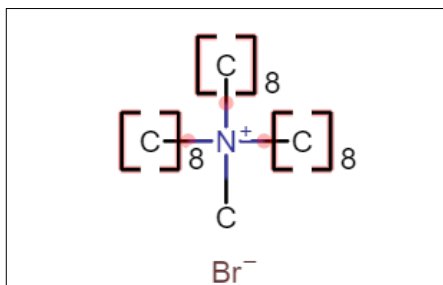


Figur 3 på side 21 viser et potentielt design af processen på større skala.

Fakta

Ioniske væsker anses som et miljøvenligt alternativ, der kan erstatte mange organiske solventer på grund af deres lave flygtighed og høje termiske stabilitet. De første ioniske væsker, der blev fremstillet for over 100 år siden, havde ikke gode egenskaber, men en ny generation af ioniske væsker har vakt opmærksomhed de seneste år. I produktionen af 5-HMF kan nogle ioniske væsker også bruges som solvent i reaktoren [6].

Det interessante ved ioniske væsker er, at man kan designe dem ved at kombinere forskellige kat- og anioner. Dermed kan man designe dem til at have de egenskaber, man skal bruge. Der findes så mange ioniske væsker, at det kan være svært at finde den perfekte væske til forskellige processers specifikke behov. Computerstøttet design og screening kan bruges til denne opgave. Et problem er dog, at de fleste processimuleringsprogrammer ikke har integreret ioniske væsker i deres databaser. En mulig ionisk væske, der kan bruges til væske-væske ekstraktion, er N1888BR, som vises i figur 4.



Figur 4. Strukturen af den ioniske væske N1888BR, som har potentiale til at bruges som ekstraktionsmiddel i væske-væske ekstraktion.

Der er stadig mange usikkerheder ved produktionen af 5-HMF, og det kan være svært at tage de rigtige valg i de forskellige dele af processen. Valget af solvent, katalysator eller kombination af de to har stor indflydelse på, hvilken downstream-proces der er mest effektiv og bæredygtig. Processen skal som helhed være bæredygtig, så derfor er det også nødvendigt at teste dem som helhed. Det kan være ret vanskeligt, når stoffer som ioniske væsker bliver brugt. Der er metoder til at overkomme denne hindring, men de kan være upålidelige, og eksperimentelle data er nødvendige. Det er derfor stadig svært at analysere

effektiviteten af færdige processer, hvor ioniske væsker bruges.

5-HMF's fremtid

Meget af forskningen omkring 5-HMF er fokuseret på enkelte enhedsoperationer, som for eksempel reaktoren eller destilleringen, men der mangler stadig analyser og vurderinger af større processer. Mange publikationer har for eksempel fokuseret på monosakkarider som substrat og ikke på cellulose fra biomasse. Overordnede økonomiske- og livscyklusvurderinger er stadig nødvendige og kan vise, hvilke enhedsoperationer der skal fokuseres på [7]. At bringe de to relativt nye grønne spillere, 5-HMF og ioniske væsker, sammen, er et interessant og udfordrende projekt, men det er langt fra sikkert, at det er vejen frem i 5-HMF-produktionen. Det kan godt ende med, at de nye teknologier, der skal erstatte olie, er dyrere grundet olieindustriens dominans på markedet og årtiers forspring i forskningen. Lige meget hvad, så er oliens tid ved at være til sin ende, og materialer som 5-HMF kommer til at være uundgåelige.

E-mail:

Steffen Domy: steffend@hotmail.dk

Xiaodong Liang: xlia@kt.dtu.dk

Referencer:

1. K.I. Galkin, V.P. Ananikov, When Will 5-Hydroxymethylfurfural, the "Sleeping Giant" of Sustainable Chemistry, Awaken?, *ChemSusChem*. 12 (2019) 2976-2982. <https://doi.org/10.1002/cssc.201900592>.
2. T. Werpy, G. Petersen, Top Value Added Chemicals from Biomass, U.S. Dep. Energy. 1 (2004) 76. <https://doi.org/10.2172/926125>.
3. A. Mukherjee, M.J. Dumont, V. Raghavan, Review: Sustainable production of hydroxymethylfurfural and levulinic acid: Challenges and opportunities, *Biomass and Bioenergy*. 72 (2015) 143-183. <https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2014.11.007>.
4. R.J. Van Putten, J.C. Van Der Waal, E. De Jong, C.B. Rasrendra, H.J. Heeres, J.G. De Vries, Hydroxymethylfurfural, a versatile platform chemical made from renewable resources, *Chem. Rev.* 113 (2013) 1499-1597. <https://doi.org/10.1021/cr300182k>.
5. Z. Wei, Y. Liu, D. Thushara, Q. Ren, Entrainer-intensified vacuum reactive distillation process for the separation of 5-hydroxymethylfurfural from the dehydration of carbohydrates catalyzed by a metal salt-ionic liquid, *Green Chem.* 14 (2012) 1220-1226. <https://doi.org/10.1039/c2gc16671b>.
6. A. Andreas, J. Kruse, Ioniske væsker, (n.d.).
7. C. Thoma, J. Konnerth, W. Sailer-Kronlachner, P. Solt, T. Rosenau, H.W.G. van Herwijnen, Current Situation of the Challenging Scale-Up Development of Hydroxymethylfurfural Production, *ChemSusChem*. 13 (2020) 3544-3564. <https://doi.org/10.1002/cssc.202000581>.

Spejlbille – og Nok

Nobelprisen i kemi for 2021 er tildelt Benjamin List og David W.C. MacMillan for deres indsats inden for chiral organokatalyse. Nobelkomitéen har på deres hjemmeside [1] stillet materiale til rådighed for offentligheden, som kan anvendes frit ved beskrivelse af det prisvindende arbejde, se figur 1. Medierne har også allerede været fremme med beskrivelser af chiralitet med udgangspunkt i billederne af (R)- og (S)-limonen (og med den sædvanlige direkte overtælgelse af de engelske navne, men slut-e't skal altså væk på dansk!! [2]). Disse to molekyler er forholdsvis fredssommelige eksempler på, at spejlbilledformer kan have forskellige egenskaber i forhold til chirale registranter, for eksempel humane receptorer. Andre chirale duftstoffer er de to spejlbilledformer af carvon, der lugter af hhv. kommen og mynte,



der i organisk kemi

Nobelprisen

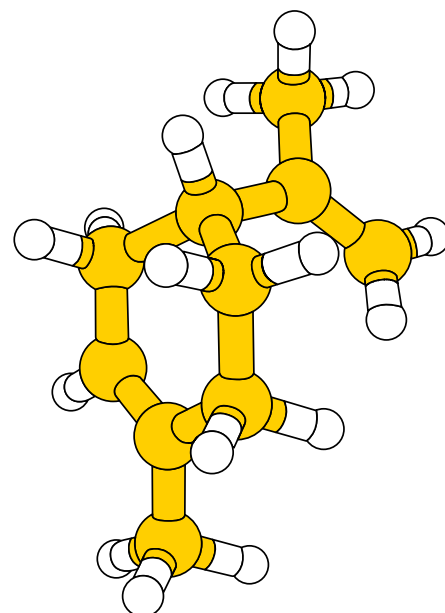
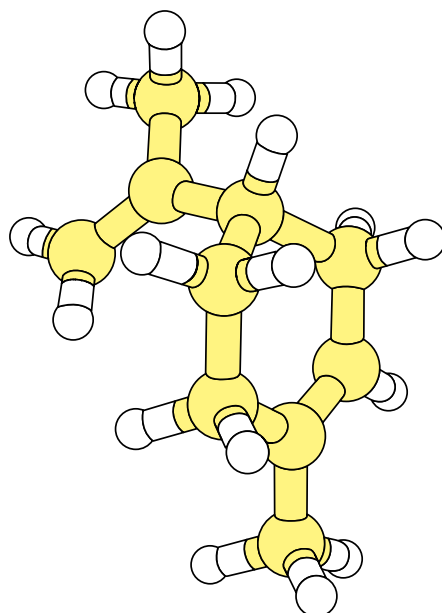
mens et tragisk eksempel på forskelle på to spejlbilleder er thalidomid, hvor konsekvensen af tilstedeværelsen af mindre mængder af den forkerte enantiomer vist er velkendte [3].

Vores ærinde her er nomenklatur og terminologi. (Nobelpristagerne og deres arbejde er der mere om andetsteds i bladet.) Stereodeskriptorerne *R* og *S*, der i kemiske navne if. IUPAC bør kursiveres og sættes i parentes, anvendes her til at specificere den absolutte konfiguration af det ene asymmetriske carbonatom, der er i limonenstrukturen. I et fuldt systematisk navn fortæller en lokant, hvor i molekylet det sidder; se teksten til figur 1. Limonen kan også navngives ud fra stamforbindelsen *p*-menthan (figur 2) og kommer så til at hedde *p*-mentha-1,8-dien; det asymmetriske carbonatom har stadig lokanten '4'.

S-LIMONEN
(CITRON)



R-LIMONEN
(APELSIN)



© Johan Jørnstad/The Royal Swedish Academy of Sciences.

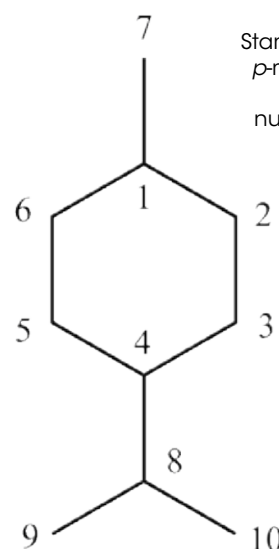
Figur 1. Nobelkomitéens figur med de to spejlbilleder af limonen. Det systematiske navn for appelsinduftstoffet er (4*R*)-1-methyl-4-(prop-1-en-2-yl)cyclohex-1-en eller (4*R*)-*p*-mentha-1,8-dien.

Man ser også almindeligt deskriptorerne (+) og (−). Således er (*R*)-limonen det samme som (+)-limonen, men der er ikke en generel sammenhæng mellem (*R*) og (+). Sidstnævnte refererer til drejning af planpolariseret lys sendt gennem en opløsning af molekylet under specificerede fysiske betingelser og er derfor ikke en egentlig stereodeskriptor. Søger man på nettet på limonen, vil man også finde deskriptorerne *D* og *L*, der imidlertid hører til i helt andre situationer, og *d* og *l*, der er forældede; ingen af disse bør altså bruges ved limonen.

Terminologi: Læserne vil have bemærket, at jeg har udskiftet 'asymmetrisk organokatalyse' med 'chiral organokatalyse'. IUPAC [4] billiger generelt ikke anvendelsen af 'asymmetrisk' om molekylstrukturer, hvis betydningen er 'chiral', altså 'mangler et uegentligt symmetrielement' (anderledes sagt: kan ikke bringes til at dække sit spejlbillede), men har valgt at bibeholde '*asymmetrisk carbonatom*' om carbonatomer, der er bundet til fire forskellige grupper, altså for eksempel carbonatom nr. 4 i limonen.

TD, Nomenklaturudvalget

Figur 2. Stamforbindelsen *p*-menthan med standard-nummereringen af skelettet.



Referencer

1. <https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/2021/press-release/>.
2. Nomenklaturudvalget har produceret to skrifter, der giver de vigtigste regler for oversættelse af kemiske navne fra engelsk til dansk med eksempler, se www.kemisknomenklatur.dk.
3. F. Jensen, J.E.T. Andersen, J.B. Christensen, R. Hazell: *Grundlæggende Kemi* [1. udg., Gyldendal 2016], side 134-135.
4. The *Gold Book*, <https://goldbook.iupac.org/terms/view/C01060>.



Foto: Hans Brämmer, Pixabay.