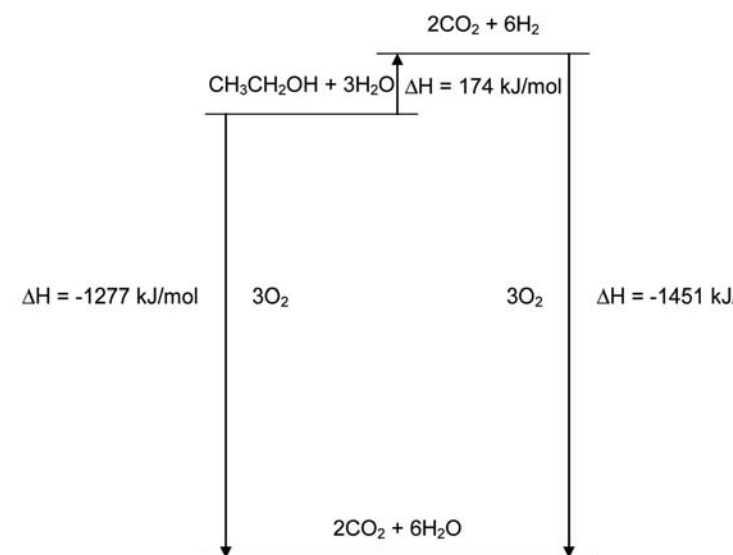
Tabel: Økonomiske aspekter i anvendelsen af bioethanol som råstof i den kemiske industri.

Ved at omdanne ethanol til eddikesyre fordobles prisen per vægtenhed, mens prisen for ethen er stort set den samme. Der er ikke taget højde for produktionsomkostningerne forbundet med omdannelsen, men der burde være basis for industriel omdannelse af ethanol til eddikesyre.

Produktion af hydrogen ud fra bioethanol er et hurtigt voksende forskningsområde. Det er på nuværende tidspunkt ikke økonomisk attraktivt, men er dog i de fleste tilfælde billigere end elektrolyse af vand, og den er måske det bedste alternativ til den petrokemiske hydrogenproduktion. I dag er det kun, når naturforhold muliggør meget billig elproduktion, som det er tilfældet med geotermisk varme på Island, at det reelt er muligt at producere hydrogen bæredygtigt. Den billige el gør elektrolysen af vand økonomisk rentabel.

Fra halm til hydrogen

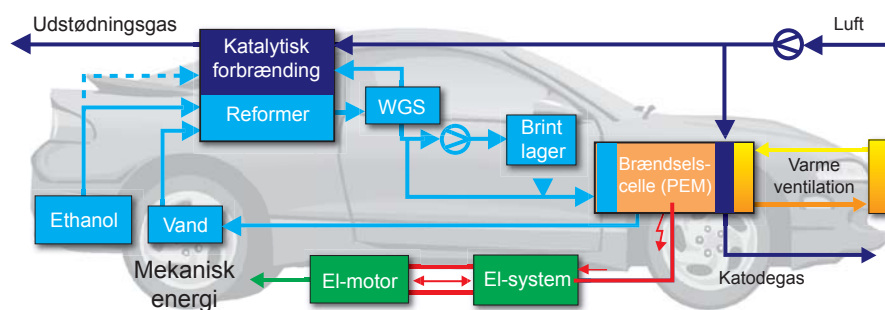
Solens energirige lys gør det muligt for planterne at danne sukker-stoffer ved fotosyntese ud fra atmosfærens indhold af vand og CO_2 . Disse sukkerstoffer har et højt energiindhold sammenlignet med vand og CO_2 , hvilket er hele grundlaget for anvendelse af biomasse. Sukkerstofferne kan i et bioraffinaderi omdannes til ethanol ved fermenteringsprocesser. Efterfølgende kan ethanol katalytisk omdannes til hydrogen og CO_2 . Dette er en relativt bekostelig affære, men som vi skal se, kan det muligvis svare sig, da hydrogen kan anvendes med en højere energiudnyttelse.



Energiværdi diagram for forbrænding af ethanol kontra hydrogen. Her kan man se, at der umiddelbart ikke er særlig stor forskel på brændværdien, ΔH , for ethanol og ethanol omdannet til hydrogen.

Figuren er et energiværdi diagram og illustrerer således energierne af de forskellige stoffer relativt. Ud fra figuren kan der regnes på hvordan den højeste nytteværdi af brændstoffet opnås. Er det ved forbrænding af halm, ved forbrænding af ethanol eller ved forbrænding af hydrogen? Set fra denne synsvinkel er der ingen tvivl om, at forbrænding af halm har den højeste nytteværdi, da det koster energi, hver gang et produkt skal omformes til et nyt produkt. Det er imidlertid således, at omdannelsen fra biomasse til ethanol finder sted mange steder i verden, fordi ethanol, i modsætning til biomasse, nemt kan anvendes som brændstof i biler. Virkningsgraden for forbrænding af ethanol i en bil er på ca. 25 %, hvilket vil sige, at et mol ethanol forbrændt i en bilmotor giver en energimængde per $0,25 \cdot 1277 \text{ kJ/mol} = 319 \text{ kJ/mol}$. Hydrogen kan derimod anvendes i brændselsceller (evt. også til brug i biler) med en virkningsgrad på ca. 50 %. Det koster ganske vist energi at omdanne ethanol til hydrogen, men den effektive energimængde pr mol bliver $0,5 \cdot 1451 \text{ kJ/mol} - 174 \text{ kJ/mol} = 552 \text{ kJ/mol}$. Det vil dermed være en stor fordel at omdanne ethanol til hydrogen frem for at brænde den af – i hvert fald når teknologien er blevet fuldt udviklet. Ideen er skitseret på figuren.

Fra halm til hydrogen



Et eksempel på hvorledes ethanol kan anvendes som brændstof til biler. Her bliver ethanol sammen med vand katalytisk omdannet til hydrogen i en reformer. Efterfølgende anvendes hydrogen i brændselsceller, der producerer den nødvendige elektricitet til bilen. Sådant et system ville i øvrigt som ekstragevinst give stort set lydlose biler.

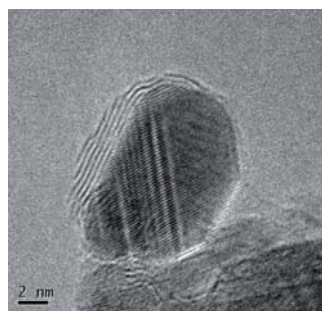
Omdannelsen af ethanol til hydrogen kan beskrives ud fra en såkaldt steam reforming reaktion under tilstedeværelse af en katalysator.



Reaktionen er endoterm og kræver temperaturer på over 400 °C. Reaktionsmekanismen er i virkeligheden langt mere kompliceret, og et mellemprodukt er ethen, der opstår ved at eliminere vand fra ethanol (dehydrering).



Dannelsen af ethen er et problem, da dette meget nemt kan sætte sig på katalysatoren, hvor det danner en polymerfilm af carbon, og dermed deaktiverer katalysatoren. På næste figur ses et TEM-billede (Transmissionselektronmikroskopi) af en nikkelkrystal (som er den aktive del af den anvendte katalysator). De tynde linjer er nikkelpartikelens krystalgitterstruktur, mens de blødere og lidt bredere linjer rundt om krystallen er carbon, som ligger i grafitlag. Når grafitlagene fuldstændig har omkranset nikkelpartiklerne, virker katalysatoren ikke længere. En af de store udfordringer her er derfor at finde en måde, hvorpå kuldannelsen kan undgås.



TEM-billede af nikkelkrystal omgivet af grafit. Billedet viser hvad der kan ske med katalysatoren (nikkelkrystallen) under steam reforming processen. Krystallen er blevet omkranset af et tyndt lag af carbon, som får den til at deaktivere, hvilket vil sige, at katalysatoren ikke længere fungerer, og reaktionen går i stå.

En bæredygtig fremtid?

I dag bliver ca. 5 % af de carbonholdige kemikalier fremstillet ud fra fornybare resurser. Optimistiske forudsigelser anslår, at det i år 2030 vil være 25 %, der fremstilles fra fornybare resurser. Denne forøgelse vil kunne tilskrives en udvikling af teknologi samt en udvidelse af forskernes viden om egenskaberne af biomasse som f.eks. lignocellulose. Overgangen til et mere bæredygtigt samfund afhænger altså mere eller mindre af verdens forskere, nuværende som kommende.

Umiddelbart er den samfundsmæssige udvikling inden for energi- og kemikalieproduktion næppe bæredygtig i dag. Men som dette kapitel påpeger, er der er mange muligheder for at ændre udviklingen. Der arbejdes intensivt både på forskningsinstitutioner og virksomheder overalt i verden med at udvikle alternativer til den nuværende produktion.

Forfattere



Ph.d. studerende
Betina Jørgensen



Ph.d. studerende
Jeppe Rass-Hansen



Professor Claus Hvuid
Christensen