

Dit branchemagasin fra TechMedia

Kemisk Forening - Kemiingeniørgruppen

dansk kemi

Nummer 9 - September 2015 / 96. årgang

NMR-spektroskopiens udvikling

Hvor godt virker isolerende maling?

Den sukker-sure gylle

INDHOLD



1 Forside: I dette nummer kan du læse en artikel om den sukker-sure gylle. Forsøg viser, at ammoniakudledning til luften kan sænkes med op til 70% ved at tilsætte sukker til gyllen.

6 Inspirerende biotek-campus
25 unge forskere fra hele verden deltog i uge 34 i BIOPRO World Talent Campus 2015. Her fik de bl.a. et større kendskab til den danske biotek-industri.

8 Tip en 13'er
Tjek din almene kemividen i vores lille hurtige quiz. De samlede svar står på side 28.

10 Kasper Mackeprang:
Han inspireres af komplekse udfordringer
Han er kun 26 år, men han har allerede opnået meget. Han udvikler modeller til brug af vibrationel spektroskopi på hydrogenbundne komplekser. Et lille, men vigtigt bidrag til udviklingen af mere præcise klimamodeller.

12 Den miljøvenlige, sukker-sure gylle
Landbrugets skadelige ammoniakudledning til luften kan sænkes med op til 70% ved at tilsætte sukker til gyllen. Indtil videre indikerer de nyeste forskningsdata, at sukker-forsuringen er et rigtig godt alternativ til den svovlsyre-forsuring, der benyttes i dag.

16 NMR-spektroskopiens udvikling I
Læs her første artikel i en serie på tre om NMR-spektroskopiens udvikling. Artikel 2 og 3 bliver bragt i Dansk Kemi nr. 10 og 11. Første del har titlen: Fra et epokegørende fysisk fænomen til et alsidigt videnskabeligt værktøj.

20 Isolerende maling baseret på partikler af aerogel
I procesindustrien er der et stort behov for særligt fleksible og holdbare isoleringsløsninger. Det kan f.eks. være undersøiske rørledninger eller hulrum, hvor pladsen er meget begrænset. I de senere år er der kommet forskellige malinger med isolerende egenskaber på markedet. Men hvor store effekter kan man egentlig opnå med sådanne malinger?

24 Organiske solceller:
Organiske polymerbaserede solceller har mange lovende egenskaber såsom mekanisk fleksibilitet, lav vægt, mulig transparens samt lave materiale- og fremstillingsomkostninger, hvilket gør dem meget interessante som fremtidige energikomponenter.

TechMedia

Naverland 35
2600 Glostrup
Telefon 43 24 26 28
Fax 43 24 26 26

Ledelse:

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

Redaktion:

Katrine Meyn (ansvarshavende)
km@techmedia.dk
Lektor Søren Kiil
sk@kt.dtu.dk
Ph.d. Kristian B. Krogh
kbk@novozymes.com
Professor Henrik Skov
hsk@dmu.dk

Redaktionskomité:

Professor Anne S. Meyer (formand)
Professor, dr. scient. Mikael Bols
Professor Morten J. Bjerrum
(Kemisk Forening)
Professor Elo Harald Hansen
Fagkonsulent i kemi Keld Nielsen
Lektor, dr. phil. Carl Th. Pedersen
Professor Kjeld Schaumburg
Underdirektør
Lars-Erik Kruse Pedersen
Lektor, ph.d. Peter Szabo
(Kemiingeniørgruppen)
Professor, forskningschef Lars Wiebe
Adjunkt, civilingeniør, ph.d. Merete
Norsker Bergsøe
Vibeke Richter Foersom
(Næstformand, Kemilærerforeningen)
Konsulent Nikolai Stubkjær Nilsen
Procesindustrien
Seniorforsker, PhD.
Peter Have Rasmussen

Redaktionssekretær:

Heidi Thode
ht@techmedia.dk

Annoncer:

Annie Overgaard, tlf. 43 24 26 93
ao@techmedia.dk

Annonceproduktion:

Anni Jensen, tlf. 43 24 26 96
aj@techmedia.dk

Hjemmeside:

www.dansk kemi.dk

Abonnement:

Kasper Mundt-Nielsen, tlf. 43 24 26 91
e-mail: kn@techmedia.dk
Ring vedr. abonnement eller bestil direkte
på shop.techmedia.dk
under Fagblade

Layout:

Morten Malmgren

Tryk:

PE offset A/S

Trykt på miljøvenligt
papir med vegetabiliske
miljøfarver.

Oplag: 5.245
Ekspl. heraf 4.803
i betalt abonnement.
Online læsere: 3.792

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.

ISSN 0011-6335

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



Scan og hent Dansk Kemi's
medieinformation 2015 hér!

Brug for scanner? Send en
sms til 1919 med ordet "scan"
og få scanlife som app.



Sikrer analyserent laboratorieudstyr med intelligent og effektiv rengøringsproces

NYHED laborieopvaskemaskine PG 8536

- ▶ **Grundig og effektiv teknik** kan rengøre meget kraftigt tilsmudset glasapparatur
- ▶ **Intelligent måling** sikrer at det ønskede niveau for renhed opnås
- ▶ **Effektivt flow** af udstyr ved hjælp af hurtig og effektiv tørring (op til 115°C)
- ▶ **Kompakt** og kan placeres direkte i laboratoriet
- ▶ **Brugervenlig og doseringsanlæg** med plads til 4 stk. beholdere

Lad vores dygtige specialister hjælpe med at finde den optimale løsning på, hvordan I sikrer rengøringsprocessen af laboratorieudstyret – sikkert og økonomisk fordelagtigt.





Farlig Kemi

” Det er betryggende at vide, at kemiske produkter i almindelighed og plantebeskyttelsesmidler i særdeleshed har været igennem en lang, grundig og kostbar videnskabeligt baseret godkendelsesproces

Man skulle tro, at kemi og kemiske stoffer, som udgør grundlaget for vores moderne liv og er basis for alle biologiske livsfunktioner, ville have et rigtig godt image i befolkningen og i de toneangivende kredse.

Imidlertid ser man oftest det stik modsatte, nemlig at snart sagt enhver slags kemiske produkter - især stoffer, der er udviklet for at lette hverdagen, bekæmpe sygdomme eller beskytte afgrøderne - opfattes som en trussel.

Syntetisk fremstillede produkter er underkastet en generel skepsis, hvorimod naturens egen kemi i højere grad omfattes af velvilje.

Holdningen til plantebeskyttelsesmidler – pesticider – afspejler denne tendens ganske godt.

Ét er, at økologer har underlagt sig selv en række begrænsninger, der medfører en betydelig nedgang i høstudbyttet, for at adressere et stigende nichemarked med stor politisk bevågenhed.

Noget andet er, at der i visse dele af den videnskabelige litteratur har indsneget sig en politisk korrekthed: På tvivlsomt grundlag fremsættes påståede sammenhænge mellem kemiske produkter og snart sagt enhver sygdomstilstand.

Eksempelvis har vi set forbruget af ukrudtsmidlet glyphosat blive sammenholdt med Alzheimers, demens, blærecancer, sukkersyge og meget andet skrækkeligt.

Problemet med den slags studier er, at statistisk sammenhæng forveksles med årsagssammenhæng.

Forbruget af ukrudtsmidlet glyphosat har i mange år været stigende, det samme gælder for de nævnte sygdomme. Baseret på en statistisk analyse kan man let få det til at se ud som om, der er en årsagssammenhæng. Alt sammen med en høj statistisk korrelation. Man insinuerer dermed, at anvendelse af produktet er årsag til sygdommen.

At det faldende fødselstal over tid nøje korrelerer med en faldende storkebestand er der næppe nogen, der godtager som bevis på, at de små børn kommer med storken.

Uden større videnskabelig indsats eller omtanke er det desværre relativt nemt at publicere sådanne studier og få pressens bevågenhed.

Tilsvarende underlødige videnskaber, hvor der blev påstået en sammenhæng mellem MFR-vaccine og autisme, har medført, at mange mennesker stadig er skeptiske over for mæslingevaccine, selvom anklagen viste sig at være falsk.

Det er betryggende at vide, at kemiske produkter i almindelighed og plantebeskyttelsesmidler i særdeleshed har været igennem en lang, grundig og kostbar videnskabeligt baseret godkendelsesproces baseret på en reel risikovurdering, inden de har kunnet markedsføres, samt at disse vurderinger gentages med mellemrum for at tage højde for den nyeste viden.

Lars-Erik K. Pedersen, VP, Corporate Communication, Cheminova A/S
lars-erik.pedersen@cheminova.com

FOODTECH

Processing & Packaging | 1.-3. november 2016



Mød mere end 8.000 beslutningstagere på FoodTech '16 – Nordeuropas største fagmesse for fødevareteknologi

**Gør som godt 100 af dine kollegaer allerede har gjort.
Book stand nu og kom med i første placeringsrunde**

Kontakt os og hør mere om dine muligheder for at
præsentere dine produkter.



*Susanne
Hofmann*

T: 9926 9943

M: shh@mch.dk

FOODTECH '16 ER OGSÅ:

- International FOOD Contest med verdens største mejeriudstilling
- FoodTech Product News & Award. Stjernedrys og ekstra profilering af dine nyheder
- FoodLab. Specialesektor med de seneste nyheder fra DiaLab
- Netværk, vidensdeling, nye relationer og forretningsmuligheder

Næsten hver anden besøgende på FoodTech '14 fandt en ny leverandør.



*John
Jensen*

T: 9926 9938

M: jj@mch.dk



Hosting EHEDG World Congress 2.-3. november 2016



Inspirerende biotek-campus

25 unge forskere fra hele verden deltog i uge 34 i BIOPRO World Talent Campus 2015. Her fik de bl.a. et større kendskab til den danske biotek-industri.

Redigeret af Katrine Meyn

Det er en fremragende måde at skabe netværk på og dermed finde nogle mulige fremtidige samarbejdspartnere. For i dag handler videnskab om at samarbejde med andre forskere.

Ordene kommer fra tyske Robin Schumacher, en af deltagerne i årets BIOPRO World Talent Campus. BIOPRO, der er et forskningssamarbejde mellem to universiteter og fem biotekvirksomheder på Sjælland, har med støtte fra Novo Nordisk Fonden inviteret 25 unge forskere fra hele verden til at være sammen i uge 34 for at møde ligesindede og for at se, hvad Danmark rummer af karriere- og samarbejdsmuligheder.

Kommer fra hele verden

Det er tredje gang, at denne campus afvikles, og den tiltrækker unge fra hele verden. I år fra blandt andet Sydkorea, Indien, Nord- og Sydamerika.

Isuru Udugama kommer helt fra New Zealand, hvor han som kemiingeniør er i gang med en ph.d. på universitetet i Auckland. Det er især Novo Nordisks medvirken i BIOPRO, der har tiltrukket ham.

- Min mor bruger insulin, så jeg har i mange år været bekendt med, at der var en dansk virksomhed, der hed Novo Nordisk. Inden jeg kom hertil, var det min opfattelse, at Danmark levede af at dyrke korn. Jeg er ret overrasket over, hvor stor den danske biotek-branche er. Lige nu arbejder jeg inden for olie og gas, men som priserne udvikler sig der, er der måske mere fremtid i en karriere inden for biotek, siger Isuru Udugama, der afslutter sin ph.d. om et halvt år og derefter godt kan finde på at søge job i USA eller Europa.

Daniela Quintanilla er fra Mexico, men har i øjeblikket en ph.d.-stilling på DTU i Lyngby. Her forsker hun i fermenteringsteknologi i enzymproduktion. Også hun er forbavset over omfanget af den danske biotek-industri.

- I kraft af mit fagområde kender jeg naturligvis en del til Novozymes, men her på campus er jeg med i en gruppe, der arbejder med en opgave om Novo Nordisk. Vi besøgte bl.a. fabrikken i Kalundborg. Det var meget imponerende. Dels hvor stort produktionsanlægget er, dels hvor åbne de var over for



Daniela Quintanilla er fra Mexico, men opholder sig pt. på DTU i Lyngby og har på World Talent Campus arbejdet med en opgave for Novo Nordisk.

Foto: Peter Jarvad.

os. Det var tydeligt, at Novo Nordisk virkelig ønskede at give os viden, siger Daniela Quintanilla, der også ser World Talent Campus som en god mulighed for at danne et netværk til sin fremtidige karriere.

For Robin Schumacher er det internationale miljø på campus en klar gevinst. Han er fra Tyskland, har læst i Schweiz og er nu i gang med sin ph.d. på det tekniske universitet i Delft, Holland. Dette universitet har haft studerende med alle de tre gange, der har været World Talent Campus.

- Så jeg har hørt meget godt om det og søgte om at komme med i år, fordi programmet er spændende, når man som jeg forsker i gæringsprocesser. Vi er blevet præsenteret for de fem virksomheder, der er med i BIOPRO, og det er bestemt tænkeligt, at jeg vil søge et job heroppe, når jeg har min ph.d. om to år. Der er nogle spændende muligheder, kan jeg se. Jeg har også fået nogle gode input til min forskning, fortæller Robin Schumacher.

Åbenhed overrasker

De udsagn, som de tre unge deltagere kommer med, falder helt

■ Fakta om BIOPRO

BIOPRO er et samarbejde mellem Københavns Universitet og DTU Kemiteknik samt Novo Nordisk, Novozymes, DONG Energy, CP Kelco og Chr. Hansen, der alle er førende inden for bioteknologisk produktion.

I år er deltagerne kommet fra ca. 20 universiteter. De har været på Sjælland i en uge, de fleste dage med Mærsk McKinney videnscenter på Sorø Akademi som udgangspunkt.

BIOPRO World Talent Campus er arrangeret af partnerskabet bag BIOPRO med støtte fra Novo Nordisk Fonden. Forud for kurset udsender projektgruppen invitationer til 20 internationalt førende universiteter inden for relevante områder af bioteknologi. Blandt ansøgerne udvælges de 25 mest kvalificerede til at deltage. Kurset er ECTS pointgivende, som de studerende skal bruge for at opnå en ph.d.-grad. Novo Nordisk Fonden har bevilliget støtte til at holde World Talent Campus én gang årligt i fem år.

i tråd med campussens formål, siger Jesper Bryde-Jacobsen, direktør for BIOPRO.

- Vi vil gerne anspore de unge til at danne netværk, men også få et indblik i den danske biotek-branchen, der er på højt internationalt niveau og derfor en attraktiv karrieremulighed. Og som det helt unikke er vores campus et mix af undervisning og praktiske opgaver, hvor deltagerne kommer helt tæt på virk-

somhederne og skal løse nogle helt konkrete problemstillinger. Måske kommer de unge ikke med en fuldt brugbar løsning, men de har altid nogle ideer og vinkler, der kan inspirere virksomheden.

- At vi har nogle spændende biotekvirksomheder i Danmark, tror jeg, at de fleste af deltagerne ved på forhånd. Men de bliver altid meget overraskede over, hvor åbne virksomhederne er over for dem. Og det kommer også bag på dem, at universiteter og virksomheder har så indgående et samarbejde, som vi har i BIOPRO, siger Jesper Bryde-Jacobsen.

Politisk begejstring

- Et internationalt udsyn er i en globaliseret verden enormt vigtigt for studerende, uddannelsesinstitutioner og virksomheder. Derfor kan jeg kun bakke op om initiativer som BIOPRO-partnerskabet og World Talent Campus. Forhåbentlig er de både med til at gøre os klogere, skabe frugtbare netværk i udlandet og tiltrække dygtige udlændinge til Danmark for at studere og arbejde, siger uddannelses- og forskningsminister Esben Lunde Larsen.

Ministerens positive syn på initiativet deles af regionsrådsformand Jens Stenbæk:

- Region Sjællands bioteknologiske virksomheder ligger i den globale superliga, og med World Talent Campus bliver det globale potentiale endnu en gang understreget. Det er mit store håb, at virksomhederne i den sjællandske biotekklynge kan blive ved med at befrugte hinanden, som vi har set i samarbejdet omkring BIOPRO, og at de samtidig kan tiltrække nye talenter fra ind- og udland.

Nyt om Giver ilt lungekræft?



Blandt amerikanerne falder antallet af tilfælde af lungekræft med 12,7% af middeltallet for hver 1.000 m, de lever over havets overflade. F.eks. reduceres iltindholdet i atmosfæren 34,9% fra Imperial County i Californien (-11 m) til San Juan County i Colorado (3.473 m), og lungekræfthypigheden aftager ca. 44%. Tallene er rensede for andre variable, der kunne tænkes at påvirke hyppigheden, og lignende sammenhæng findes ikke for andre kræfttyper.

Paracelsus - Philippus Aureolus Theophrastus Bombastus von Hohenheim (1493–1541) formulerede sætningen "Dosis facit venenum" - giftighed afhænger af dosis. Det er højst sandsynligt, at ilt, der danner mange reaktive radikaler, er et eksempel på denne sammenhæng.

Carsten Christophersen

Lung cancer incidence decreases with elevation: evidence for oxygen as an inhaled carcinogen. K. P. Simeonov og D. S. Himmelstein (2015), PeerJ 2:e705 <http://dx.doi.org/10.7717/peerj.705>.

DANDIAG

Din partner inden for salg, service og kalibrering af laboratorie- og pipetteringsudstyr

mLINE multipack med 30% rabat

Multipack 1 + 2 indeholder 3 stk. enkelt kanal pipetter samt 1 stk. linearstander

Multipack 3 indeholder 4 stk. enkelt kanal pipetter samt 1 stk. linearstand

Multipack 4 indeholder 1 stk. 8 kanal pipette, 3 stk. enkelt kanal pipetter samt 1 stk. linearstand

Multipack 5 indeholder 5 stk. enkelt kanal pipetter samt 1 stk. linearstand

Tilbuddet er gældende til den 31/10-2015

Dandiag A/S
Baldershøj 19

DK-2635 Ishøj
Tlf. +45 4343 3057

www.dandiag.dk
dandiag@dandiag.dk

www.logd.dk

Tip en 13'er

Tjek din almene kemividen i vores lille hurtige quiz.

De samlede svar står på side 28

Spørgsmål-1

Hvem fik i 1993 Nobelprisen for at udarbejde PCR-metoden (Polymerase Chain



Reaction)? Metoden blev udarbejdet i 1985 og bruges til nemt at kopiere DNA.

- ☐ Kary Banks Mullis
- ☐ James Watson
- ☐ Friedrich Crick

Spørgsmål-2

Lige siden stenalderfolket dulmede smerte med udtræk fra bulmeurt har mennesket været på jagt efter den

ultimate bedøvelse. Hvilket smertestillende middel var det, der blev brugt under Den Amerikanske Borgerkrig i

1861-65 – og som gav mere end 400.000 soldater “soldatsygdommen” – dvs. de blev afhængige?

- ☐ Løttergæs
- ☐ Pilebark (salicin)
- ☐ Morfin

Spørgsmål-3

I 1941 raser krigen i Nordafrika. I løbet af få måneder får tusindvis af de tyske soldater dysenteri og mange dør. De

tyske læger ved, at dysenteri skyldes bakterien Shigella dysenteriae. De indfødte skynder sig at spise frisk kamellort, når

de får dysenteri? Og de bliver raske igen. Hvilken bakterie er det i den friske kamellort, der kan helbrede sygdommen?

- ☐ Bacillus subtilis
- ☐ Clostridium perfringens
- ☐ Deinococcus radiodurans

Spørgsmål-4

Forskning tyder på, at farvestoffet curcumin kan have gunstige helbredsmæssige

egenskaber for mennesker. Hvilket krydderi indeholder typisk 0,6% curcumin?



- ☐ Paprika
- ☐ Karry
- ☐ Oregano

Spørgsmål-5

I Det Døde Hav har vandet ingen steder at løbe hen. Det kan kun fordampe.



Derfor er vandet ekstremt salt, men hvad er saltprocenten?

- ☐ 5%
- ☐ 20%
- ☐ 35%

Spørgsmål-6

Hvilke bønner har det højeste koffeinindhold?

- ☐ Guarana-bønner
- ☐ Kaffebønner
- ☐ Kakaobønner



Spørgsmål 7

Hvad hed det enzym, der blev introduceret i forvask- og iblødsætningsmidlet Bio-Tex

i 1965, og som muliggjorde fjernelse af pletter, der ellers var umulige at få has på?



- ☐ Lipolase
- ☐ Alcalase
- ☐ Lipex

Spørgsmål 8

Ekspllosiv, der optræder i Europa i det 15. århundrede som en blanding af salpeter (kaliumnitrat), kul og svovl?



- ☐ Den græske ild
- ☐ Krudt
- ☐ Skydebomuld (nitrocellulose)

Spørgsmål 9

Svaret på dette spørgsmål er et farvestof, der er kemisk nært beslægtet med indigo. Det er

det ældste kendte organiske pigment, det mest stabile og det dyreste. Men hvilket er det?



- ☐ Purpur
- ☐ Maya-blåt
- ☐ Alizarin

Spørgsmål 10

Jordalkalimetallerne tilhører 2. hovedgruppe, idet de altid har oxidationstal +2 og

skaber divalente ioner. Hvilke stoffer tilhører ikke gruppen af disse jordalkalimetaller?

- ☐ Magnesium
- ☐ Bærium
- ☐ Rubidium

Spørgsmål 11

Marine algetoksiner produceres af forskellige arter af alger og opkoncentreres i organismer som f.eks. muslinger. Hvil-

ken toksin udgør det primære problem i relation til muslinger i Danmark?

- ☐ PSP-toksiner (Paralytic Shellfish Poisoning)
- ☐ DSP-toksiner (Diarrhetic Shellfish Poisoning)
- ☐ ASP-toksiner (Amnesic Shellfish Poisoning)

Spørgsmål 12

Hvad var det i de gamle tape- ter i den romerske 1600-tals villa, der gjorde den ameri-

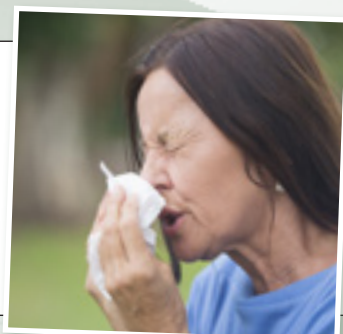
kanske ambassadør i Italien så syg, at hun i 1953 frygtede, hun var ved at blive forgiftet?

- ☐ Arsenik
- ☐ Strychnin
- ☐ Cyanid



Spørgsmål 13

Pandemier opstår, når store dele af jordens befolkning udsættes for virus, som de ikke er modstandsdygtige over for. Det kan ske, når en subtype dukker op igen



efter mange års fravær. Eller når der sker større ændrin- ger i virus ved mutationer. Hvilken subtype havde den spanske influenza i 1918?

- ☐ H1N1
- ☐ H2N2
- ☐ H3N2

Kasper Mackeprang:

Han inspireres af komplekse udfordringer

Han er kun 26 år, men han har allerede opnået meget. I 2008 vandt han bronze til kemiOL, i år fik han Eliteforsk Rejsestipendie og deltog i Lindau Nobel Laureate Meeting. Han udvikler modeller til brug af vibrationel spektroskopi på hydrogenbundne komplekser. Et lille, men vigtigt bidrag til udviklingen af mere præcise klimamodeller.

Af Katrine Meyn

Kasper Mackeprang har næsten altid følt sig fascineret af det naturvidenskabelige område. Allerede i folkeskolen synes han både fysik, kemi og matematik er sjovt, og han er ikke i tvivl. Han vælger både kemi og matematik på A-niveau, da han starter på Nærum Gymnasium i 2005. Det er det rigtige valg. Den gode erfaring med de naturvidenskabelige udfordringer fortsætter. Området falder Kasper nemt, og det giver ham en enorm tilfredsstillelse at løse konkrete problemer og få svar på dem.

- Det generede mig, at der ikke rigtig var et facit i f.eks. dansk, men i de naturvidenskabelige fag fik man oplevelsen af at – Yes! Nu har jeg løst problemet, forklarer han entusiastisk.

Bronze i kemi

De gode takter i kemi betyder, at Kasper bliver indstillet til at deltage i udtagelsesprøverne til Kemiolympiaden 2008. Og som han selv udtrykker det, så gik det rigtig godt, og han ender med at kvalificere sig til Kemiolympiaden i Ungarn. Rejselegatet modtager han af daværende undervisningsminister Bertel Haarder.

- Det var en enorm spændende oplevelse, der sammenlagt strakte sig over 10 dage. Der var en praktisk og en teoretisk prøve. Og jeg blev så opslugt af oplevelsen, at jeg helt glemte, at jeg havde fødselsdag samme dag som den teoretiske prøve, fortæller han og fortsætter:

- Det var en god oplevelse, som bekræftede mig i, at det her var jeg god til.

Kemi på KU

Kasper bliver student i 2008 og fortsætter med at læse kemi på KU. Da han på blok 3 får et kursus i kvantekemi – begynder han at ane, hvilken vej han vil følge. Faget udfordrer ham, og han føler, at han bruger sit potentiale. Forstået på den måde, at han får stillet sin lyst til at forstå og forklare ting, han ikke forstår.

- Det er i øvrigt nok et basalt grundlæggende behov for folk med naturvidenskabelig tankegang - at man ønsker at forstå sammenhænge, siger han.

Det, der især tiltaler ham ved faget, er, at han her kan kombinere matematik med kemi.

Senere bliver han introduceret for kurserne beregningskemi og videregående kvantekemi, hvilke også er klare hit.

Vigtigt program

Sidste halvdel af tredje år laver Kasper Mackeprang sit bachelorprojekt. Et arbejde han stadig nyder godt af. Det lykkes ham at skrive et program, der kan løse den en-dimensionelle tidsafhængige og tidsuafhængige Schrödinger-ligning. Nok er det matematiske niveau ud over det sædvanlige, men det er netop den kombination af mange faktorer, der fanger lysten og interessen.

- Schrödinger-ligningen kan kun løses eksakt for de aller-simpleste systemer, og derefter er man nødt til at approksimere. Man kan lave gode approksimationer, men de tager meget lang tid at løse. Det, jeg gjorde, var at lave en version, der hurtigt kan løse et en-dimensionelt problem, fortæller han.

Kaspers far dør 1½ måned efter, han har færdiggjort sin bachelor. Det er en hård tid, og det betyder, at han i endnu højere grad kaster sig over sit studie.

Fokus på vibrationer

Professor Henrik G. Kjærgaard ser muligheder i Kasper og fremtidig brug af hans program. Sidstnævnte kan bruges til studiet af vibrationer. Et område Kasper vælger at arbejde videre med i den 4+4 ph.d. (den strækker sig over fire år og inkluderer det sidste år af kandidatuddannelsen), han får tilbud om.

Han begynder arbejdet med at undersøge vibrationer vha. local mode-teorien – en af mange vibrationelle teorier.

- Med local mode-teorien studerer vi vibrationer meget lokalt. Når den vibrationelle mode for et system, skal afdækkes, opstilles Schrödinger-ligningen – og her kommer min model fra bachelorprojektet i god brug, fortæller han.

Et af målene med Kaspers ph.d. er at udvikle endnu en model.

- De teoretiske simuleringer af vibrationerne i hydrogenbundne komplekser er yderst svære at foretage. Der findes adskillige modeller og metoder til at foretage disse simuleringer. Vi arbejder med at afdække, hvor godt forskellige hydrogenbundne komplekser er bundet til hinanden, og hvilke ligevægtskonstanter kompleksene har. Det kan gøres vha. vibrationel spektroskopi. Her undersøger vi især en speciel vibration, hvor H-atomet, der er involveret i hydrogenbindingen, strækker sig frem og tilbage. Eksperimentelt er dette stræk oftest den eneste vibration, der er isoleret og intens nok til, at man kan observere den. For at kunne bestemme, hvor meget kompleks, der er dannet, sammenligner vi målingerne i laboratoriet med teoretiske

simuleringer, hvilket kræver meget nøjagtige simuleringer, men teoretisk er denne vibration meget svær at simulere, og der findes ikke rigtig nogen modeller, der kan beskrive strækket særlig præcist, forklarer Kasper.

Kaspers arbejde resulterer i LMPT-modellen - local mode perturbation theory-modellen.

Test af LMPT-modellen

- Vi begyndte nu at teste LMPT-modellen på små systemer for at se, om den virkede. Det gav rigtig gode resultater.

Kasper Mackeprang starter med at afprøve modellen på to H_2O -molekyler. Han laver sine beregninger og får gode resultater. Modellen virker. Arbejdet resulterer i en artikel.

Næste trin er at afprøve andre typer af systemer. Han vælger at undersøge $\text{H}_2\text{O}-\text{NH}_3$ og $\text{H}_2\text{O}-\text{N}_2$ for at undersøge, om modellen også virker på $\text{O}-\text{H}-\text{N}$ -bindinger og ikke kun $\text{O}-\text{H}-\text{O}$ -bindinger. Det gør den. Også dette arbejde resulterer i en artikel.

I øjeblikket undersøger han en række større bimolekylære komplekser, eksempelvis $\text{CH}_3\text{OH}-(\text{CH}_3)_2\text{NH}$.

- Jeg har lige nu en serie af tolv komplekser, som jeg undersøger. Resultaterne ser rigtig lovende, siger han.

Eliteforsk Rejsestipendie 2015

I februar 2015 modtager Kasper Mackeprang Eliteforsk Rejsestipendie på 200.000 kr. Det gives til unge talentfulde ph.d.-studerende som med prisen får mulighed for at rykke deres studier til de bedste internationale universiteter for en periode.

- Jeg har allerede brugt over halvdelen af pengene på Schweiz, hvor de arbejder med en model, der kan undersøge, hvordan atomerne vibrerer i systemer med dobbeltbundne hydrogenbindinger, siger han.

Resten af rejselegatet skal han bruge til at besøge kolleger og deltage i konferencer i bl.a. Spanien, Polen, Frankrig og USA.

Lindau Nobel Laureate Meetings

I sommers vælger Det Frie Forskningsråd at sende Kasper Mackeprang og to andre unge forskere af sted til Lindau Nobel Laureate Meetings. I konferencen deltager 65 nobelpristagere i rundborde diskussioner og til plenumssessioner, foredrag og forskellige sociale aktiviteter.

Formålet er at inspirere og motivere unge talenter til at gøre fremtidens store opdagelser - eller måske endda blive fremtidens nobelprismodtagere.

- Alt gjorde indtryk, men især åbningsceremonien gav gåsehud. Det var intenst at se 65 nobelpristagere på én gang. Jeg var meget interesseret i at høre de personlige historier. En af dem, der gjorde størst indtryk, var Stefan Hells foredrag, hvor han fortalte, hvordan ingen oprindeligt troede på, at det var muligt lave optiske mikroskoper, der kunne se detaljer ned på nanoskala. Men i dag er den slags mikroskoper en realitet verden over. Han fik en idé, han brændte for, og som han gjorde alt for at få testet igennem i praksis. Det var virkelig inspirerende, fortæller Kasper.

Fremtiden er åben

- På Lindau-mødet var der mange sessioner, der satte fokus på de udfordringer, man kan få både i det akademiske miljø og i



Kasper Mackeprang kan lide at undervise og på første år af ph.d.-studiet bliver han kåret til årets ph.d.-underviser af de studerende. Her har han lige modtaget Eliteforsk Rejsestipendie 2015.

industrien, og det gav mig nogle nye tanker i forbindelse med, hvilken retning jeg skal tage efter ph.d.'en.

Men indtil videre vil jeg bruge det sidste år af min ph.d. på at finde ud af, om jeg vil ud i industrien og få nogle helt nye erfaringer eller om jeg vil fortsætte arbejdet med teoretisk vibrationel spektroskopi på hydrogenbundne komplekser, slutter Kasper.

Pipettecenteret

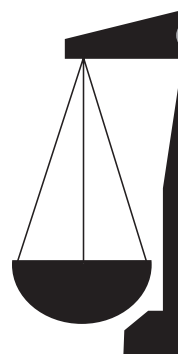
Kalibrering og service af alle fabrikater pipetter.

Vi kalibrerer både ved indsendelse eller på kundens adresse.

Salg af pipetter og laboratorie varer.



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



Den miljøvenlige, sukker-sure gylle

Landbrugets skadelige ammoniakudledning til luften kan sænkes med op til 70% ved at tilsætte sukker til gyllen. Indtil videre indikerer de nyeste forskningsdata, at sukker-forsuringen er et rigtig godt alternativ til den svovlsyre-forsuring, der benyttes i dag. Det kan blive til stor glæde for bl.a. den økologiske landmand og diverse biogasanlæg.

Af Maibritt Hjorth og Anders Peter S. Adamsen, Institut for Ingeniørvidenskab, Aarhus Universitet

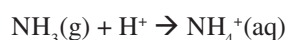
Hælder du sukker i sovsen derhjemme, bliver sovsen sød. Men har du gylle i gryden, kan gyllen i stedet blive sur. Og henter du græs fra græsplænen og putter det i gryden med gylle, kan det samme ske. I gyllen kan græssets kulhydrater nemlig nedbrydes til forgærbare sukre, som i gyllens iltfrie forhold omsættes af gyllens mikroorganismer til eddikesyre og mælkesyre.

Landbrugets ammoniakudledning har stor negativ indvirkning på Danmarks planteliv og biodiversitet i kvælstof-følsomme arealer. Samtidig ville landmanden ønske, at han blot kunne beholde ammoniakens kvælstof til at gødske sine afgrøder.

Derfor er der stor fokus på at udvikle miljøteknologier til at mindske afdampningen af ammoniakken. Blandt de mest udnyttede er svovlsyre-forsuring af gyllen, som mindsker andelen af den let-afdampelige ammoniak i gyllen. Indtil videre indikerer data, at sukker-forsuringen er et lovende alternativ til svovlsyre-forsuringen.

Hvorfor sænkes ammoniakudledning ved forsuring?

Udledning af ammoniak sænkes ved forsuring, fordi den gasformige ammoniak omdannes til væskeformig ammonium:



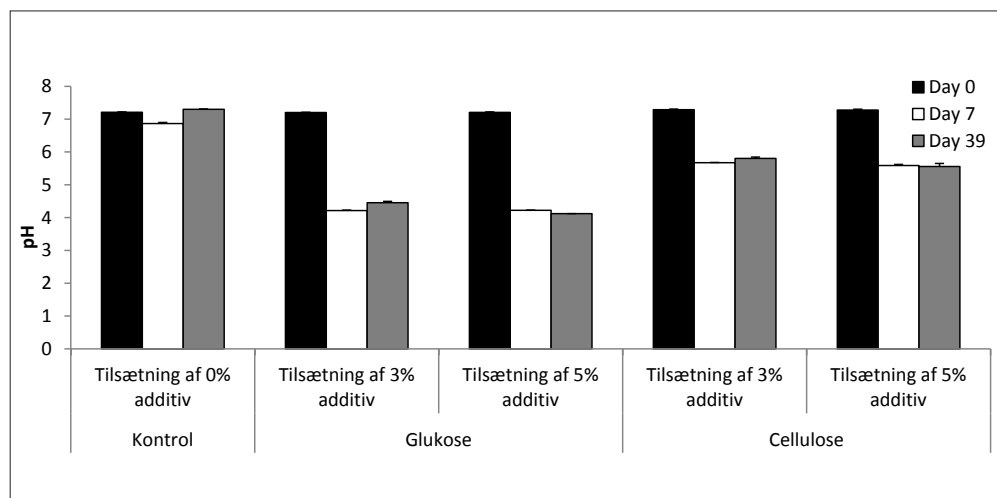
Ved gyllens normal-pH omkring 7,2 foreligger ca. 1 procent som ammoniak. Som ammoniakken afdampes under de mange håndteringer af gylle, forskydes ligevægten mod dannelse af mere ammoniak, og mere kan afdampe. Resultatet bliver, at der typisk afdamper op til 40% af gyllens ammonium, fra den er produceret i stalden, til den er udspredd på marken. Sænkes pH til 5,6 foreligger kun ca. 0,02% som ammoniak; og 0,001% ved pH 4,2.

Altså falder ammoniak-udledningen voldsomt ved at reducere gyllens pH-værdi.

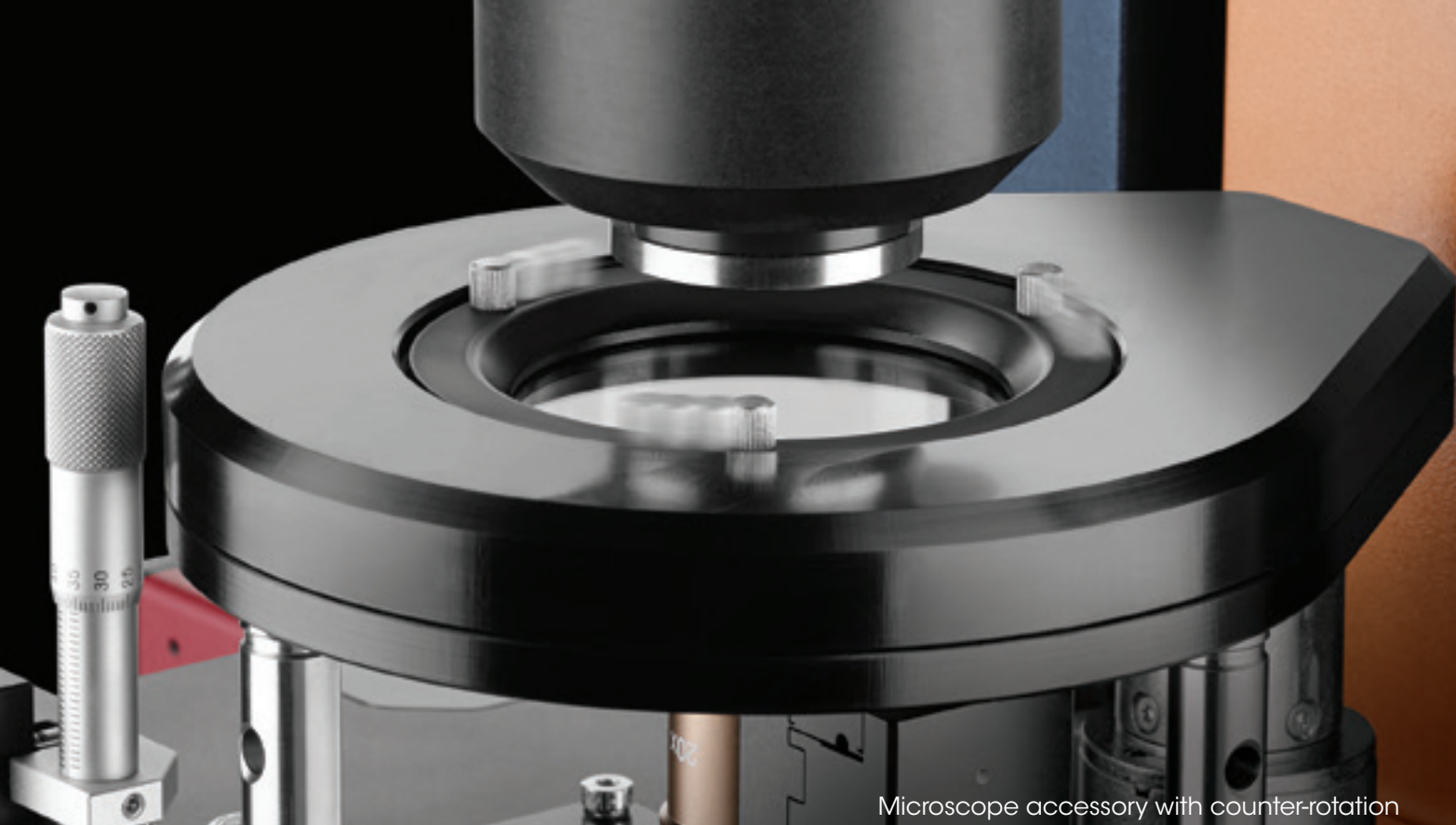
Observationer i svinestalde med svovlsyre-forsuring til pH 5,5 viser, at ammoniakudledningen dermed mindskes med ca. 70%. Eftersom det centrale for reduktionen af emissionen er pH-værdien, og ikke typen af syre, forventes det at være uden betydning for emissionen, om syren er den typisk anvendte svovlsyre, eller om det er de syrer, som kan dannes fra sukker.

Kan sukker virkeligt forsure gyllen?

For at undersøge, om organiske syrer faktisk kan dannes af bakterier fra sukker i gyllen, er der på Aarhus Universitet i løbet af 2014-2015 blevet gennemført en lang række behandlinger af gylle i laboratoriet i små 0,3 L beholdere. Kvæggylle er blevet tilført forskellige doser af mælkesyre-producerende bakterier, hydrolyserende enzymer, glukose, cellulose, stivelse og forskellige biomasser som melasse, majsensilage og halm. Titrering af gyllen med saltsyre blev anvendt som rettesnor for doseringerne. Gylle og additiver blev delvist udskiftet løbende for at simulere forholdene i staldens gyllekanal. Både pH og gyllens sammensætning blev løbende observeret.



Figur 1. Tilsætning af glukose eller cellulose til gylle sænker pH-værdien til 4,2 eller 5,6. Dette skyldes omdannelse af glukose til mælkesyre, og omdannelse af cellulose til eddikesyre og propionsyre. Niveaueet kan holdes stabilt i mere end fire uger.



Microscope accessory with counter-rotation

The World's Most Versatile Platform for Rheological Measurements

The Discovery Hybrid Rheometer combines the most accurate rheological measurements with the most extensive line of easy-to-use environmental systems and accessories, ensuring you have the right rheometer for every job.

Accessories

- Axial DMA: Tension, 3-Point Bending, Cantilever and Compression
- Tribology
- Magnetorheology
- Microscopy including Counter-Rotation
- Interfacial
- Small Angle Light Scattering
- Electrorheology
- Dielectric
- UV Curing
- Extensional Viscosity
- Pressure Cell
- Starch Pasting Cell

Environmental Systems

- Standard and Advanced Peltier Plate Systems
- Peltier Concentric Cylinders
- Pressure Cell
- Upper Heated Plate
- ETC Oven with Air Chiller System
- Electrically Heated Plates



www.tainstruments.com

I Danmark stammer 97% af ammoniakudledningen fra landbruget. Af de 97% udgøres ca. 80% af husdyrenes møg og urin. Typisk fordampes 40% af kvælstoffet fra gyllen i stald, lager og ved udbringning på mark.

Forsuringen blev faktisk en succes ved sukker-behandlingerne. pH blev sænket fra pH 7,2 til 5,6 ved tilsætning af cellulose, figur 1, side 12. Og pH blev sænket til 4,2 ved tilsætning af glukose. pH-reduktionen var stabil efter første uge og i de efterfølgende fire uger, som forsøget kørte. Sukkerdosen har stor indflydelse på pH-effekten. Tilsætning af 3% sukker i gylle (= 30 g glukose pr. kg gylle) gav lavere pH end 1% sukker i sukker. Mens 10% gav samme lave pH som 3%.



Lille beholder med gylle, omgivet af sukker, stivelse og cellulose - og i baggrunden melasse, majs ensilage og halm.

Tilsætning af mælkesyre-producerende bakterier og tilsætning af hydrolyserende enzymer har til gengæld endnu ikke vist sig at være en fordel. I stedet er den naturlige forekomst af bakterier og hydrolyserende enzymer i gyllen tilsyneladende tilstrækkelig til at omsætte sukrene.

Hvorfor sænker sukkeren pH-værdien?

Forventningen var, at glukosen ville blive omdannet til mælkesyre. Når gyllen fik tilsat 3-10% sukker, endte pH-værdien på 4,2 (4,0-4,5). Antallet af mælkesyre-producerende bakterier blev tredoblet. Glukose- og mælkesyreindholdet blev målt efter fire uger og begge dele var til stede. Altså omdanner mælkesyre-producerende bakterier glukosen til mælkesyre. Tilstedeværelsen af mælkesyre bekræftedes af den lave pH-værdi på 4,2, da mælkesyres pKs-værdi er 3,8. At rest-glukose var til stede efter fire uger viser, at omdannelsen til mælkesyre kun foregik, indtil pH-værdien var 4,2. Så bakterierne kunne omsætte glukosen til syre, indtil en pH-værdi på ca. 4,2, og derefter stoppede omdannelsen.



Forventningen var, at stivelsen og cellulose ville blive hydrolyseret til glukose og efterfølgende til syre. Ved tilsætning af 3-10% cellulose eller stivelse i gyllen faldt pH til 5,6 (5,5-5,8). Mængden af mælkesyre-producerende bakterier var uændret i forhold til ubehandlet gylle. Ved måling efter fire ugers behandling var der forhøjede indhold af eddikesyre og propionsyre, men ingen mælkesyre og ingen glukose tilstede. Tilsætning af β -glukonase og xylanase havde ingen effekt på pH-værdien målt efter fire dage. Fraværet af glukose viser, at det indledende hydrolysetrin var hastighedsbegrænsende for omdannelsen.

Alternative metoder til at reducere ammoniakemissionen:

1. Ændringer i foder, f.eks. til lavere proteinindhold eller ændret aminosyre-sammensætning.
2. Gulvskrabere i stalde.
3. Kølning af gyllekanaler.
4. Overdækning af gylletanke.
5. Nedfældning af gyllen i marken.

Men at den testede tilsætning af hydrolyserende enzymer ikke kunne forbedre det. Det fremgår altså, at eddikesyre og propionsyre er dannet i stedet for mælkesyre. Ikke mindst af den opnåede pH-værdi på 5,6, da pKs for de to syrer er 4,8. Det viser altså, at acido-/acetogene bakterier producerer eddike- og propionsyrer. Det bekræftes yderligere af, at flere af disse bakterier i modsætning til mælkesyrebakterierne kan producere hydrolyserende exoenzymer.

Hvis syren nedbrydes, når tilsætningen af sukrene er stoppet, vil pH stige igen. Ved lagring af prøver efter tilsætningerne var stoppet, sås det, at pH i nogle prøver steg op til normalt niveau efter to uger, nogle efter seks uger, og nogle ikke inden for to måneder. Der er efter tre ugers lagring blevet målt et tab på 16% af det tilsatte kulstof; dette kan forklares med et tab fra gyllen. Produktion af metan blev observeret ved pH-værdier over 5,5. Kuldioxid-produktion blev observeret ved alle pH-værdier, om end især ved højere pH-værdier. Derfor blev den producerede syre sandsynligvis nedbrudt til kuldioxid ved lave pH-værdier og til både metan og kuldioxid ved højere pH-værdier. Forklaringen kan være, at ved pH 4,0-5,5 nedbrydes mælkesyre primært til eddikesyre og kuldioxid, hvilket øger pH på grund af eddikesyrens højere pKs-værdi. Og når pH kommer over 5,5, omdannes eddikesyren via metanogenesen til metan og kuldioxid. Dette vil altså resultere i fjernelse af syren, og dermed stigning i pH.

Hvad skal landmanden hælde i sin gylle?

Gylle kan altså forsures ved blot at tilsætte en sukkerkilde. Tilsætning af 2-3% glukose, cellulose eller stivelse til gyllen kan sandsynligvis sænke pH-værdien til de ønskede 5,5. Tilsættes der mere, vil den lave pH-værdi sandsynligvis være stabil i længere tid. Landbrugets rest-biomasser såsom melasse, majsensilage, dybstrøelse eller halm kan potentielt set erstatte det testede rene sukker eller cellulose. Alle disse produkter kan indeholde syrer, frit sukker, hemicellulose, stivelse eller cellulose. De indledende tests med roemelasse, soyamelasse, foderroer, majsensilage og halm har vist lovende resultater.

■ Projektet er primært finansieret af Grønt Udviklings- og Demonstrationsprogram (GUDP) under Fødevareministeriet. Projektet er udført i samarbejde med SEGES, Agrotech, Lallemand og Jørgen Hyldgaard Staldservice A/S.

Hvad skal vi forvente nu?

Et pilotanlæg er netop under opsætning, hvor det skal fastlægges, hvordan løbende behandling af en større gyllemængde kan foretages i praksis. Hermed vil ammoniak-udledning kunne reduceres med de 70 procent svarende til forsuring med svovlsyre, men ved at tilsætte en sukkerkilde i stedet. Landmanden vil potentielt set dermed kunne udnytte sin egen rest-biomasse bedre i dag, end når den som i dag blot spredes direkte ud på marken eller sælges til et biogasanlæg. Han vil nemlig sandsyn-

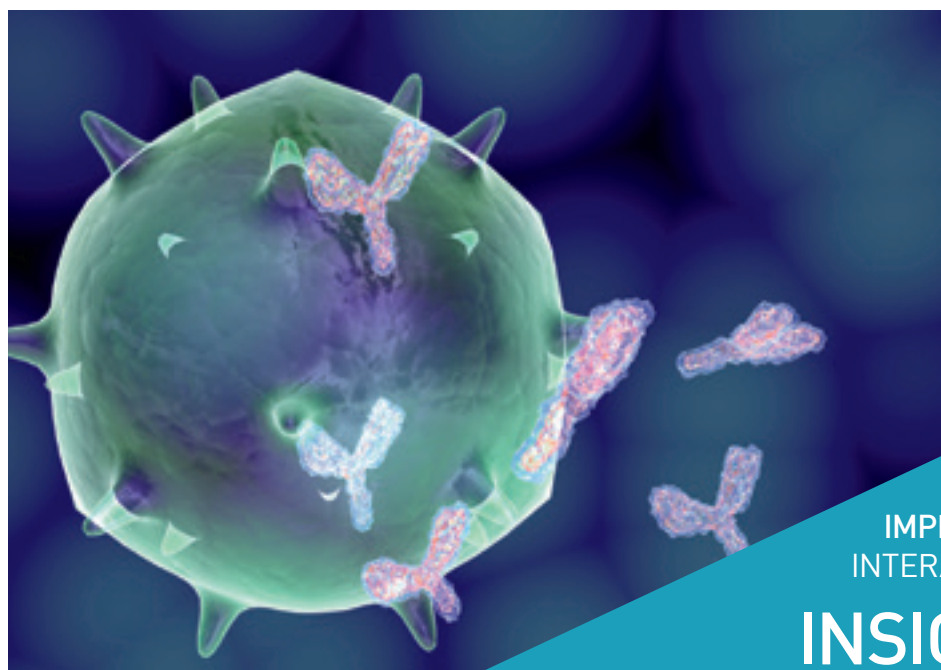


ligvis kunne udnytte samme biomasse både til forsuring i stald, samtidig med den traditionelle udnyttelse efterfølgende. Den økologiske landmand, der ikke må anvende svovlsyre på sin gård, kan anvende denne miljøvenlige teknologi. Og biogasanlæggene, som hæmmes ved tilførsel af mere end 10% svovlforurenet gylle, vil kunne udbytte biomassen bedre og producere mere biogas.

E-mail:

Maibritt Hjorth: maibritt.hjorth@eng.au.dk

Anders Peter S. Adamsen: apsa@eng.au.dk



PARTICLE SIZE



PROTEIN CHARGE



LABEL-FREE BINDING ANALYSIS



MICROCALORIMETRY



PARTICLE CONCENTRATION

IMPROVE
INTERACTION

INSIGHTS

STREAMLINE PROCESS - SAVE TIME - EXPERT SUPPORT

Enhance your education for free by registering at: www.malvern.com

Malvern | Material relationships

Dette er første artikel i en serie på tre om NMR-spektroskopiens udvikling. Artikel 2 og 3 bliver bragt i Dansk Kemi nr. 10 og 11.

NMR-spektroskopiens udvikling I

Fra et epokegørende fysisk fænomen til et alsidigt videnskabeligt værktøj.

Af Jens Jørgen Led*,
Kemisk Institut, Københavns Universitet

NMR-spektroskopi, eller kerne magnetisk resonansspektroskopi, har gennem de sidste 70 år udviklet sig fra at være et epokegørende fysisk fænomen, som kun fysikere var interesseret i, til at være et alsidigt videnskabeligt værktøj. Den er i dag et af de væsentligste værktøjer inden for den analytiske kemi og en værdifuld metode til studier af dynamiske og kinetiske fænomener, herunder protonudvekslinger og elektronoverførende processer og proteins dynamiske forhold. Hertil kommer, at NMR-spektroskopi er en udbredt teknik inden for strukturbiologi, som kan måle sig med, og supplere røntgenkrystallografien, foruden at den er en rutinemæssig metode til billeddannelse inden for diagnostisk radiologi. Endelig er den en velegnet fremgangsmåde til at studere metaboliske funktioner i levende celler og en væsentlig metode inden for materialeforskning.

Jeg skal her, i en serie på tre artikler, kort beskrive NMR-spektroskopiens baggrund og dens indførelse i Danmark, nærmere betegnet ved Kemisk Institut, Københavns Universitet, og illustrere dens anvendelse og udvikling til studier af bio-makromolekyler med eksempler fra den forskning, jeg og min gruppe, Protein-NMR Gruppen, har udført samme sted. Artiklerne her bygger i væsentlig grad på et foredrag, jeg holdt over emnet i Kemisk Forening den 23. marts 2015.

I den relativt korte beskrivelse af NMR-spektroskopiens udvikling vil det ikke være muligt at give en detaljeret gennemgang af de enkelte områder, som NMR-spektroskopi har fundet anvendelse inden for.

NMR-spektroskopiens fødsel

En given grundstofisotop, hvis atomkerne har et magnetisk moment, absorberer energi ved en ganske bestemt radiofrekvens (resonansfrekvens), når isotopen befinder sig i et magnetfelt (B_0 -feltet). Dette fænomen, der kaldes det kernemagnetiske resonansfænomen, blev første gang observeret i 1946 af Felix Bloch og en række andre fysikere [1,2], som alle havde en baggrund i udviklingen af radarteknikken under 2. verdenskrig. Opdagelsen førte til, at Felix Bloch og Edward Purcell, figur 1, sammen fik Nobelprisen i fysik i 1952.

Imidlertid mente de fleste fysikere på det tidspunkt, at reso-

nansfrekvensen var en fundamental konstant, der var karakteristisk for den pågældende grundstofisotop. Det kom derfor som en stor overraskelse, da det blev påvist, at ^{14}N -kernerne i ammoniumnitrat har to forskellige resonansfrekvenser [3]. Resonansfrekvensen er således ikke en fundamental "konstant", men er givet ved:

$$\nu = (\gamma/2\pi) B_0(1 - \sigma) \text{ Hz} \quad (1)$$

hvor σ , der er af størrelsesordenen 10^{-6} , er et udtryk for den skærmning af magnetfeltet B_0 , som de kemiske omgivelser i molekylet forårsager. Da σ varierer med de kemiske omgivelser, vil også resonanssignalets beliggenhed i spektret i forhold til et referencesignal, det såkaldte *chemical shift*, variere og være givet ved:

$$\delta = (\nu - \nu_{\text{ref}}) / \nu_{\text{ref}} \times 10^6 \text{ ppm} \quad (2)$$

hvor ν_{ref} er referencesignalets frekvens. Mange fysikere kunne imidlertid ikke forestille sig, at de kemiske omgivelser i et molekyle kunne give anledning til en sådan ændring af resonansfrekvensen, og de mente, at der måtte være tale om en fejl. Så de mistede interessen.

Det gjorde nogle visionære kemikere derimod ikke. De indså hurtigt det enorme analytiske og identifikationsmæssige potentiale, der lå i NMR-teknikken på grund af sammenhængen mellem *chemical shift* og de kemiske omgivelser. For at kunne se de meget små *chemical shift*-ændringer var det nødvendigt med et magnetfelt, der var tilstrækkeligt homogent. Samtidig skulle det være homogent over et tilstrækkeligt stort volumen, da der på grund af NMR-teknikkens ringe følsomhed skulle anvendes relativt

store stofmængder. Et sådant magnetfelt kunne firmaet Varian Associates i Silicon Valley levere.

Firmaet blev grundlagt af de to amerikanske ingeniører, brødrene Russell og Sigurd Varian i 1948. Det havde som hovedformål at fremstille klystroner, som er strålingskilden i radaranlæg, og som de to brødre havde opfundet, mens de under 2. verdenskrig deltog i radarprojektet. Varian-brødrene var dog



Figur 1. Felix Bloch og Edward M. Purcell fik Nobelprisen i Fysik i 1952 "for their discovery of new methods for nuclear magnetic precision measurements and discoveries in connection therewith".

også interesseret i nuclear magnetic resonance-teknikken og udviklede de første kommercielle NMR-spektrometre, hvoraf spektrometret Varian A-60 blev en stor succes til analytisk kemiske formål. Dette skyldtes ikke mindst, at Varian havde oprettet et "Application Lab" og blandt andet ansat den visionære kemiker Jim Shoolery.

Introduktionen af NMR-spektroskopien i Danmark

Det første NMR-spektrometer i Danmark var et Varian A-60 spektrometer, figur 2, til optagelse af ^1H NMR-spektre med protonreferencefrekvens, ν_{ref} på 60 MHz. Det blev installeret på Københavns Universitets Kemiske Institut, ved det, der dengang hed Kemisk Laboratorium V. Det skete i begyndelsen af 1960'erne på initiativ af professor Børge Bak, figur 3, side 18.

Børge Baks interesseområde var spektroskopien og især mikrobølgespektroskopien, som han var en internationalt kendt pioner inden for. I den forbindelse havde han i 1950'erne besøgt Varian Associate for at skaffe klystroner, som også blev brugt som strålingskilde i mikrobølgespektrometre. Her traf han Jim Shoolery, som overbeviste ham om NMR-spektroskopis store potentiale inden for den analytiske kemi. Med det nye Varian A-60 spektrometer fik Børge Bak og hans medarbejdere hurtigt optaget en samling ^1H NMR-spektre af knap 100 af de mest almindelige organiske forbindelser - en samling, der kom til at indgå som en væsentlig del af det øvelseskursus i spektroskopi, som Institutet gennemførte de følgende ca. 40 år, og som de fleste studerende fra Kemisk Institut sikkert husker, da kurset var en obligatorisk del af 1. dels-uddannelsen (i dag bachelor-uddannelsen).

NMR-spektroskopien blev hurtigt en udbredt teknik - også ved andre forskningsinstitutioner, idet den i vid udstrækning erstattede den våde kemi til identifikation af organiske forbindelser. Endvidere blev teknikken forbedret ved at øge magnetfeltstyrken, hvorved ikke blot spredningen af spektrets signaler øges (jf. ligning 1 og 2) men også spektrometrets følsomhed, som er givet ved $S/N \propto (B_0)^{3/2}$, hvor S og N er intensiteten af hhv. signal og støj.

Omkring 1967 blev Varian HA-100 NMR-spektrometret installeret ved Kemisk Laboratorium V, figur 4, side 18. Det blev finansieret af Universitetets egne forskningsmidler og kostede godt 600.000 kr., hvad der dengang svarede til 15-20 videnskabelige medarbejders årsløn - en finansiering, der ville være ganske utænkelig i dag. ►



Figur 2. Et Varian A-60 NMR-spektrometer som det, der blev installeret ved Kemisk Laboratorium V, Københavns Universitet i begyndelsen af 1960'erne.

DMA Generation M

Several thousand possible instrument combinations ensure that your future requirements are already met today.

info.se@anton-paar.com
info.fi@anton-paar.com
info.dk@anton-paar.com
www.anton-paar.com



Anton Paar



Figur 3. Børge Bak, professor ved Kemisk Laboratorium V, Københavns Universitet indtil slutningen af 1982.

Med en referencefrekvens for protoner på 100 MHz, svarende til en magnetfeltstyrke på ca. 23.5 kGauss (2.35 Tesla) var grænsen for styrken af en elektromagnet med jernkerne nået, og andre teknikker måtte tages i brug for at forøge dispersionen og signal/støj-forholdet.

Det første kvantespring: Puls-Fourier Transformations-teknikken

Det første kvantespring i udviklingen af NMR-spektroskopi var indførelsen af Puls-Fourier Transformation (Puls-FT)-teknikken i 1966, som Richard R. Ernst og Wes A. Anderson udviklede, mens de var ansat hos Varian. Kombineret med multiscan-teknikken betød den en dramatisk forøgelse af S/N-forholdet [4]. Indtil da havde man benyttet continuous wave (cw)-teknikken, hvor man i løbet af ca. 100 sek. varierer frekvensen af et svagt radiofrekvensfelt (RF-felt) inden for det protonfrekvensområde, som kernernes resonansfrekvenser dækker. Ved de magnetfeltstyrker (B_0 -felter), der anvendes i praksis, svarer dette område til 1.000-2.000 Hz, inden for hvilket man vil observere et signal, hver gang resonansbetingelsen er opfyldt. Af tekniske grunde var det som oftest B_0 -feltet, der blev varieret (felt sweep), og RF-frekvensen, der blev holdt fast. Ved Puls-FT-teknikken derimod exciteres alle signaler samtidigt ved hjælp af en enkelt kraftig RF-puls. Det tidsafhængige henfald af kernernes magnetisering (FID = Free Induction Decay), som excitationen resulterer i, vil ved en Fouriertransformation give spektret. Da hele Puls-FT-processen tager omkring 1 sek., kan man i princippet optage spektret 1.000 gange inden for



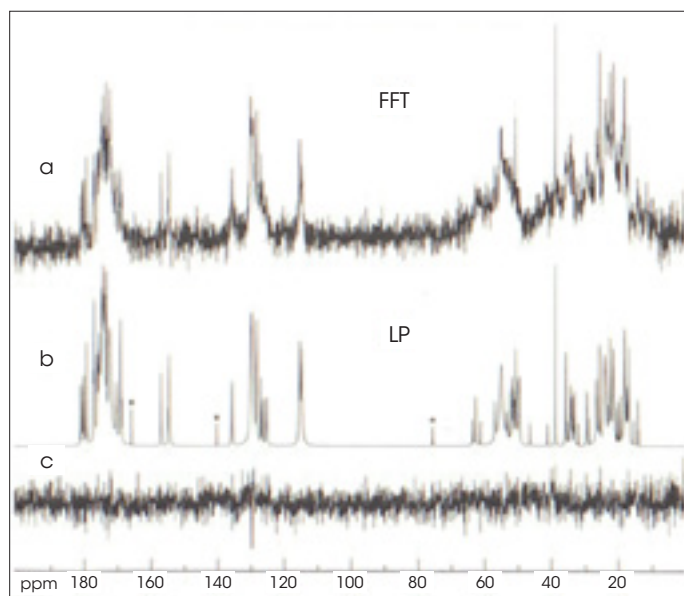
Figur 4. Et Varian HA-100 NMR-spektrometer som det, der blev installeret ved Kemisk Laboratorium V, Københavns Universitet omkring 1967.

samme tidsrum, som det tager at optage et enkelt cw-spektrum og ved at addere de enkelte Puls-FT-spektre kan man i princippet forøge S/N-forholdet og dermed følsomheden med en faktor $(1.000)^{1/2} \approx 30$.

Fremkomsten af kraftigere magnetfelter frembragt ved hjælp af superledende elektromagneter førte til yderligere forbedring af den spektrale dispersion og spektrometrenes følsomhed. Det første spektrometer med en superledende magnet i Danmark, blev installeret på Kemisk Laboratorium V, Københavns Universitet. Det var et Bruker HX-270 spektrometer, figur 5, med en proton referencefrekvens på 270 MHz svarende til en magnetfeltstyrke på ca. 63.4 kGauss (6.34 Tesla). Spektrometret blev finansieret af Statens Naturvidenskabelige Forskningsråd og var det første spektrometer, som også andre statslige forskningsinstitutioner uden for Københavns Universitet, f.eks. DTU og OU, havde adgang til.

Computernes øgede regnekraft gjorde det efterhånden også muligt at foretage andre former for dataanalyser af de basale NMR-signaler end FT-analysen for at forøge dispersionen og signal/støj-forholdet. Et godt eksempel er de Linear Prediction (LP)-analyser, som Henrik Gesmar udviklede under sit ph.d.-studium ved Kemisk Laboratorium V. LP-teknikken er især velegnet til analyse af komplicerede NMR-spektre som f.eks. et ^{13}C NMR-spektrum af insulin optaget med ^{13}C i naturlig forekomst, figur 6. Den eneste forudsætning for at kunne foretage en LP-analyse er, at de tidsafhængige henfald, som FID-signalet indeholder, er Lorentzfunktioner, hvilket med god tilnærmelse gælder i praksis.

Resultatet af en LP-analyse er de fire parametre, der karakteriserer ethvert NMR-signal, dvs. signalets frekvens, ν , inten-



Figur 6. 67.9 MHz ^{13}C NMR-spektrum af porcine insulin med ^{13}C i naturlig forekomst (~1%). (a) FT spektrum; (b) LP-spektrum fremkommet ved LP-analyse af det samme FID som FT-spektret, de tre markerede signaler (*) er artefakter; (c) differensen mellem de to spektre kun indeholdende støj. (Led JJ, Gesmar H, Hejnæs KR, Hansen FB, *J. Am. Chem. Soc.* 1988, 110, 4165-4167).

sitet, I , liniebredde, R_2 og fase, ϕ . Ud fra disse parametre kan man herefter beregne det endelige spektrum uden støj som vist i figur 6b. Udviklingen af LP-teknikken ved Kemisk Laboratorium V førte til mere end 15 publikationer i førende internationale tidsskrifter [5,6], og gav anledning til stor international opmærksomhed og anerkendelse.

De mange forbedringer af den spektrale dispersion og signal/støj-forholdet betød, at man ved hjælp af NMR-spektroskopi kunne studere større og større molekyler. Det var - og er - dog



Figur 5. Et Bruker HX-270 NMR-spektrometer som det, der blev installeret ved Kemisk Laboratorium V, i midten af 1970'erne som det første NMR-spektrometer i Danmark med superledende magnet.



Fig. 7. Besøg hos Pave Johannes Paul II i Vatikanets Sala del Consistorio i 1984.

fortsat vanskeligt at få detaljeret information om biologiske makromolekylers struktur og funktion ud fra de en-dimensionale spektre (spektre med kun en frekvensakse) på grund af deres enorme kompleksitet - med mindre man kan identificere enkelte specifikke signaler, som har betydning for makromolekylernes biologiske funktion. Et eksempel på det sidstnævnte er signalerne fra $\text{CO}_2/\text{HCO}_3^-$ -substratet i nærværelse af enzymet kulisyreanhydrase. Her blev det vist, at enzymets aktivitet kan bestemmes ved at måle relaxationshastigheden af ^{13}C -kernerne fra $^{13}\text{CO}_2$ og $\text{H}^{13}\text{CO}_3^-$ -substraterne i nærværelse af enzymet og efterfølgende bestemme $^{13}\text{CO}_2 \rightarrow \text{H}^{13}\text{CO}_3^-$ -omdannelseshastigheden såvel som de to ^{13}C relaxationshastigheder og afstanden mellem metalionen og ^{13}C kernen i det

intermediære metalion- $\text{H}^{13}\text{CO}_3^-$ -kompleks ud fra signalintensiteternes tidsafhængigheder [7].

Med den store udvikling af NMR-spektroskopien, der således fandt sted i disse år, blev der afholdt et utal af større og mindre konferencer om emnet verden over. En af de mere markante fandt sted i Rom i 1984 og indbefattede et besøg hos Pave Johannes Paul II i Vatikanets Sala del Consistorio, figur 7.

E-mail:

Jens Jørgen Led: led@chem.ku.dk

* Jens Jørgen Led er ph.d. og Dr. Scient. Han blev ansat ved Kemisk Institut, Københavns Universitet i 1968, hvor han har været leder af Protein-NMR forskningsgruppen samme sted fra 1986 til 2008. Han er i dag docent emeritus samme sted.

Referencer

1. Bloch F., Hansen W.W., Packard M., Nuclear Induction. *Phys. Rev.* **1946**, 69, 127-127.
2. Purcell E.M., Torrey H.C., Pound R.V. Resonance Absorption by Nuclear Magnetic Moments in Solids. *Phys. Rev.* **1946**, 69, 37-38.
3. Proctor W.G., Yu F.C. The Dependence of a Nuclear Magnetic Resonance Frequency upon Chemical Compound. *Phys. Rev.* **1950**, 77, 717-717.
4. Ernst R.R., Anderson W.A. Application of Fourier Transform Spectroscopy to Magnetic Resonance. *Rev. Sci. Instrum.* **1966**, 37, 93-102.
5. Gesmar H., Led J.J., Abildgaard F. Improved Methods for Quantitative Spectral Analysis of NMR Data. *Prog. NMR Spectrosc.* **1990**, 22, 209-288.
6. Led J.J., Gesmar H. Application of the Linear Prediction Method to NMR Spectroscopy. *Chem. Rev.* **1991**, 91, 1413-1426.
7. Led J.J., Neesgaard E., Johansen J.T. Carbon-Dioxide Hydration Activity and Metal-Substrate Distances of Manganese (II) Human Carbonic Anhydrase-B Determined by C-13 Magnetization Transfer NMR. *FEBS Lett.* **1982**, 47, 74-80.

GERSTEL



Automatiseret DPX



- Hurtig prøvebehandling: ekstraktion og eluering sker i løbet af sekunder.
- Lave detektionsgrænser med typisk 0.5 - 1 ml prøve.
- God reproducerbarhed og nøjagtighed.
- Komplet on-line automatisering af prøveforberedelse med GERSTEL MPS og analyse på GCMS eller LCMS.

DPX er en metode til fastfase-ekstraktion. Pipettespidser indeholder ikke-bundet SPE-materiale som opblandes/opslættes hurtigt og effektivt ved opsuget af prøven. Ekstraktionen kan derfor udføres betydeligt hurtigere end ved traditionel SPE.

DPX-ekstraktion kan foregå fuldautomatisk med en GERSTEL MPS-sampler. Den automatiserede DPX-proces er sammen med DPX Labs patenteret af GERSTEL.



Isolerende maling baseret på partikler af aerogel

I procesindustrien er der et stort behov for særligt fleksible og holdbare isoleringsløsninger. Det kan f.eks. være undersøiske rørledninger eller hulrum, hvor pladsen er meget begrænset. I de senere år er der kommet forskellige malinger med isolerende egenskaber på markedet. Men hvor store effekter kan man egentlig opnå med sådanne malinger?

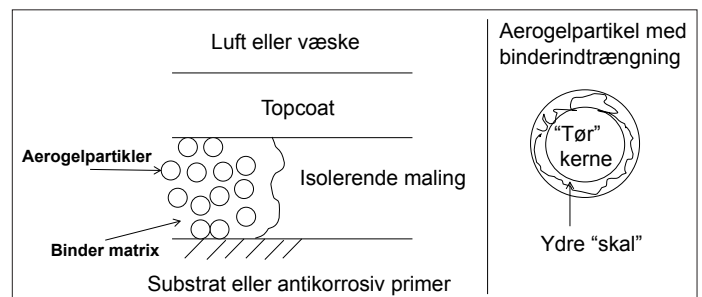
Af Søren Kiil, DTU Kemiteknik

Isolering af procesudstyr og rørføring håndteres typisk med mineral- eller glasuldsprodukter. Det er effektivt, men har den ulempe, at korrosion under isoleringen ofte ikke bliver opdaget i tide. Dermed kan der opstå rørbrud, hvorved varm væske eller damp kan trænge ud i omgivelserne. Et alternativ til mineraluldisolering er en såkaldt isolerende maling, som indeholder fyldstoffer med lav varmeledningsevne [1]. En sådan maling sprøjtepåføres i et eller flere lag til en tykkelse af nogle millimeter og er særligt velegnet til vanskelige geometrier og svært tilgængelige hulrum. Malingen giver selvsagt ikke den samme isoleringseffekt som konventionel isolering i større tykkelser, men er langt bedre end ingen isolering. Et vigtigt anvendelsesområde er beskyttelse af personale på procesanlæg ("safe-touch"-egenskaber), hvor relativt få graders forskel kan have stor betydning for graden af forbrænding, der fås ved f.eks. fem sekunders kontakt med en overflade [2].



Figur 1. Foto af aerogelpartikler, som kan anvendes i isolerende maling. Partiklerne på billedet er i størrelsesintervallet 100-1.200 μm (0.1-1.2 mm). Partikeldensiteten er 120-150 kg/m^3 , og varmeledningsevnen hævdes at være kun 12 $\text{mW}/(\text{m}\cdot\text{K})$ ved 25°C [1], hvilket er under det halve af luft. Prisen er aktuelt, ifølge [10], \$55 for 1 liter og \$792 for 20 liter af pulveret.

Isolerende malinger har igennem mange år også været anvendt til overfladebehandling af varmtvandsrør, der placeres f.eks. på havbunden. Her kan malingerne reducere varmetabet betragteligt og andre former for isolering er vanskelige at anvende. Et øget fokus ses nu også på mere traditionel rørføring, hvor det især er effektivt til lange strækninger af f.eks. olieledninger, hvor få graders forskel kan betyde store energibesparelser. Men hvilke fyldstoffer er mest velegnede til brug i en isolerende maling, hvor effektive er de, og i hvor høje koncentrationer skal de tilsættes malingen?

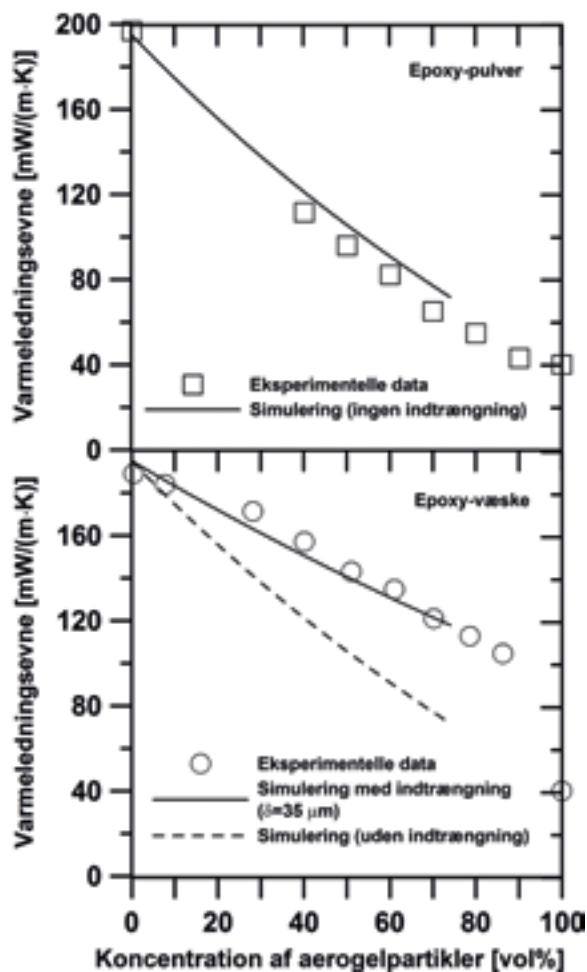


Figur 2. Skematisk illustration af tværsnit igennem en isolerende maling baseret på aerogelpartikler (venstre). Til højre ses en enkelt aerogelpartikel (ikke korrekt skaleret), hvor der forekommer binderindtrængning. Efter [8].

I en tidligere artikel i Dansk Kemi [3] blev mulighederne med isolerende maling baseret på hule mikrokapsler gennemgået. Nu er turen kommet til isolerende maling indeholdende såkaldte aerogelpartikler, hvilket er en helt anden type isoleringsmateriale.

Aerogel som isoleringsmateriale

En hærdet isolerende maling består, lidt forenklet, af et bindermateriale med et særligt fyldstof fordelt i matrixstrukturen. Alt efter funktionen, kan malingen påføres direkte på ståloverfladen (primer) eller som mellemlag i et 3-lags malingsystem. Fyldstofferne kan bestå af hule eller porøse partikler. De vigtigste typer af fyldstoffer samt nogle andre, for diskussionen relevante, materialer er vist i tabel 1. Hule mikrokapsler af borsilikatglas har højere varmeledningsevne end luft, da kugleskallen, som ganske vist er meget tynd, har en høj varmeledningsevne. Kapslerne findes også i en polymerudgave, hvor



Figur 3. Sammenligning af simuleringer og eksperimenter for varmeledningsevnen af isolerende materiale baseret på aerogelfyldstof. Øverst er brugt en faststof epoxybinder ved 180°C og nederst er anvendt en væskeformig epoxybinder. Temperaturen er omkring 40°C. Modelinputs (målt) er $k_b=195 \text{ mW/(m·K)}$ og $k_A=40 \text{ mW/(m·K)}$ [8]. Til simuleringer af den væskeformige epoxy blev også anvendt $d_p=175 \text{ }\mu\text{m}$, $k_{skal}=0.5 \cdot k_b$ samt den justerbare (men fysisk realistiske) parameter $\delta=35 \text{ }\mu\text{m}$. Efter [8].

varmeledningsevnen er en del lavere og også keramiske kapsler er tilgængelige kommercielt. Aerogelpartikler, vist i figur 1, er en særlig type materialer, der har porestørrelser mindre end 20 nm. De kan opnå en lavere varmeledningsevne end luft [4]. Den meget lave varmeledningsevne kan henføres til de meget små porer, som reducerer *mean free path* af luftmolekylerne i aerogelen sammenlignet med større samlinger af luft.

Aerogeler har mest haft interesse som forskningsemner på universiteterne og er først i de senere år blevet tilgængelige som fyldstof i pulverform. Af det globale marked for isoleringsmaterialer udgør aerogeler, som "superisolering", i øvrigt under en halv procent [4]. En væsentlig årsag til den lille markedsandel er prisen, se figurtekst til figur 1, som er langt højere end for konventionel isolering (kiloprisen, når der købes i industrielle mængder, er dog ikke forfatteren bekendt). I farve- og laklitteraturen diskuteres egnetheden af de forskellige fyldstoffer. På den ene side hævdes det, at mikrokapsler kan blive knust under dispergering og malingpåføring (højt tryk) og derved miste deres isoleringsevne [5]. Tilsvarende menes bindermaterialer og solventer måske at kunne trænge ind i aerogelernes porer [1].

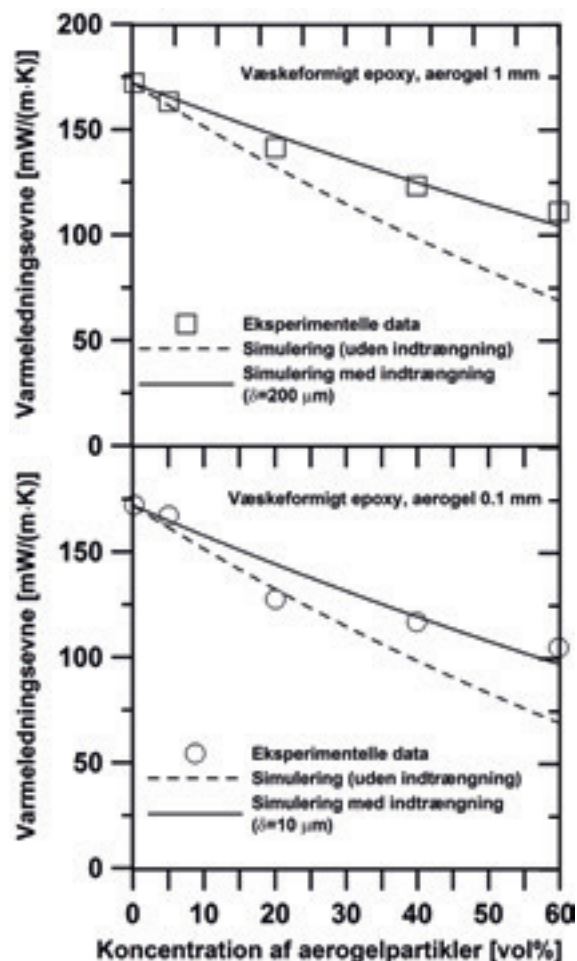
Maling baseret på aerogelpartikler

En skematisk illustration af en maling baseret på aerogelpartikler er vist i figur 2. En topcoat er anvendt øverst i malingsyste-

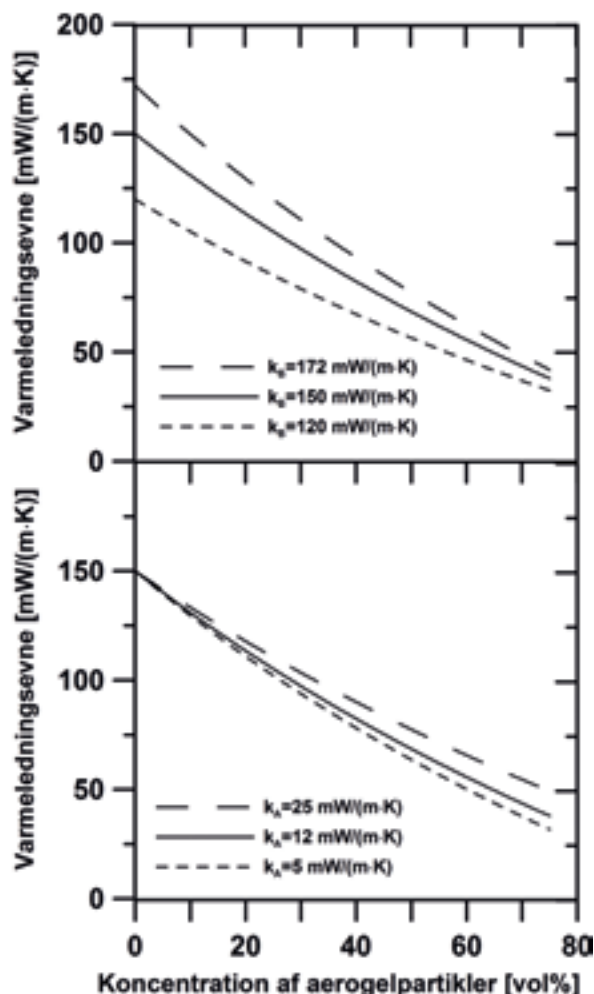
Materiale	Varmeledningsevne (mW/(m·K))
Luft	26
Silicium-baseret aerogel	12-40
Hule mikrokapsler af glas	30-200
Epoxy-binder	183
Akryl-binder	150
Polyurethan-binder	250

Tabel 1. Varmeledningsevner for forskellige materialer og luft omkring stuetemperatur.

met til at beskytte den isolerende maling mod solens skadelige stråler. Anvendes malingen indendørs eller i fuld skygge, kan topcoaten eventuelt udelades. Til højre i figur 2 er vist, igen skematisk, hvordan bindermaterialer (og solvent) kan trænge ind i aerogelpartiklerne og dermed kompromittere varmeledningsevnen. Hvorvidt det sker i praksis og i hvilket omfang diskuteres nedenfor. Kommercielt ser det ud til, at kun vandbaserede malingssystemer er realiseret. Formodentlig fordi binderindtrængning lettere undgås med højmolekylære stoffer (som f.eks. i en akryldispersion), og vandige malingssystemer (i praksis elektrolytopløsninger) kan ikke befugte den hydrophobe poreoverflade i aerogelen. En anden ting man skal være opmærksom ▶



Figur 4. Sammenligning af simuleringer og eksperimenter, der viser effekten af aerogelkoncentration og partikeldiameter på varmeledningsevnen af et isoleringsmateriale. Temperaturen er ukendt. Modelinput (målt) er $k_b=172 \text{ mW/(m·K)}$, $k_A=20 \text{ mW/(m·K)}$ og $k_{skal}=0.5 \cdot k_b$. Vægtykkelsen, δ , er en justerbar parameter, og værdierne anvendt er vist på figuren. Efter [8].



Figur 5. Simuleringer, som viser effekten på varmeledningsevnen af bindermaterialer og aerogelpartikler i en epoxy-baseret isolerende maling. Det er antaget, at der ikke forekommer nogen binderindtrængning i aerogelpartiklerne. I det øverste plot er som input brugt $k_b = 12 \text{ mW/(m·K)}$ og i det nederste plot er $k_b = 150 \text{ mW/(m·K)}$. Efter [8].

på, er, at selve formuleringen af malingen kan være vanskelig, især ved høj aerogelkoncentration, hvis f.eks. bindersystemet har en høj viskositet [1]. Da malingen skal være flere millimeter tyk, kan man ikke blot tilsætte mere solvent for at reducere viskositeten, da det kan lede til bl.a. solventretention (se tidligere Dansk Kemi artikel [6] for detaljer om det fænomen).

Matematisk model til beregning af varmeledningsevne af isolerende maling

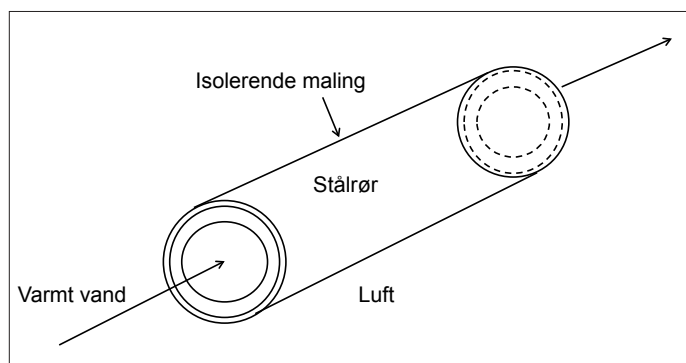
Hovedformålet med indeværende arbejde har været at udvikle en matematisk model, som kan estimere varmeledningsevnen af en isolerende maling baseret på aerogelpartikler. Med en sådan model kan man simulere effekten på malingisoleringen af vigtige parametre, som f.eks. koncentration af fyldstof og varmeledningsevne af binder og aerogel og undersøge særlige mekanismer såsom binderindtrængning i aerogelpartiklerne. Den detaljerede beskrivelse af modellen og dens eksperimentelle verificering kan findes i [8], her vil kun blive givet en meget kort gennemgang.

I udviklingen af modellen for den isolerende maling har man i første omgang brug for en strukturmodel, der kan beskrive varmeledningsevnen af malingsmatricen, i tilfældet her en binder med homogent dispergeret fyldstof. I det generelle tilfælde kan der ikke gennemføres en direkte beregning, der må suppleres med forsøg til bestemmelse af empiriske parametre, men

Symbol-liste

d_p	partikelstørrelse af aerogel-fyldstof, m
k_A	varmeledningsevne af aerogel-fyldstof, mW/(m·K)
k_B	varmeledningsevne af bindermateriale, mW/(m·K)
k_{skal}	varmeledningsevne af "skallen" i aerogel-fyldstof, se figur 2, højre side, mW/(m·K)
δ	tykkelse af "skallen" i aerogel-fyldstof, se figur 2, højre side, m

for kugleformede partikler er det muligt. Dernæst har man brug for en strukturmodel til beskrivelse af varmeledningsevnen af aerogelpartiklerne, med og uden binderindtrængning. En sådan er udviklet i [8], baseret på observationer af Zhao et al. [9]. Inputparametre til modellen er volumenkoncentration af fyldstof og målte varmeledningsevner af binder og aerogelpartikler. I tilfælde med binderindtrængning indgår to justerbare parametre, tykkelsen af den ydre "skal", se figur 2, højre side, og varmeledningsevnen af selvsamme skal. Sidstnævnte vides at have en værdi imellem varmeledningsevnen af bindermateriale og aerogelpartikel, og en gennemsnitsværdi er derfor anvendt i alle simuleringer, hvorved der kun optræder en enkelt justerbar parameter i den matematiske model. I modellen indgår kun



Figur 6. Skematisk illustration af varmtvandsrør med en isolerende maling på ydersiden. Efter [7].

algebraiske ligninger og den er derfor let at arbejde med.

Simuleringer af varmeledningsevne – pulver versus væske

I figur 3 er vist, hvordan varmeledningsevnen af en epoxy-baseret isolerende maling påvirkes som funktion af koncentration af aerogelpartikler. For ensartede kugleformede partikler, hvilket er antaget i modellen, er den teoretisk højest mulige koncentration 74 vol.%. I praksis kan man gå højere, da partiklerne udgør en størrelsesfordeling, hvilket giver en mere effektiv pakning. Øverst er vist data for en maling baseret på en binder af epoxy-pulver (højtemperaturprocesseret) og nederst for en binder af epoxy-væske. Begge bindere er faste stoffer efter hærkning. Det ses, at eksperimentelle data og simuleringer stemmer rimeligt godt overens for pulveret, når der i modellen ses bort fra eventuel binderindtrængning, men at modellen ikke kan simulere varmeledningsevnen for malingen baseret på epoxy-væske. Det lader sig kun gøre at opnå en god overensstemmelse med en antagelse om binderindtrængning. I simuleringen er anvendt en skaltykkelse, se figur 2, på 35 μm , mens aerogelpartiklerne har en målt gennemsnitsdiameter på 175 μm . Altså fysisk set en rimelig værdi for den justerbare parameter.

I figur 4, side 21, er, for et andet eksperimentelt studium, vist effekten på varmeledningsevnen af koncentrationen af aerogelpartikler i malingen. Det er interessant, at heller ikke i

dette tilfælde er det muligt at simulere de eksperimentelle data uden at inkludere binderindtrængning. Med binderindtrængning fås en god overensstemmelse. Bemærk den store forskel i aerogelpartikelstørrelse imellem den øverste og nederste del af figuren samt forskellen i indtrængningsdybden (angivet som δ i figuren). I [8] er også foretaget model- og datasammenligninger for bindersystemer baseret på akryl, polyuretan og polyvinylbutyral og en god overensstemmelse er fundet i alle tre tilfælde.

I figur 5 er simuleret effekten på varmeledningsevnen af malingen som funktion af varmeledningsevnen af bindermateriale og aerogelpartikler. Det fremgår tydeligt, at det i alle tilfælde er vigtigt med en høj koncentration af aerogelpartikler (>60 vol.%). Hvis det er opfyldt, spiller det kun en mindre rolle, hvilket bindersystem der anvendes. Det er heller ikke meget væsentligt, om aerogelpartiklerne har en varmeledningsevne som luft eller lavere, omend det bliver vigtigere jo højere en koncentration af aerogel, som anvendes.

Praktisk eksempel med isolerende maling

Slutteligt vil vi kigge på et praktisk eksempel med et varmtvandsrør (stål) placeret henholdsvis inde i og uden for en bygning. Eksemplet blev introduceret i [3], men er her udvidet med malinger baseret på aerogelpartikler. En skematisk gengivelse af røret med isolerende maling er vist i figur 6. Inde i bygningen vil der være varmetransmission ved naturlig konvektion (og stråling), mens placeringen udenfor i blæsevej involverer tvungen konvektion. Vandet i røret og selve stålrøret er 90°C. Antagelser, energibalance og andre detaljer kan findes i [7,8], blot skal det nævnes her, at det antages, at mikrokapslerne alle er intakte, og at der ikke forekommer binderindtrængning i aerogelpartiklerne. Simuleringer af malingernes overfladetemperatur mod koncentration for forskellige fyldstoffer er vist i

figur 7. Det ses, at selv uden isolerende fyldstof yder malingen en vis varmeledningsmodstand, idet overfladetemperaturen er henholdsvis 82 og 63°C i de to tilfælde mod stålets 90°C. Til sættes mikrokapsler af glas, kan overfladetemperaturen sænkes yderligere med godt 5°C ved en koncentration på 60 vol.%. Polymerkapsler er mere effektive og kan sænke temperaturen med yderligere 8-12°C. Aerogelpartikler er de mest effektive og kan sænke temperaturen med yderligere 10-16°C. Størst effekt opnås under tvungen konvektion (blæsevej).

Konklusion

Detaljerede matematiske modeller kan give et relevant indblik i, hvordan forskellige fyldstoffer påvirker varmeledningsevnen af en isolerende maling. Derudover er mekanismeforståelse værdifuld i arbejdet med udvikling af nye malingsformuleringer. Simuleringer kan også, såfremt priser på råmaterialer og energi er til stede, benyttes som supplerende information i en økonomisk vurdering af, om et malearbejde med isolerende effekt bør gennemføres. Endelig kan der også udarbejdes forslag til, hvilke formuleringer, der bør måles på i det eksperimentelle udviklingsarbejde. Det er vigtigt at fremhæve, at de mange udfordringer som uundgåeligt vil opstå i selve formuleringsarbejdet med nye isolerende malinger ikke er behandlet her. De matematiske modeller giver kun en indikation af, hvad man kan håbe at opnå.

For en uddybende beskrivelse af emnet henvises til nedenstående referencer.

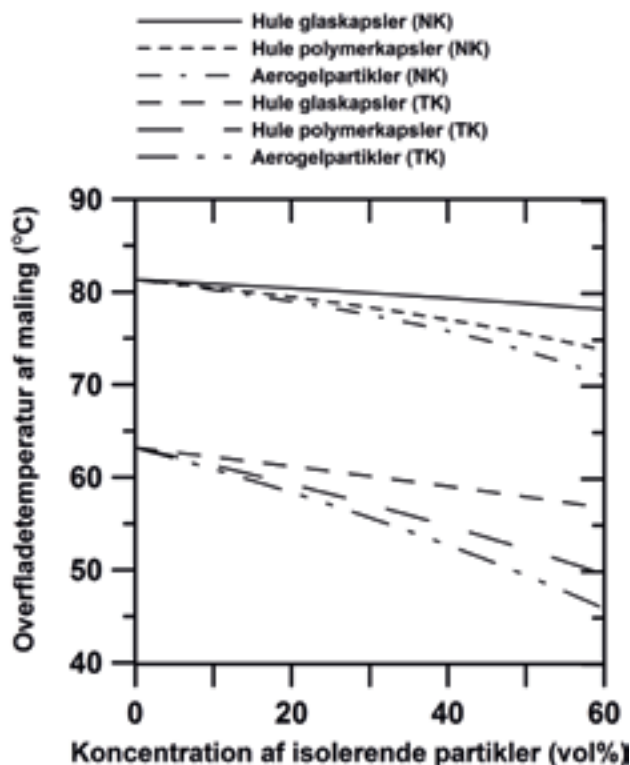
Tak til Hempel Fonden for støtte til forskningsarbejdet. Tak også til Ulrik Bork, Hempel A/S, for spændende diskussioner om emnet.

E-mail:

Søren Kiil, sk@kt.dtu.dk

Referencer

1. Achar, S., Procopio, J., Developments in waterborne thermal insulation coatings, J. Prot. Coat. Linnings., March issue, 48-59, (2013).
2. Koravos, J., Norwood, C., Pescatore, P., Pidhurney, J., Aerogel insulative coatings for personnel protection, Paint & Coatings Industry, 48-50, (Juli 2013).
3. Kiil, S. Maling som isoleringsmateriale?, Dansk Kemi, 95(3), 26-29, (2014).
4. Kistler, S.S., Caldwell, A.G. Thermal conductivity of silica aerogel, Ind. Eng. Chem., 26(6), 658-662, (1934).
5. Pidhurney, J., Pescatore, P.F., Aerogel for highly thermally insulative coatings, CoatingsTech, June issue, 46-48, (2012).
6. Kiil, S., Solventafdamning, kemisk reaktion og netværksdannelse i en og samme maling, Dansk Kemi, 91(10), 16-20, (2010).
7. Kiil, S., Model-based analysis of thermal insulation coatings, JCT Research, 11(4) 495-507, (2014).
8. Kiil, S., Quantitative analysis of silica aerogel-based thermal insulation coatings, Prog. Org. Coat., 89, 26-34, (2015).
9. Zhao, J., Ge, S., Zhang, X., Wei, X., Studies on thermal property of silica aerogel/epoxy composite, Materials Science Forum, vols. 546-549, 1581-1584, (2007).
10. Buyaerogel.com, Enova® Aerogel IC3120 Particles. Tilgængeligt 5. august, 2015.



Figur 7. Simuleringer af overfladetemperaturer af forskellige isolerende malinger (2 mm tyk) på et stålrør. Stålrørets og omgivelsernes temperatur er henholdsvis 90 og 20°C. Malingen kan indeholde mikrokapsler af glas eller polymer eller aerogelpartikler. Simuleringer for både naturlig (NK) og tvungen konvektion (TK) er vist. Efter [8].



Organiske solceller:

En lys fremtid med solenergi

Organiske polymerbaserede solceller har mange lovende egenskaber såsom mekanisk fleksibilitet, lav vægt, mulig transparens samt lave materiale- og fremstillingsomkostninger, hvilket gør dem meget interessante som fremtidige energikomponenter.

Af Vida Engmann og Morten Madsen, NanoSYD, Mads Clausen Institut, Syddansk Universitet

Der har i de sidste årtier været en stigende global opmærksomhed på, at vi er en del af et skrøbeligt økosystem med begrænsede ressourcer.

Vi lever i en begrænset og overbefolket verden, der er præget af, at vi i det 20. århundrede har overudnyttet forskellige energiformer - hovedsageligt baseret på fossile brændsler [1]. Dette vil blive et stort problem for de kommende generationer [2,3].

I 1927 var der to mia. mennesker på kloden – et tal, der i 2013 var steget til over syv mia. Den store befolkningstilvækst, kombineret med tilgængeligheden af store mængder fossile brændsler, har betydet, at vi i løbet af de sidste 140 år globalt har forbrugt en trillion tønder olie [4].

Verdens nuværende energiforbrug ligger på omkring 1.000 tønder olie, 93.000 m³ naturgas og 221 tons kul pr. sekund [5]. Denne globale trend er uholdbar af talrige miljømæssige, økonomiske og sociale årsager. Det primære problem er, at fossile brændsler ikke kan genanvendes, og at en stor del af dem er opbrugt [6]. De udvindingsmetoder, der benyttes for at udvinde den tilbageværende og ofte svært tilgængelige olie og gas, er dyre og energiinvesteringsafkastet (EROI) falder derfor drastisk [7].

Set ud fra et miljømæssigt perspektiv, er anvendelsen af de fossile brændsler ligeledes problematisk. Den årlige CO₂-emission forårsaget af fossile brændsler er på 30 Gt. Stigningen i drivhuseffekten forårsager klimaforandringer, der påvirker miljøet og medfører udryddelse af arter, skove, fødevarer sikkerhed, mangel på vandressourcer osv. [8-16].

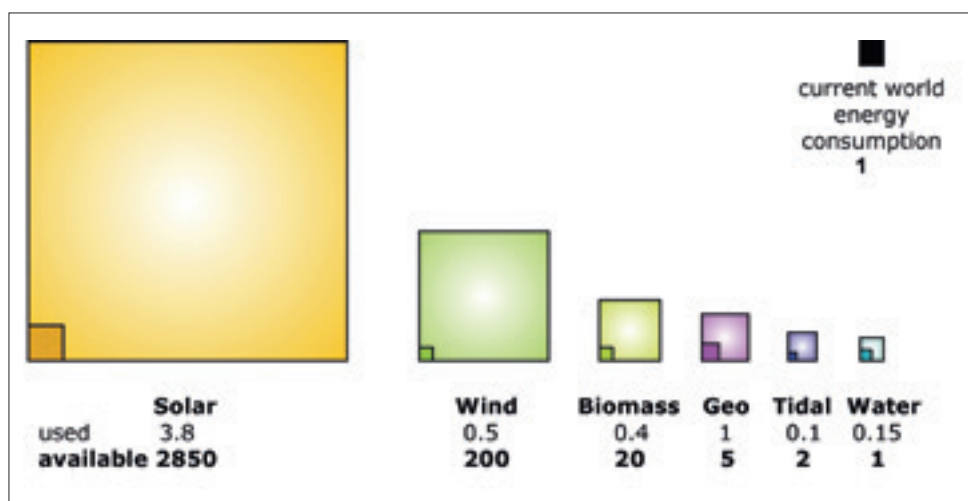
Derfor gælder det om at reducere CO₂-emissionen, og samtidig sikre nok energi til, at befolkningen kan opretholde en god livskvalitet. Dette komplekse problem kan løses ved at kombinere energibesparende tiltag med udvikling af nye vedvarende energikilder. Der er enighed om, at der er nok sol-, vind- og vandenergi og jordvarme til at dække det energibehov, vi har. I 2050, hvis det antages, at hver person bruger over syv toe (ton oil equivalent) pr. år [17-21]. Som vist i figur 1 kommer det største bidrag til den vedvarende energi fra sol i form af en bred række applikationer, deriblandt solvarme, solceller og kunstig fotosyntese.

Hvorfor organiske solceller?

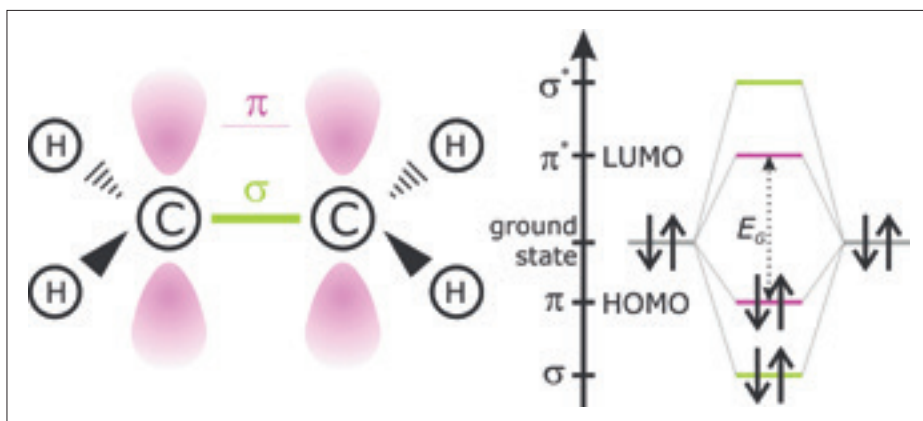
Der er utallige fordele ved polymersolceller, heriblandt mekanisk fleksibilitet, høj transparens, lav vægt, en bred række af tilgængelige farver, lave materialeomkostninger og potentialet for at blive massefremstillet i en kontinuert printproces til en lav pris. Dette har gjort det til et ekstremt populært forskningsområde i de sidste to årtier.

Denne fleksibilitet betyder, at de organiske solceller kan inkorporeres i en bred række af applikationer i f.eks. bilindustrien, i bygningsintegrerede materialer, mobilenheder, landbrug og industrielt design m.fl. Solpaneler, der kan rulles ud ovenpå taget eller andre overflader, er en mulighed i modsætning til de i dag kommercielt tilgængelige Silicium-solceller.

En anden stor fordel er, at de er lette at producere. Både første og anden generations solceller kræver højtemperatursmetoder, som kræver massive energimængder, hvorimod man kan producere polymerbaserede organiske solceller ved lave temperaturer. Produktionen kan også opskales og derved reducere omkostningen pr. areal polymersolcelle.



Figur 1. Naturligt lager af vedvarende energikilder (de store kvadrater), den del af energikilderne som er tekniske, økonomisk og økologisk tilgængelige (små kvadrater). Andelen i parentes sammen med verdens energiforbrug. Tallene under hvert kvadrat repræsenterer andelen af energi sammenlignet med verdensforbruget. (Tilpasset fra Kohl et al.[21]).



Figur 2. Skematisk repræsentation af σ - og π -bindingerne i ethanmolekyler og det tilsvarende energidiagram.

Hvordan fungerer solcellerne?

Konjugerede polymerer

I begyndelsen af 1960'erne rapporterede flere forskningsgrupper om opdagelsen af polymerer, der kunne lede elektricitet, deriblandt Donald E. Weiss om polypyrrol [22-27], og R. Buvets og M. Jozefowicz's studier af polyanilin [28-34]. Det mest berømte arbejde på området fulgte i 1970'erne, og blev udført af H. Shirakawa, A.G. McDiarmid og A.J. Heeger om polyacetylen [35-38], et arbejde der i 2000 blev belønnet med Nobelprisen i kemi. Det åbnede dørene for en bred række nye teknologier såsom fladskærme, solceller, solsensorer, medicinske implantater m.fl.

Denne type materials elektriske ledningsevne skyldes skiftende enkelt-/dobbeltbindinger mellem rygradens C-atomer (i modsætning til den isolerende polymer, hvor rygraden kun består af enkeltbindinger). Enkelbindinger er normalt σ -bindinger, mens dobbeltbindinger består af en σ -binding og en π -binding. I konjugerede polymerer er hvert af rygradens C-atomer bundet til tre tilstødende atomer, hvilket efterlader en elektron i en p_z -orbital.

Det er overlappet mellem C-atomernes p_z -orbital, der danner en π -binding, hvilket resulterer i, at elektronerne delokaliseres over hele den konjugerede rygrad. Sådanne fyldte π -bindinger repræsenterer HOMO (highest occupied molecular orbital)-tilstanden, og de tomme (π^*)-bindinger repræsenterer LUMO (lowest unoccupied molecular orbital)-tilstanden. Overgangen fra π -orbitalen (bonding) til π^* -orbitalen (antibonding) repræsenterer båndgabet, figur 2.

Elementarprocesser i organiske solceller

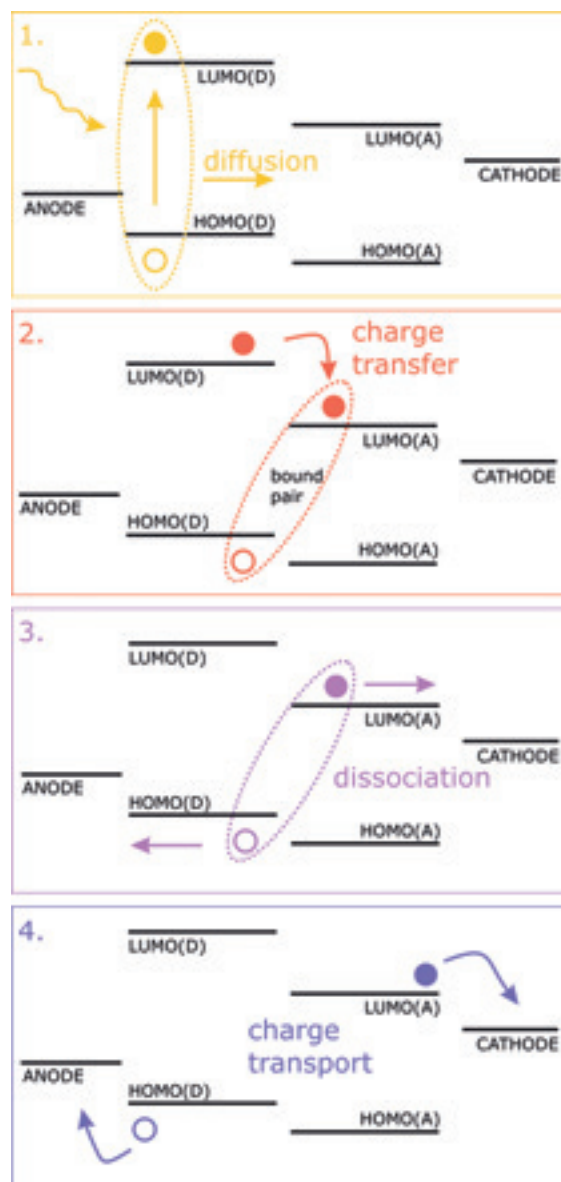
Den første rapport om den fotovoltaiske effekt i organiske materialer kom i 1959, da H. Kallmann og M. Pope beskrev den fotovoltaiske effekt for anthracen-krystaller [39]. Den opnåede fotogenererede spænding var dog kun på 0.2V og cellens effektivitet var mindre end 0.1%. Den lave effektivitet for disse devices, der bestod af et enkelt organisk materiale (homo-junction), skyldes hovedsageligt den karakteristiske lave dielektricitetskonstant for organiske materialer (2-4). Den lave dielektricitetskonstant resulterer i, at der ved belysning dannes mobile exciterede stadier, excitoner, i stedet for frie elektroner og huller i cellen. Da excitoner er stærkt bundne elektron-hul par (0.7 eV i tilfælde af P3HT [40]), er det elektriske felt, der dannes i cellen, som en konsekvens af elektrodernes forskellige løsrivelsesarbejde, ikke nok til at opsplitte (dissociere) excitonerne, og der er derfor betydelige energitab i cellen.

I 1986 kom et stort gennembrud, da C. W. Tang fra Eastman Kodak introducerede konceptet med dobbeltlags hetero-junc-

tion-solceller. Ved at tilføje perylentetracarboxylderivater som elektron acceptorlag (A) ovenpå det konventionelle kobber-phthalocyanin elektron-donorlag (D), øges effektiviteten af cellerne til ca. 1% [42]. Grunden til denne drastiske forbedring i effektivitet skyldes den mere effektive opsplitning af excitoner i dobbeltlags-cellerne, som der faciliteres af den organiske D/A-grænseflade, hvor forskellen i materialernes elektronaffinitet samt ioniseringspotentiale muliggør opsplitningen. Det resulterer i, at elektronerne bliver tiltrukket materialet med den største elektronaffinitet og hullerne af materialet med det laveste ioniseringspotentiale, og derved dannelse af frie ladningsbærere i cellerne. Da exciton-diffusionslængden af det organiske materiale er meget kortere

end filmenes absorptionsdybde, reduceres tykkelsen af det effektive energi-genererende lag dog til regionen, som er nærmest D/A-grænsefladen i dobbeltlagscellerne.

I 1995 introducerede G. Yu det banebrydende nye koncept bulk hetero-junction-solceller, hvor elektrondonor- og acceptor-



Figur 3. Fotoinduceret ladningsoverførsel i en organisk celle.

materialer mixes sammen, hvilket forøger deres grænsefladeareal, og som en konsekvens reduceres den afstand, excitonerne skal tilbagelægge for at nå grænsefladen [43]. Dette muliggør, at excitoner kan opsplittes nærmest hvor som helst i det aktive lag i cellen, hvilket drastisk reducerer energitab i cellen. Hvis der dertil eksisterer sammenhængende transportbaner i begge materialer, fra grænsefladen til elektroderne, kan man opnå en høj foton-til-elektron omdannelse i cellerne. Dette koncept er selv i dag accepteret som det mest effektive, og er derfor fremherskende i nuværende organiske solcellesystemer.

I figur 3, side 25, vises trinvis det operationelle princip i en bulk hetero-junction solcelle. I første trin absorberes en foton med energi større end polymerens energi båndgab, hvilket fører til dannelsen af en coulombisk stærkt bundet exciton.

I det andet trin diffunderer excitonen til donor-acceptor-grænsefladen, hvis afstanden til grænsefladen ikke er større end dens diffusionslængde.

Dernæst overvinder energien fra donor-acceptor-grænsefladen den coulombiske bindingsenergi grundet forskellen i donor- og acceptorens LUMO-niveauer, hvilket fører til opsplitningen af excitonen. Ved opsplitningen dannes der positive og negative polaroner, der stadig eksisterer som coulombisk bundne par. Dette polaron-par dissocieres af det interne elektriske felt, der eksisterer pga. forskellen i elektrodernes løsrivelsesarbejde, hvilket skaber frie ladningsbærere, som nu transporteres til hhv. anoden og katoden.

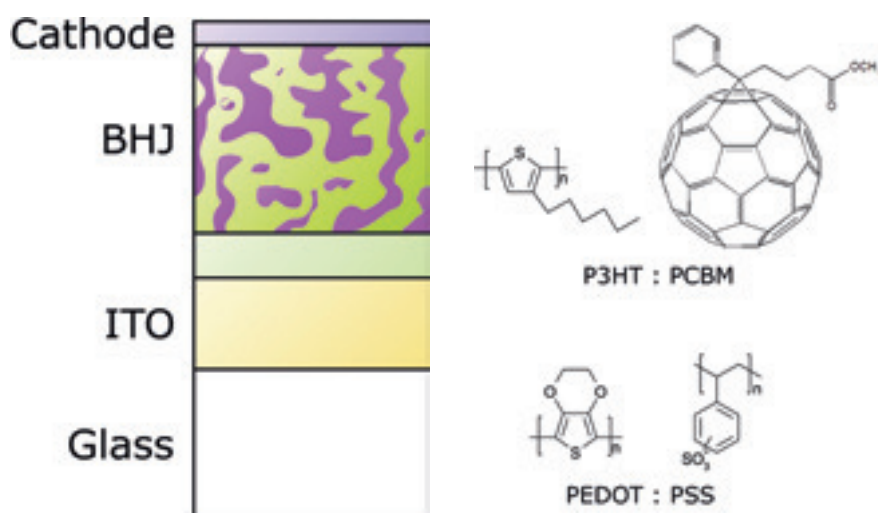
For at ekstrahere polaronerne fra det aktive lag skal anodens løsrivelsesarbejde matche donorens HOMO-niveau og katodens løsrivelsesarbejde skal matche acceptorens LUMO-niveau, hvilket sikrer ohmske kontakter.

Selvom bulk hetero-junction-konceptet fører til højere effektiviteter for organiske solceller, sammenlignet med dobbeltlagscellerne (pga. det forøgede grænsefladeareal mellem donor- og acceptorkomponenterne, vil transporten af de frie ladninger efter exciton opsplitning kun kunne foregå effektivt, hvis der eksisterer sammenhængende transportbaner fra grænsefladen til elektroderne i hver af de to materialer. Derfor er det vigtigt at finde en optimeret domænestørrelse for begge materialer i deres blanding, da større domænestørrelser favoriserer effektiv ladningstransport, hvorimod mindre domænestørrelser favoriserer effektiv exciton opsplitning. Der er undersøgt mange metoder

med henblik på at optimere morfologien i organiske solceller, både ved at undersøge de indre strukturelle parametre samt de ydre procesfaktorer, som påvirker tørringen af filmen [45-50].

Bulk hetero-junction (BHJ) solceller er typisk fremstillet i en standardarkitektur, figur 4. Sådan en celle består af det aktive lag, bestående af en blanding af polymer- og fullerenkomponenter, som er klemmt sammen mellem to elektroder. Substratglasset er coatet med tin-dopet indiumoxid (ITO), der bruges som den transparente ledende anode, da det besidder et højt løsrivelsesarbejde. Pga. ITO-lagets ruhed og for yderligere at øge anodens løsrivelsesarbejde pålægges ofte et yderligere lag af poly (3,4-ethyldioxythiophen): poly (styrensulfonat) (PEDOT: PSS) inden det aktive lag. Som katodematerialer benyttes f.eks. aluminium, magnesium og calcium.

Siden marts 1994, da Yu, Zhang og Heeger beskrev den første succesfulde skabelse af polymer: fulleren bulk heterojunction solceller [51], er en bred række af materialer blevet syntetiseret og testet med henblik på brug i de aktive lag i organiske



Figur 4. Arkitektur af en standard organisk solcelle, sammen med de kemiske strukturer af de almindeligt benyttede materialer P3HT (poly(3-hexylthiophen-2,5-diyl)) og acceptormaterialet PCBM (phenyl-C61-butyrsyremethylester).

solceller. Den seneste rekord i effektivitet er opnået af Heliatek med en 12% vakuumdeponeret oligomer multi-junction solcelle. Den store effektivitetsforbedring gennem de senere år har sat et forøget fokus på kommercialisering af teknologien.

Generelt er en kommercialisering betinget af, at effektive solceller med en relativ lang levetid og lave produktionsomkostninger kan fremstilles, figur 5. Grunden til, at organiske solceller stadig kun betragtes som eksotiske nicheprodukter er i høj grad, at de har en dårlig holdbarhed, og at der er batch-til-batch variationer af de benyttede materialer og lag.

Mens batch-til-batch-problemerne hovedsageligt kan løses gennem storskalaoprensning af materialerne, er langtidsstabiliteten af de organiske solceller stadig beskeden. Deres organiske natur gør dem særligt følsomme over for lys sammenholdt med oxygen, varme og vand [53-69], et problem, der stadig udgør en udfordring, og hvortil yderligere forsknings- og udviklingsarbejde er påkrævet, inden de organiske solceller bliver kommercielt interessante.

E-mail:

Vida Engmann: engmann@mci.sdu.dk

Litteratur til artiklen på nedenstående link:
<http://www.danskkemi-online.dk/29910-2/>



Figur 5. Skematisk repræsentation af fremtidens udfordringer for organiske solceller (tilpasset efter Brabec et al. [73,74]).

P-touch

brother
at your side

GØR ARBEJDET

LETTERE MED WIFI



P-touch LABELS
TESTET
TIL DET EKSTREME ✓



Med **Mobile Cable Label Tool**-appen udskrives labels direkte fra din mobile enhed. Få adgang til flere skabeloner, symboler og meget andet.

TRÅDLØS LABELMASKINE TIL KRÆVENDE BRUG

Med PT-E550WSP kan du let lave holdbare labels, der tåler stort set alt. Brug dem på rør, kabler, nøgler, reagensglas, værktøj og meget andet.

Lige nu får du den i en speciel udgave i en praktisk kuffert med AC-adapter, genopladeligt Li-ion batteri og hele 4 ruller tape.

Kampagnepris ex moms kr. 999,-
SPAR kr. 800,-



Læs mere på brother.dk
(Begrænset antal)

Ny sinuspumpe i Danmark

Tapflo Danmark har indgået en samarbejdsaftale med den tyske pumpeproducent SOMA Flow Components GmbH om distribution af sinuspumper i Danmark og Norge.

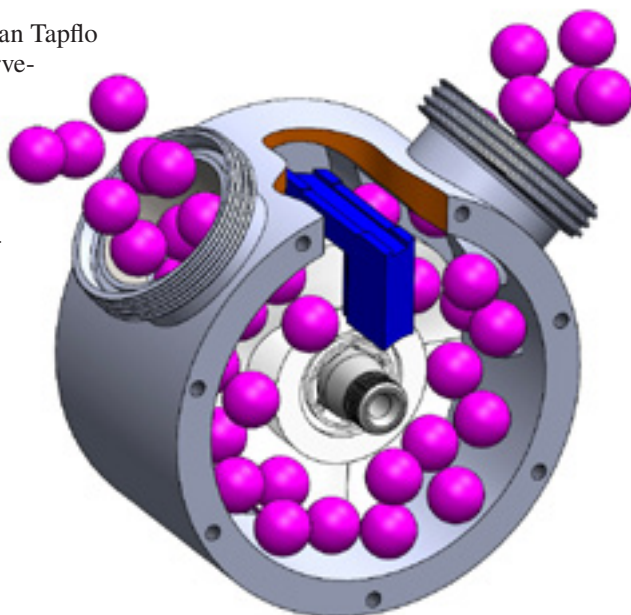
Sinuspumper er kendetegnede ved yderst skånsom pumpning, hvilket ofte er en nødvendighed inden for medicinal-, kosmetik- og fødevarerindustrien. Andre typiske grunde til, at SOMA's sinuspumper finder anvendelse, er:

- Simplicitet: Få sliddele - og 25 års garanti på pumpehuset
- Vedligehold med pumpen in-line
- Selvansugende
- Tåler tørløb
- Kompakt
- Værdi for pengene, især i SOMA's blokudførelse.

Som en følge af samarbejdet kan Tapflo Danmark nu også tilbyde reservedele til alle andre sinuspumper på markedet i dag. Alle gængse sliddele afsendes inden for 48 timer efter ordre.

Sinuspumperne kompletterer virksomhedens program af egenproducerede sanitære membranpumper, lobepumper fra IPP samt centrifugal- og turbinepumper fra SAWA.

Yderligere information:
Tapflo Danmark ApS
Flemming Ravn Sørensen
Tlf. 36 45 46 00
frs@tapflo.dk
www.tapflo.dk



Kvalitetssikring og pålidelig iltmåling i brygprocessen

Hamiltons VisiTrace DO føres nu hos Insatech.

Her er brygindustriens svar på kvalitetssikring, tidsbesparelse og pålidelig måling af opløst ilt i processen. VisiTrace DO er med sin følsomhed i lav-ppb-område og hurtig responstid din nye vagthund.

I bryggeriprocesser skal der rigeligt ilt til for at få gæringen sat i gang og starte ølproduktion. I sidste del af processen stiger sandsynligheden for oxidering, som skal undgås for at bevare øllets smag og holdbarhed. VisiTrace DO's egenskab til at måle i lav-ppb-området betyder, at du ved filtrering og påfyldning kan spore oxidering pga. sensorens hurtige responstid ved ændring af iltindhold. Dermed sikrer du kvaliteten af dit bryg.

Sensorens robuste design og special-



fremstillede Cap er stabiliseret mod desinfektionsmiddel, f.eks. aktiv klor og klordioxid, som bruges ved rengøring. Da man typisk ikke tillader kalibrering efter hver CIP (Clean In Place) gør dette VisiTrace til et let anvendeligt og stabilt instrument.

VisiTrace DO sikrer dig pålidelige målinger direkte fra din proces. Med dens

integrerede transmitter gemmes relevant data for at lette vedligehold og kalibrering. Den trådløse Bluetooth 4.0 brugerflade sikrer dig direkte indsigt i målinger, konfiguration og kalibrering.

Yderligere information
Insatech A/S, analyseafdeling
Tlf. 55 37 20 95



Svar til Tip en 13'er

- | | |
|---------------|--------------------------|
| Spørgsmål 1: | Kary Banks Mullis |
| Spørgsmål 2: | Morfin |
| Spørgsmål 3: | <i>Bacillus subtilis</i> |
| Spørgsmål 4: | Karry |
| Spørgsmål 5: | 35% |
| Spørgsmål 6: | Guarana-bønner |
| Spørgsmål 7: | Alcalase |
| Spørgsmål 8: | Kruid |
| Spørgsmål 9: | Purpur |
| Spørgsmål 10: | Rubidium |
| Spørgsmål 11: | DSP-toksiner |
| Spørgsmål 12: | Arsenik |
| Spørgsmål 13: | HINI |

Analyse

E

Elektronmikroskoper

DFA A/S/NIKON

Produktionsvej 26
2600 Glostrup
Tlf. 72 48 84 31 - Fax 72 48 84 33
ak@dfa.dk
www.dfa.dk

F

Fermentering og cellekultur-udstyr



Svanholm.com Nordisk Pharma og Analyzer Center

Tlf. 70 26 58 11 - Fax 69 80 31 33
mail@svanholm.com
www.svanholm.com
Nordens største sensor og analyzer
udvalg til lab, pilot og proces

FTIR-udstyr



Bruker Optics Scandinavia AB

Vallgatan 5
SE-17067 Solna
Tlf. +46 8 655 25 30 -
Fax +46 8 655 25 99
www.bruker.com

G

Gasdetektorer



Dräger Safety Danmark A/S

Lyskær 9
2730 Herlev
Tlf. 44 50 00 00 - Fax 44 50 00 01
draeger-safety.dk@draeger.com
www.draeger.dk

Gasser

A Member of
The Linde Group



AGA A/S

Vermlandsgade 55
2300 København S
Tlf. 32 83 66 00 - Fax 32 83 66 01
www.aga.dk
Specialgasser

L

Laboratoriearmaturer

BROEN LAB DIVISION

Skovvej 30
5610 Assens
Tlf. 64 71 20 95 - Fax 64 71 24 76
lab@broen.com
www.broen.com

M

Massespektrometre, proces



Svanholm.com Nordisk Pharma og Analyzer Center

Tlf. 70 26 58 11 - Fax 69 80 31 33
mail@svanholm.com
www.svanholm.com
Svanholm.com er distributør af
Thermo Scientific proces MS

Massespektrometre



Bruker Daltonics Scandinavia AB

Vallgatan 5
SE-17067 Solna
Tlf. +45 20 21 54 44 -
Fax +45 47 31 74 44
www.bruker.com



Svanholm.com Nordisk Pharma og Analyzer Center

Tlf. 70 26 58 11 - Fax 69 80 31 33
mail@svanholm.com
www.svanholm.com
MS til styring af fermentering og
farmaceutisk pulvertørring

Mikrobiologi, udstyr t.



Bruker Daltonics Scandinavia AB

Vallgatan 5
SE-170 67 Solna
Tlf. +45 20 58 68 66 -
Fax +46 8 655 25 99
karina.petersen@bruker.com
www.bruker.com

Mikroskoper

DFA A/S/NIKON

Produktionsvej 26
2600 Glostrup
Tlf. 72 48 84 31 - Fax 72 48 84 33
ak@dfa.dk
www.dfa.dk

N

NIR-analyse/-udstyr



Bruker Optics Scandinavia AB

Vallgatan 5
SE-17067 Solna
Tlf. +46 8 655 25 30 -
Fax +46 8 655 25 99
www.bruker.com



Svanholm.com Nordisk Pharma og Analyzer Center

Tlf. 70 26 58 11 - Fax 69 80 31 33
mail@svanholm.com
www.svanholm.com
NIR til QbD og PAT ved pulvertørring,
tabletoproduktion og fermentering

NMR-analyseudstyr



Bruker BioSpin Scandinavia AB

Vallgatan 5
SE-17067 Solna
Tlf. +46 8 655 25 10 -
Fax +46 8 655 25 99
www.bruker.com

O

Opvaskemaskiner



KEN A/S

Bøgebjergvej 60, Brobyværk
5672 Broby
Tlf. 62 63 10 91
www.ken.dk



Miele A/S PROFESSIONAL

Erhvervsvej 2
2600 Glostrup
Tlf. 43 27 11 00 - Fax 43 27 15 09
professional@miele.dk
www.miele.dk

R

RAMAN-udstyr



Svanholm.com Nordisk Pharma og Analyzer Center

Tlf. 70 26 58 11 - Fax 69 80 31 33
mail@svanholm.com
www.svanholm.com
Råvare-identifikation og
onlinemåling i R&D og GMP

Leverandørregister

Produktion

E

Etikettering

LSS Etikettering A/S
Normansvej 8
8920 Randers NV
Tlf. 70 20 25 00 - Fax 70 20 10 44
info@lss-dk.com
www.lss-dk.com

F

Faremærkning



Pekema A/S
Dam Holme 14-16
3660 Stenløse
Tlf. 44 92 62 00
pekema@pekema.dk
www.pekema.dk
www.barsafe.dk
Software til CLP mærkning, printere og etiketter.
Vi er specialister i produktmærkning

H

Hygiejne & Rengøring



Procurator A/S
Stærevej 2
6705 Esbjerg Ø
Tlf. 76 11 50 00 - Fax 76 11 50 01
info@procurator.dk
www.procurator.dk
Vi sikrer tryghed!

P

Personligt sikkerhedsudstyr



Procurator A/S
Stærevej 2
6705 Esbjerg Ø
Tlf. 76 11 50 00 - Fax 76 11 50 01
info@procurator.dk
www.procurator.dk
Vi sikrer tryghed!

V

Vægte

CBH Vægte aps
Vonsildvej 207
6000 Kolding
Tlf. 75 56 73 10 - Fax 75 56 73 20
info@cbh-vaegte.dk
www.cbh-vaegte.dk

Å

Åndedrætsværn



Dräger Safety Danmark A/S
Lyskær 9
2730 Herlev
Tlf. 44 50 00 00 - Fax 44 50 00 01
draeger-safety.dk@draeger.com
www.draeger.dk

Service & miljø

M

Miljøbeskyttelse og sikkerhed

Dansk Polyglas A/S
Industrivej 12
5672 Broby
Tlf. 62 64 12 00
www.polyglas.dk
Glasfiberarmerede miljøbokse til krævede miljøer

P

Patenter



Chas. Hude A/S
H.C. Andersens Boulevard 33
1780 København V
Tlf. 33 19 34 00 - Fax 33 19 35 00
chashude@chashude.com
www.chashude.dk



LBK PATENT ApS
Ole Maaløes Vej 3
2200 København N
Tlf. 30 50 38 78 <FAX>
lbk@lbkpatent.dk
www.lbkpatent.dk

Software

A

Arbejdspladsbrugsanvisninger og etiketter



CHYMEIA ApS
Universitetsparken 7
4000 Roskilde
Tlf. 72 40 16 22
info@chymeia.dk
www.chymeia.dk
APB/SDS software med beregning af CLP klassificeringer

Find også dansk kemi her:

www.danskkemi-online.dk

www.facebook.com/UNG.KEMI

Eksempel på optagelse i leverandørregistret:

Fagbladsforlag (produktoverskrift) - kr. 234



(fimalogo) - kr. 222

TechMedia A/S
Naverland 35
2600 Glostrup
Tlf. 43 24 26 28 - Fax 43 24 26 26
info@techmedia.dk
www.techmedia.dk

Nordens største fagbladsforlag (ekstra linie) - kr. 60

Samlet pris for ovenstående optagelse er kr. 516

Alle priser er pr. stk. pr. udgave ekskl. moms

Fall Meeting of the Division for Theoretical Chemistry with GENERAL ASSEMBLY

Friday 30th October 2015

Auditorium 2

University of Copenhagen, H.C. Ørsted Institute, Universitetsparken 5, 2100 Copenhagen

Organizer: Stephan P. A. Sauer, KU

Program: All are welcome to the lectures

- 12:00-12:55 Lunch with sandwich in front of auditorium 2 (for registered participants)
 13:00-13:45 **Poul Georg Moses** (Haldor Topsøe)
 The impact of theoretical chemistry on industrial catalysis
 13:45-14:15 **Carolín König** (Department of Chemistry, Aarhus University)
 Generation and exploitation of locality in vibrational calculations
 14:15-14:45 **Mikkel Strange** (Department of Chemistry, University of Copenhagen)
 Calculation without computation: predicting molecular conductance from the chemical structure alone
 14:45-15:15 Coffee break (for registered participants)
 15:15-15:45 **Bachelor award ceremony and lecture**
 15:45-16:30 **Jeppe Olsen** (Department of Chemistry, Aarhus University)
 Novel methods for non-orthogonal orbitals with applications to the chromium dimer and trimer
 16:30-17:00 **Patrick Ettenhuber** (Department of Chemistry, Aarhus University)
 Implementing correlation methods for the computers of tomorrow
 17:00-18:00 **General Assembly**
 (Suggestions for the agenda and names of candidates for the board can be sent to the board:
 sauer@kiku.dk until 15. October)
 18:00-20:00 Dinner in C305 (for registered participants)
- Registration:** (free for students, for members of the Society and invited speakers) until 15. October via e-mail to Stephan P. A. Sauer (sauer@kiku.dk) with the following information:

Subject: Registration to the Fall Meeting of the Division for Theoretical Chemistry

Name:

Institution:

E-mail & phone number:

Member: Yes/No

Dinner: Yes/No

Mødekalender (9) 2015

- 1.-2. 10. 2015** Dansk Elektrokemisk Forening, hovedmøde og generalforsamling kl. 14.00, Kemisk Institut, Universitetsparken 5, København, se dk 2015(8).
- 30. 10. 2015** Kemisk Forening, teoretisk sektion. Efterårsmøde og generalforsamling kl. 12.00, auditorium 2, HCØ, Universitetsparken 5, København. Se dk 2015(9)

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



Bruker AXS Nordic AB



The top-performing EDXRF S2 PUMA

- **Benchtop energy-dispersive XRF spectrometer**
- **Unmatched detection limits by Highsense™ technology**
- **Excellent performance for light elements**
- **Integrated TouchControl™ for ease-of-use**

HighSense™ is the key to the unrivaled analytical performance of the S2 PUMA. The instrument's direct excitation beam path makes full use of the 50-watt power of the X-ray tube. With the all-new instrument X-ray optics, the distances between the X-ray tube, the sample and the detector are even shorter than before. This results in better detection limits, higher precision and shorter measurement times.

S2 PUMA – The powerful EDXRF solution for your analytical needs.

Contact Tomas Sandberg, tomas.sandberg@bruker.com for more information.

www.s2puma.com