

Dansk Kemi

Nummer 2 - April 2022 / 103. årgang

Kemisk Forening - Kemiingeniørgruppen

Test af
hormon-
forstyrrende
stoffer

Feedback-
mekanismer
øger arktisk
opvarmning

Fremtidens
bæredygtige batterier

COPENHAGEN

7-8 September

LabDays 2022

- international trade fair for laboratory technology

labdays.dk



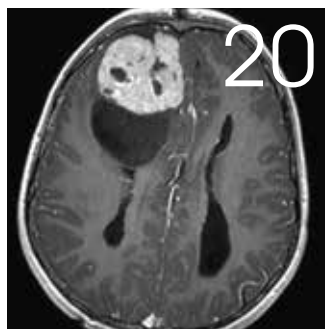
Luftakrobat og VP High Purity Europe, Niels-Erik Kongste

Mød nogle af ventilationsbranchens mest erfarne luftakrobater.

AAF/Dinair er en af verdens førende producenter af luftfiltre. Koncernen har mere end 3.000 ansatte i 22 lande. Vi har 100 års erfaring og en vision om til stadighed, at være førende indenfor global forskning og produktion på området. Som nogle af de eneste i verden, udvikler vi f.eks. HEPA filtre i PTFE - alle testet og godkendt iht. EN 1822. Filtrene både reducerer tryktab og giver en energibesparelse på op til 50%. AAF/Dinair er desuden verdens eneste producent af PAO testede Membran filtre - godkendt til bl.a. pharma produktion, også med 50% reduktion af tryktab. Disse historier og mange andre, uddyber vi gerne ved lejlighed.

Kontakt en af vores erfarne Luftakrobater i AAF Danmark på tlf.: 70 26 01 66 eller [check aafeurope.dk](http://check.aafeurope.dk)





- 1 Forside**
Det genopladelige lithium ion-batteri bruges overalt i elektronisk udstyr og præger dermed vores hverdag, men nu står genopladelige batterier over for en ny udfordring: Lagring af vedvarende energi. Foto: Freepik.com.
- 6 Arktisk opvarmning - hvad betyder transport af vanddamp sydfra?**
Læs om, hvorfor arktisk opvarmning forstærkes ved transportfænomener.
- 10 Keine Hexerei: Chlorhexidin**
Bliv klogere på nomenklatur omkring et traditionelt apoteksprodukt.
- 12 Fremtidens bæredygtige batterier**
Det genopladelige Li-ion-batteri finder stor anvendelse, men måske vi har behov for et kvantespring for at sikre bæredygtige batterier i fremtiden?
- 17 Udvikling og forbedring af tests til identifikation af hormonforstyrrende stoffer**
Hvilke tests anvendes og hvordan kan de forbedres?

- 20 Anvendelse af tidsdomæne NMR i medicinalindustrien**
Læs om, hvordan tidsdomæne NMR kan være et redskab i QC.
- 23 Kuldioxidkoncentrationer i klasseværelser**
Undersøgelse giver indblik i, hvordan det står til med indeklimaet i de danske klasseværelser.
- 25 Quantum computing: Et nyt værktøj for kemi- og biotekniske ingeniører**
Quantum computing kan hjælpe med at optimere processer.
- 28 Et glemt dansk bidrag til kvantekemien**
Den danske videnskabsmand Christian Møller har leveret et vigtigt bidrag til det kemiske fagområde.
- 30 Foreningsnyt fra IDA**

TechMedia

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

Redaktion:

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

Ledelse:

Adm. direktør Peter Christensen
Direktør Rikke Marott Schelde

Redaktionskomité:

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

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

Bladsekretær:

Heidi Thode
Tlf. 43 24 26 62, ht@techmedia.dk

Annoncer:

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

Annonceproduktion:

Marianne Dieckmann
Tlf. 43 24 26 82, md@techmedia.dk

Layout:

Trine Plass

Tryk:

PE Offset A/S

Oplag: 4.190

Online læsere: 1.279

Abonnement:

Ændring/opsigelse sendes til:
abonnement@techmedia.dk

Bestil abonnement direkte på:
www.techmedia.dk

Trykt på
miljøvenligt papir
med vegetabiliske
miljøfarver.



Citater fra artikler i Dansk Kemi skal ske med tydelig kildeangivelse. Enhver form for gengivelse af artikler, herunder illustrationer, forudsætter udgiverens skriftlige tilladelse. Redaktionen kan ikke påtage sig ansvaret for materiale, der indsendes uopfordret.

Læs bladet online:
www.dansk kemi.dk

Se også: www.kemifokus.dk

Eller find
Dansk Kemi på:  



Scan og hent Dansk Kemis
medieinformation 2022 her!
Scan med kameraet
på din smartphone.



Fra krise til krise - kemisk forskning del af løsningerne

Vi er nu på tredje år med covid-19. Heldigvis en krise som vi i Danmark langsomt er ved at lægge bag os. Dette skyldes ikke mindst dygtige biokemikere, vel nok med ungarske Katalin Karikó som den førende, der har udviklet grundlaget for vacciner baseret på *in vitro-transcribed messenger RNA*. Disse forskningsmæssige gennembrud var årsagen til en meget hurtig vaccination af store dele af verdens befolkning.

Lige som vi troede, at tingene ville vende tilbage til det normale, opstod en energikrise, der er blevet voldsomt forstærket af Ruslands invasion af Ukraine og de deraf følgende sanktioner.

Med klimaloven har vi en (langsigtet) plan i Danmark om at reducere udledningen af CO₂ med 70 procent i 2030 ved grøn omstilling. Diskussionen har indtil nu været præget af en optimisme knyttet til uprøvede teknikker og metoder, men nu er vi tvunget til, i løbet af få år, at gøre vores

energiforsyning effektiv og fri af russisk olie og gas. Det vil kræve nytænkning. Vi er tvunget til at arbejde på en strategi, hvor vi benytter teknologi, der er gennemprøvet. Ingen tvivl om, at vi i en kort årrække kommer til at bruge mere olie og kul end planlagt, men vi må også massivt øge investeringerne i vindenergi og solenergi. Biomasse kan måske være en del af løsningen, men biomasse er på lang sigt nok for vigtig en carbonkilde til at blive brugt som energikilde. Her skal kemikere rette forskningen

mod udnyttelse af biomasse til fremstilling af mange af de kemikalier, vi i dag laver ud fra olie.

I Danmark har vi primært tænkt grøn energi i form af store havvindmølleparker. Fremover må vi fokusere mere på solcelleanlæg, hvor solenergi prioriteres, ikke kun som store solcelleparker, men også som lokale anlæg der dækker en eller få husstande. Mindre solcelleanlæg vil effektivt kunne supplere den daglige centrale produktion af strøm til for eksempel varmepumper og opladning af elbiler uden at belaste elnettet. Teknikken er veludviklet og kan hurtigt blive udbredt. Dette kombineret med bedre isolering af vores boliger må være en del af vejen mod at blive mere grøn og fri af russisk olie og gas. Det kræver dog et udspil fra regeringen, dersom vi hurtigt skal komme i gang med at udvikle denne decentrale energiproduktion. Vi bliver nødt til at tænke individuelt for at tænke stort.

Energilagring er en afgørende brik, både for store og små anlæg, for effektiv udnyttelse af vind- og solenergi. Kemikere har en central rolle i denne udvikling, og vi skal fortsætte med at udvikle nye effektive metoder. For store anlæg kan hydrogenlagring være en løsning, men for decentrale anlæg er det her og nu batterier, der er løsningen. Det er derfor glædeligt, at nye generationer af billige og mere "grønne" batterier er på vej, for eksempel i form af natrium-ion batterier, der kan produceres uden materialer som Co, Ni og Li.

Morten J. Bjerrum

Vi bliver nødt til at
tænke individuelt
for at tænke stort



Enkel og hurtig bestemmelse af **PFAS** med Combustion IC fra Metrohm

PFAS (perfluorerede stoffer) anvendes i mange produkter og industrier. Desværre akkumulerer de i både vandforsyning og fødekæde til stor skade for miljø og sundhed. Sammenlignet med målrettede analysemetoder, der kun måler et lille udvalg af individuelle forbindelser, er bestemmelsen af **PFAS** i vandprøver med Combustion IC:

- ✓ Mere omfattende
- ✓ Mere robust
- ✓ Nemmere at udføre
- ✓ Et hurtigt, billigt screeningsalternativ

**PEOPLE
YOU
CAN
TRUST**



2060 MARGA – Online overvågning af luftkvalitet.

HIGHLIGHTS

- ✓ **Kontinuerlig overvågning og analyse** af vandopløselige gasser og aerosoler 24/7.
- ✓ **Målte gasser:** saltsyre (HCl), salpetersyre (HNO_3), salpetersyring (HONO), svovldioxid (SO_2), ammoniak (NH_3)
- ✓ **Målte aerosol ioner :** klorid (Cl^-), nitrat (NO_3^-), sulfat (SO_4^{2-}), ammonium (NH_4^+), kalium (K^+), calcium (Ca^{2+}), magnesium (Mg^{2+})

Læs mere på metrohm.com



Forstærket arktisk opvarmning

- hvad betyder transport af vanddamp sydfra?

Klimaforandringer sker hurtigere i Arktis end i resten af verden. Denne arktiske forstærkning skyldes både feedback-mekanismer og atmosfærens transport af energi. Transport af vanddamp spiller en tredobbelt rolle, hvor energien, frigivet ved kondensation, sammen med drivhuseffekten af vanddamp og skyer virker opvarmende. Dette betyder, at over halvdelen af arktisk opvarmning alene skyldes påvirkninger fra lavere breddegrader.

Foto: Henrik Skov, Aarhus Universitet.



Samspillet mellem sol, is, sne, skyer og vanddamp er afgørende for opvarmningen i Arktis.

Af Peter L. Langen,
Institut for Miljøvidenskab,
iClimate, Aarhus Universitet

Mange er bekendt med is-albedo-feedbacken, hvor en opvarmning får is og sne til at smelte bort, og overfladens refleksion af sollys mindskes. Det giver yderligere tilførsel af energi til overfladen og yderligere opvarmning. Dette er en positiv feedback, som forstærker

den oprindelige opvarmning, og den er aktiv navnlig i Arktis i disse årtier. Ud over denne mekanisme findes der flere andre feedbacks, der virker forskelligt på lave og høje breddegrader og bidrager til arktisk forstærkning. Desuden spiller ændringer i havstrømmene en rolle.

Et mindre kendt bidrag til arktisk forstærkning er transporten af energi i atmosfæren fra lave breddegrader. At store mængder energi konstant transporteres

fra lave breddegrader op til Arktis, er ikke kontroversielt. Heller ikke den store betydning for Arktis af disse transporter. Det, der er vigtigt for arktisk forstærkning, er dog ikke selve transporten, men snarere *forandringer* i transporten, og her bliver det mere usikkert: *Bliver transporten ind i Arktis større eller mindre, når klimaet varmes op?*

Arktis tæt forbundet med lave breddegrader

Sammenligner man estimerede arktiske temperaturer gennem geologisk tid i forhold til resten af kloden, ses det, at udsving i Arktis har fulgt det globale gennemsnit, blot forstærket til omtrent en tredobling. Dette taler for, at mens lokale feedbackmekanismer forstærker det arktiske signal forskelligt fra model til model og fra geologisk periode til geologisk periode, så tillades arktiske temperaturer tilsyneladende ikke at afvige synderligt fra den tvungne faktor 3. Dette tyder igen på, at Arktis er så effektivt forbundet til lavere breddegrader, at arktiske forandringer langt hen ad vejen styres af de globale udsving.

Modsatte konklusioner om betydningen af varmetransport

Dette er i tråd med en række studier, der demonstrerer, at en stor andel af den ark-

tiske opvarmning skyldes opvarmningen uden for Arktis. Omvendt er det umiddelbart i kontrast til en anden række studier, der viser, at forandringer i den atmosfæriske netto-varmetransport ikke bidrager nævneværdigt til den arktiske opvarmning.

På den ene side har vi studier, hvor man med klimamodellsimuleringer på den ene eller anden måde isolerer den opvarmning, der alene skyldes forøgelse af CO₂ inden for Arktis, fra den der fremkommer inde i Arktis som følge af, at områderne uden for Arktis varmes op. Simuleringerne er lavet med forskellige klimamodeller på forskellige måder, og derfor kommer de også frem til forskellige resultater. Til fælles har de dog, at 50-85 procent af opvarmningen i Arktis skyldes de fjerne effekter. Dette er ret opsigtsvækkende: Mindst halvdelen af den arktiske opvarmning skyldes i første omgang udefrakommende påvirkning. Dermed begynder man at forstå, hvorfor arktiske temperaturudsving tilsyneladende er så tæt forbundet med de globale.

På den anden side har vi studier, hvor man på forskellige måder opgør, hvor meget netto-varmetransporten ind i

” Sammenligner man estimerede arktiske temperaturer gennem geologisk tid i forhold til resten af kloden, ses det, at udsving i Arktis har fulgt det globale gennemsnit, blot forstærket til omtrent en tredobling

Arktis forandrer sig i et varmere klima, og hvilken betydning disse forandringer har på de arktiske temperaturer. De finder ret enstemmigt, at atmosfærens netto-tilførsel af energi til Arktis syd fra forandrer sig minimalt. Derfor konkluderer

deres det, at atmosfærisk varmetransport ikke kan spille nogen afgørende rolle for den forstærkede arktiske opvarmning.

Men hvordan hænger det nu sammen? Der er nemlig ikke noget metodologisk at udsætte på hverken den ene eller den anden række af studier. Ikke desto mindre kommer man alligevel til modstridende resultater: *Er det halvdelen eller mere af den arktiske opvarmning, der skyldes udefra kommende effekter, eller spiller varmetransporten kun en meget lille rolle?*

Vanddampens tredobbelte effekt

Forklaringen skal findes et lag dybere. Jeg har i det forrige talt om ”netto-varmetransporten”, da den atmosfæriske varmetransport består af flere dele. På den ene side har vi transport af varm luft; vi kender det herhjemme fra, når vinden slår om fra nord til syd, og temperaturen stiger drastisk. Dette kalder vi tørstatisk energi (på engelsk dry static energy, DSE). På den anden side har vi transporten af vanddamp. Vanddampen er jo i sin tid fordampet ved lavere breddegrader fra en hav- eller landoverflade, ►

COPENHAGEN

7 - 8 September

LabDays 2022

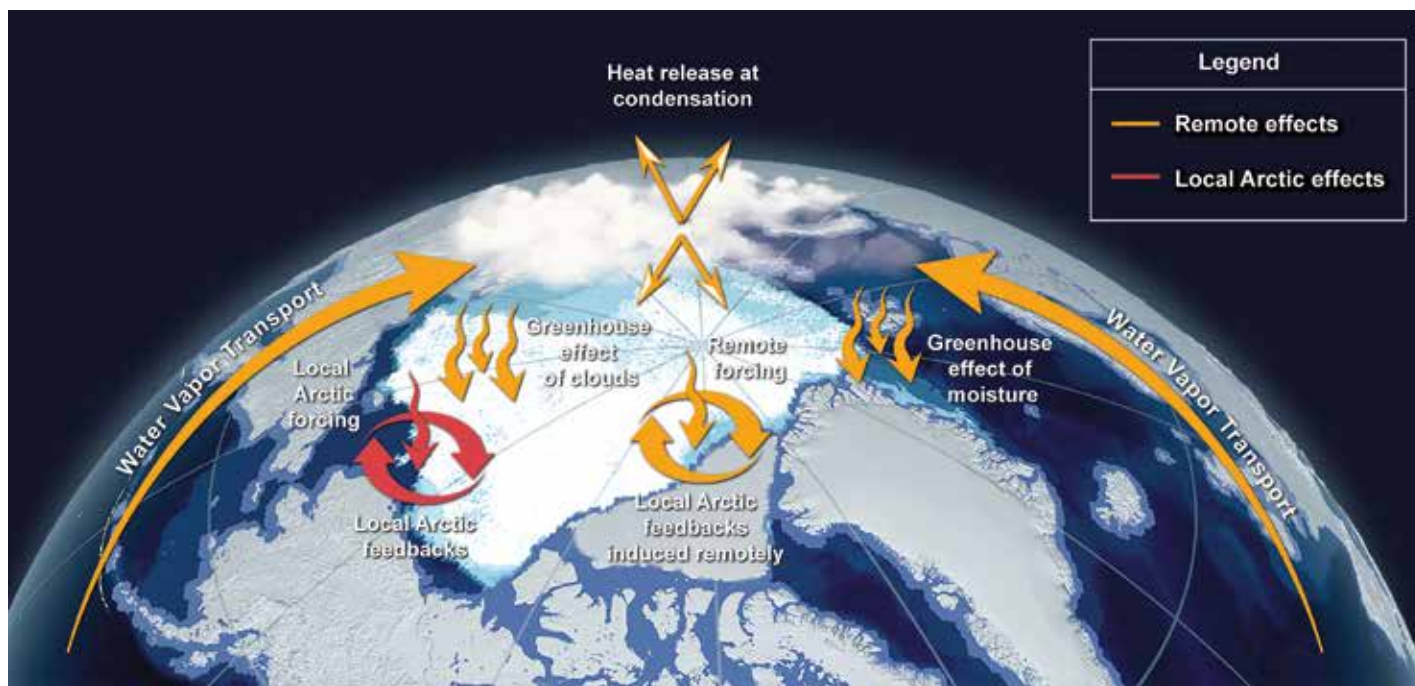
- international trade fair for laboratory technology

FREE TO ATTEND

- Trade fair
- Seminars
- Networking
- Annual meeting

Central in Copenhagen

labdays.dk



Arktisk opvarmning forstærkes af tilførslen af vanddamp fra lavere breddegrader. Kilde: Figur er gengivet fra P.C. Taylor *et al.*, "Process Drivers, Inter-Model Spread, and the Path Forward: A Review of Amplified Arctic Warming", *Frontiers in Earth Science*, vol. 9, 2022. <https://doi.org/10.3389/feart.2021.758361> under Creative Commons CC-BY 4.0".

som blev afkølet i forbindelse med faseovergangen. Når vanddampen kondenserer i den arktiske atmosfære, frigives den tilsvarende energi igen. Energi er blevet flyttet fra lave breddegrader til Arktis, men indtil vanddampen kondenseres, er energien så at sige skjult, og man kalder det latent varme (på engelsk latent heat, LH).

Det viser sig, at når klimaet bliver varmere, ændres både DSE- og LH-komponenten af den totale varmetransport, men i modsat retning: Idet arktisk forstærkning mindsker temperaturforskellen mellem lave og høje breddegrader, bliver den direkte transport af varme, DSE, mindre effektiv, og denne mindskes. Omvendt stiger det generelle indhold af vanddamp, og LH-transporten forøges. Et bredt udsnit af klimamodeller kommer frem til, at de to ændringer ret nøje ophæver hinanden, og nettoændringen er ganske tæt på nul [3]. Dette forklarer rækken af studier, der, baseret på beregninger af ændringer i netto-transporten, konkluderer, at den atmosfæriske varmetransport næppe kan spille nogen større rolle.

På trods af at netto-transporten stort set er uændret i det varmere klima, er sammensætningen mellem DSE og LH dog forandret: Der transporteres mere vanddamp ind i Arktis, og dette bidrager til at forøge drivhuseffekten i Arktis. Desuden øger det skydækket, der i den kolde, mørke arktiske vinter også virker kraftigt opvarmende. Transport af vanddamp spiller dermed en tredobbelte

opvarmende rolle: 1) Drivhuseffekten af vanddampen inden kondensation, 2) den frigivne latente energi ved kondensation (det eneste bidrag, der medregnes i betragtninger af netto-transporten) samt 3) drivhuseffekten af skyer efter kondensation. Observationsbaserede studier og simuleringer med klimamodeller har vist, at den opvarmende effekt af vanddamp er væsentlig større, end man skulle forvente alene ud fra LH-transporten. Somme tider kan effekten være op til ti gange større. Således kommer man til at ignorere store opvarmningsbidrag, der hidrører fra ændringerne i vanddamptransport, hvis man kun ser på LH-delen.

Konklusion

På grund af den tredobbelte rolle af vanddamp ser vi to rækker af studier, der kommer til forskellige konklusioner. Den ene række medtager kun LH-delen og konkluderer, at vanddamptransport ikke spiller en større rolle for arktisk forstærkning. Den anden medtager, i kraft af designet af modelsimuleringerne, den tredobbelte effekt, og desuden de lokale arktiske feedback-forstærkninger af den opvarmning, som den ændrede vanddamptransport sætter i gang. Dermed konkluderer de, at uden effekten af opvarmningen sydpå og den dertil hørende ændring i varmetransporten, ville den arktiske opvarmning højst være halvt så stor.

E-mail:
Peter Langen: plangen@envs.au.dk

Referencer

1. G.H. Miller *et al.*, "Arctic amplification: can the past constrain the future?", *Quaternary Science Reviews*, vol. 29, no. 15, pp. 1779-1790, Jul. 2010, doi: 10.1016/j.quascirev.2010.02.008.
2. M. Yoshimori, A. Abe-Ouchi, and A. Lainé, "The role of atmospheric heat transport and regional feedbacks in the Arctic warming at equilibrium," *Climate Dynamics*, vol. 49, no. 9, pp. 3457-3472, Nov. 2017, doi: 10.1007/s00382-017-3523-2.
3. Y.-T. Hwang, D.M.W. Frierson, and J.E. Kay, "Coupling between Arctic feedbacks and changes in poleward energy transport," *Geophysical Research Letters*, vol. 38, no. 17, 2011, doi: 10.1029/2011GL048546.
4. R.G. Graversen and M. Burtu, "Arctic amplification enhanced by latent energy transport of atmospheric planetary waves," *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, vol. 142, no. 698, pp. 2046-2054, Jul. 2016, doi: 10.1002/qj.2802.
5. R.G. Graversen and P.L. Langen, "On the Role of the Atmospheric Energy Transport in 2 × CO₂-Induced Polar Amplification in CESM1," *J. Climate*, vol. 32, no. 13, pp. 3941-3956, Apr. 2019, doi: 10.1175/JCLI-D-18-0546.1.
6. P.C. Taylor *et al.*, "Process Drivers, Inter-Model Spread, and the Path Forward: A Review of Amplified Arctic Warming," *Frontiers in Earth Science*, vol. 9, 2022, <https://www.frontiersin.org/article/10.3389/feart.2021.758361>.



Performance
Innovation
Reliability



JASCO are producing the highest quality circular dichroism instrumentation

The J-1000 series is the result of many advances in technology

In Denmark sold with factory trained local support and service from Biolab A/S



Biolab A/S
Sindalsvej 29
DK-8240 Risskov

+45 8621 2866
sales@biolab.dk
www.biolab.dk

Keine Hexerei: Chlorhexidin

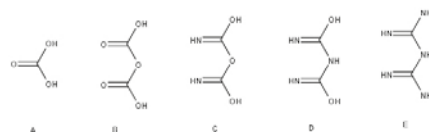
Man har længe kunnet købe præparater indeholdende det antibakterielle middel **chlorhexidin**, jf. figur 1. Her skal der ikke tages stilling til det ønskværdige i at udbrede denne chlorerede forbindelse til alle mulige overflader, inklusive den menneskelige hud, sågar mundhulen, men hvad dækker det mystiske navn over? Det lyder som et systematisk kemisk navn, men det er det ikke, bortset fra referencen til chlor. Stoffet er afledt af den stamforbindelse, der tidligere hed biguanid (strukturformel E i figur 2).

I 2013 besluttede IUPAC at skrotte navnet 'biguanid', der ellers var meget logisk i betragtning af strukturen som dimer af guanidin $\text{HN}=\text{C}(\text{NH}_2)_2$, som i hvert fald biokemikerne vil være på fornavn med. Nu skulle det hedde **imidodicarbonimidysyrediamid**. Hva'behar? Og IUPAC's repræsentation af strukturen er vist i figur 3. Det nye navn er dog forståeligt, når man får det skilt ad, og som så ofte handler det om, at det er en del af en mere omfattende systematik, som altså prioriteredes over det gammekendte. Denne systematik fremgår af figur 2.

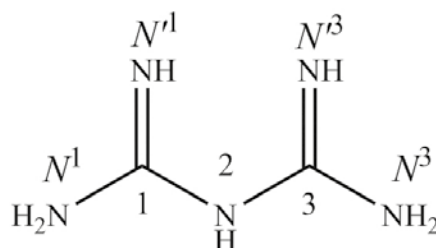
Tilbage til chlorhexidin. Strukturen er



Figur 1. Et chlorhexidinpræparat købt på apoteket.



Figur 2. **A:** carbonsyre (kulsyre) → **B:** dicarbonsyre → **C:** dicarbonimidysyre (=O udskiftet med =NH på begge carbonatomer, signaleres med infikset 'imid') → **D:** imidodicarbonimidysyre (den centrale gruppe -O- udskiftet med -NH-, her bruges affikset 'imido') → **E:** imidodicarbonimidysyrediamid (-OH udskiftet med -NH₂ på begge carbonatomer, som sædvanlig signaleret med suffikset 'amid').



Figur 3. Strukturformel for imidodicarbonimidysyrediamid (tidligere biguanid) med IUPAC's nugældende lokantsystem (denne figur popper også op på Nomenklaturudvalgets hjemmeside [1], hvis man søger på det nye navn).

vist i figur 4, hvor man ser imidodicarbonimidysyrediamid i hver ende af en seksledet kæde, altså hexan-1,6-diyl. Det systematiske navn for chlorhexidin bliver så

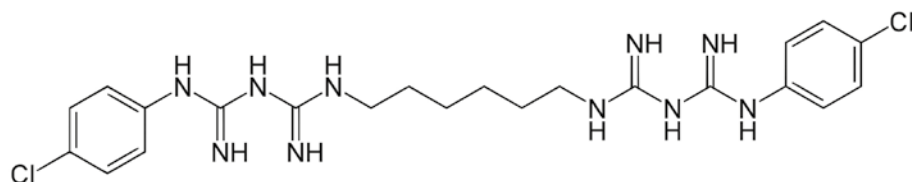
*N*¹, *N*^{1'}-(hexan-1,6-diyl)
bis[*N*³-(4-chlorphenyl)
imidodicarbonimidysyrediamid]

med brug af nitrogenlokanter fra figur 3. I et sådant multiplikativt navn sættes et mærke (engelsk en 'prime') på den lokant, der refererer til det andet eksemplar af den multiplicerede gruppe, mens den tilsvarende lokant i det første eksemplar er umærket. Det er vigtigt med rækkefølgen af denne staffage, altså at mærket kommer uden på superskript-étallet. Som det ses på figur 3, er der nemlig et *andet* nitrogenatom, der har lokanten *N*¹.

Nu vi er ved denne nitrogenrige stamforbindelse, er det populære type 2-diabetes-medikament metformin i øvrigt *N*¹, *N*^{1'}-dimethylimidodicarbonimidysyrediamid (ingen mærker! – læseren kan nu let tegne strukturformlen for dét).

TD, Nomenklaturudvalget

Reference
1. www.kemisknomenklatur.dk.



Figur 4. Chlorhexidin.

Coronasmitte påvirker hjernen

Ny forskning med dansk deltagelse påviser, at scanninger kan afsløre ændringer i hjernen efter coronasmitte.

Et nyt studie, der er publiceret i det ansete tidsskrift Nature, afslører, at selv i milde tilfælde af corona, kan der detekteres ændringer i hjernen efter smitte. I studiet blev scanninger af hjernen hos 401 briter i alderen 51-81 år sammenlignet inden og efter, de havde haft corona, og samtidig blev der lavet tilsvarende scanninger på 384 kontrolpersoner. Der blev identificeret en statistisk signifikant forskel, når de to grupper blev sammenlignet med hensyn til mængden af grå substans i hjernen, og endvidere større ændringer i markører for vævsskade i hjerne-

regioner, der er funktionelt forbundet med lugtesansen. Også når man så bort fra de forsøgspersoner, der havde så alvorlige symptomer, at det resulterede i indlæggelse, var forskellene mellem de coronasmittede og kontrolpersonerne signifikant forskellige. Hvorvidt denne skadelige påvirkning på hjernen delvist kan vendes, eller om disse virkninger vil vare ved på lang sigt, ved man endnu ikke og mangler at blive undersøgt.

Reference
Gwenaëlle Douaud, Soojin Lee, Fidel Alfaro-Almagro, Christoph Arthofer, Chaoyue Wang, Paul McCarthy, Frederik Lange, Jesper L. R. Andersson, Ludovica Griffanti, Eugene Duff, Saad Jbabdi, Bernd Taschler, Peter Keating, Anderson M. Winkler, Rory

Foto: Wikimedia



Collins, Paul M. Matthews, Naomi Allen, Karla L. Miller, Thomas E. Nichols & Stephen M. Smith. SARS-CoV-2 is associated with changes in brain structure in UK Biobank. *Nature*, 2022, doi.org/10.1038/s41586-022-04569-5.

EliteForsk-prisen 2022

Torsdag den 24. februar 2022 blev den årlige EliteForsk-prisuddeling afholdt.

Ved festlighederne overrakte uddannelses- og forskningsminister Jesper Petersen og H.K.H. Kronprinsesse Mary EliteForsk-priserne og EliteForsk-rejsestipendier. EliteForsk-prisen uddeles hvert år til yngre forskere, hvis forskning er i international topklasse.

Årets fem prismodtagere er Anne Ladegaard Skov, professor ved Danmarks Tekniske Universitets Institut for Kemiteknik og leder af Dansk Polymer Center; Anton Potttegaard, professor ved Institut for Sundhedstjenesteforskning på Syddansk Universitet og forskningsleder ved Sygehusapotek Fyn på Odense Universitetshospital; Felix Riede, professor i forhistorisk arkæologi ved Institut for Kultur og Samfund ved Aarhus Universitet samt Naja Hulvej Rod, professor i epidemiologi ved Institut for Folkesundhedsvidenskab på Københavns Universitet.

Prismodtagerne modtager anerkendelsen for deres banebrydende grundforskning, der bidrager til at løse globale



H.K.H. Kronprinsesse Mary og uddannelses- og forskningsminister Jesper Petersen overrækker EliteForsk-prisen 2022.

udfordringer. Det er forskere, der mestrer det internationale samarbejde, og som kobler indsigter fra forskellige fagområder og tilfører nye begreber og metoder. De er moderne ledere, der skaber forskningsmiljøer i international særklasse.

Kilde: Uddannelses- og Forskningsministeriet



**Få professionel
rådgivning
73 20 13 00**

Gram BioLine er en af verdens førende producenter af højtydende køle- og fryseudstyr til temperaturkritisk opbevaring indenfor områder såsom laboratorier, hospitaler, farmaceutiske og industrielle applikationer.



Udviklet og produceret i Danmark siden 1901



Gram Commercial, filial af Hoshizaki Europe BV, Holland | Aage Grams Vej 1 | DK-6500 Vojens | Tlf. 7320 1300
 info@gram-bioline.com | www.gram-bioline.com

Biostorage you can depend on



Foto: Roberto Sorin, unsplash.com.

Fremtidens bæredygtige batterier

Det kommercielle Li-ion-batteri fejrede for nylig sin 30-års fødselsdag og har allerede sat et stort aftryk på vores samfund. I dag giver teknologien liv til stort set al elektronik, vi omgiver os med, og har dertil fundet vej ind i elbiler. Genopladelige batterier står nu overfor den næste landvinding: Lagring af vedvarende energi. De nye anvendelser og det stigende forbrug af Li-ion-batterier sætter store krav til ydeevne, levetid, pris og bæredygtighed.

Af Bettina Pilgaard Andersen og Dorthe Bomholdt
Ravnsbæk, Institut for Kemi, Aarhus Universitet

I 2019 modtog de tre hovedmænd bag Li-ion-batteriet Michael S. Whittingham, John B. Goodenough og Akira Yoshino Nobelprisen i Kemi for deres opfindelse. Med rette! For siden Sony i 1991 lancerede deres første genopladelige Li-ion-batteri

har teknologien taget fart [1]. Det afspejles for eksempel i det enorme verdensomspændende salg af smartphones, tablets og bærbare computere og et stadigt stigende salg af el- og hybridbiler. Det genopladelige batteri finder dog ikke kun sin anvendelse i hverdagens transportable enheder, men er også en mulig løsning på miljømæssige problemstillinger som lagring af vedvarende energi.

I 2020 producerede Danmark 28 TWh el ved afbrænding af kul, olie, naturgas, biobrændsler, affald samt brug af vind-, sol- og vandenergi. Heraf kommer 58 procent fra vindenergi. I dette regnskab eksporteres 1,8 TWh, mens 8,6 TWh importeres fra vores nabolande [2]. Denne ubalance skyldes, at der endnu ikke er mulighed for effektiv lagring af den lokalt producerede grønne energi - en problemstilling, som det genopladelige batteri kan være med til at løse, og dermed effektivisere vores brug af grøn vedvarende energi.

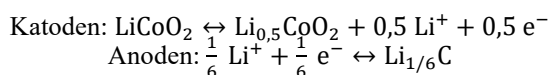
Hvordan virker et genopladeligt Li-ion-batteri?

Et genopladeligt Li-ion-batteri (figur 1) har tre essentielle komponenter: En negativ elektrode (anode), en positiv elektrode (katode) og elektrolyt. Det er i de to elektroder, som består af fast stof, at elektrisk energi (strøm) omsættes til kemisk energi under opladning og tilbage til elektrisk energi igen under afladning.

Når batteriet er i den afladte tilstand, befinder Li-ionerne og de tilhørende elektroner sig i katoden. Ved opladning bruges elektrisk energi (fra stikkontakten) til at tvinge elektroner ud af katoden og via det elektriske kredsløb over i anoden. Da elektronerne er negativt ladede, vil der samtidig tvinges Li-ioner (som er positivt ladede) ud af katoden. Li-ionerne kan ikke løbe i det elektriske kredsløb, og de vil i stedet overføres til den flydende elektrolyt, der ligger mellem de to elektroder. Elektrolytten, der er designet til at transportere ioner, vil nu sørge for, at Li-ionerne bringes over til anoden, hvori de forenes med elektronerne, der kom gennem det elektriske kredsløb. Batteriet indeholder nu den elektriske energi, som denne proces har "kostet", og kan opbevare energien, indtil vi slutter det elektriske kredsløb til igen for at benytte strømmen. Når dette sker, forløber den modsatte proces og den elektriske energi frigives igen.

Mere spænding

I de første kommercielle Li-ion-batterier bestod katoden af litiumkoboltoxid, LiCoO_2 , mens anoden bestod af grafit. De kemiske reaktioner, der sker i disse materialer, når batteriet af- og oplades, kan beskrives som:

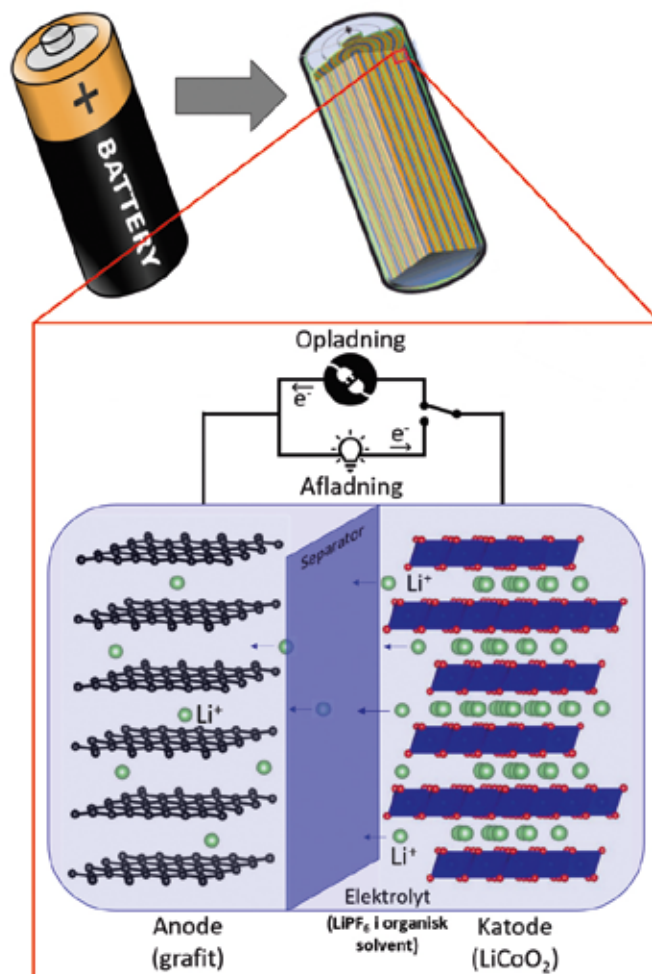


Som det ses, oxideres kobolt (Co), mens karbon (C) reduceres ved reaktion mod højre (opladning). Den elektriske energi, der benyttes til at flytte elektroner fra katoden til anoden, omdannes således til kemisk energi ved at drive disse reaktioner [3].

I dag, 30 år efter Li-ion-batteriets kommercialisering, består anoderne i kommercielle Li-ion-batterier stadig hovedsageligt af grafit, men andre materialer såsom $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ og silicium vinder også ind (se tabel 1, side 14). På katodesiden benyttes typisk materialer, der minder om LiCoO_2 , hvori en del af kobolten er udskiftet med andre metaller [4,5].

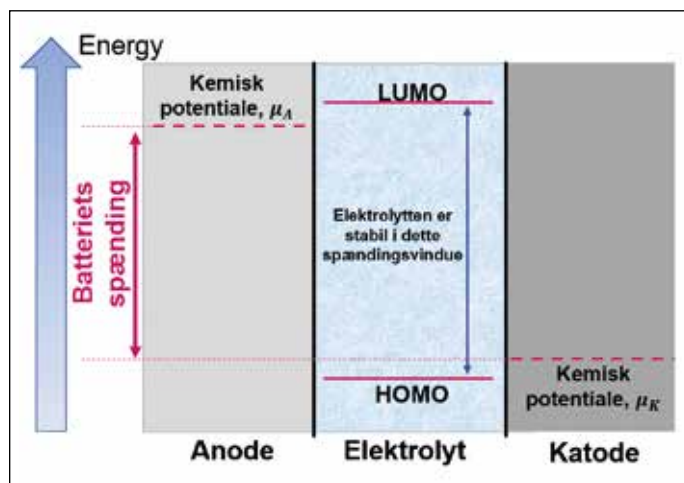
Reaktionerne, der forløber i katoden og anoden under af- og opladning, danner baggrund for spændingen af batteriet, som afhænger af forskellen i kemisk potentiale mellem de to elektroder (figur 2). Med andre ord er forskellen i energi forbundet med de to reaktioner (forskellen i reduktionspotentialerne for reaktionerne) [13]. Det betyder, at batteriets spænding kan øges ved at vælge katoder og anoder med stor forskel i kemisk potentiale. Et batteri baseret på LiCoO_2 og grafit leverer en spænding på cirka 3,6V.

Derfor fokuserer forskningsaktiviteter blandt andet på at udvikle nye elektrodematerialer, der øger spændingen af batteri-

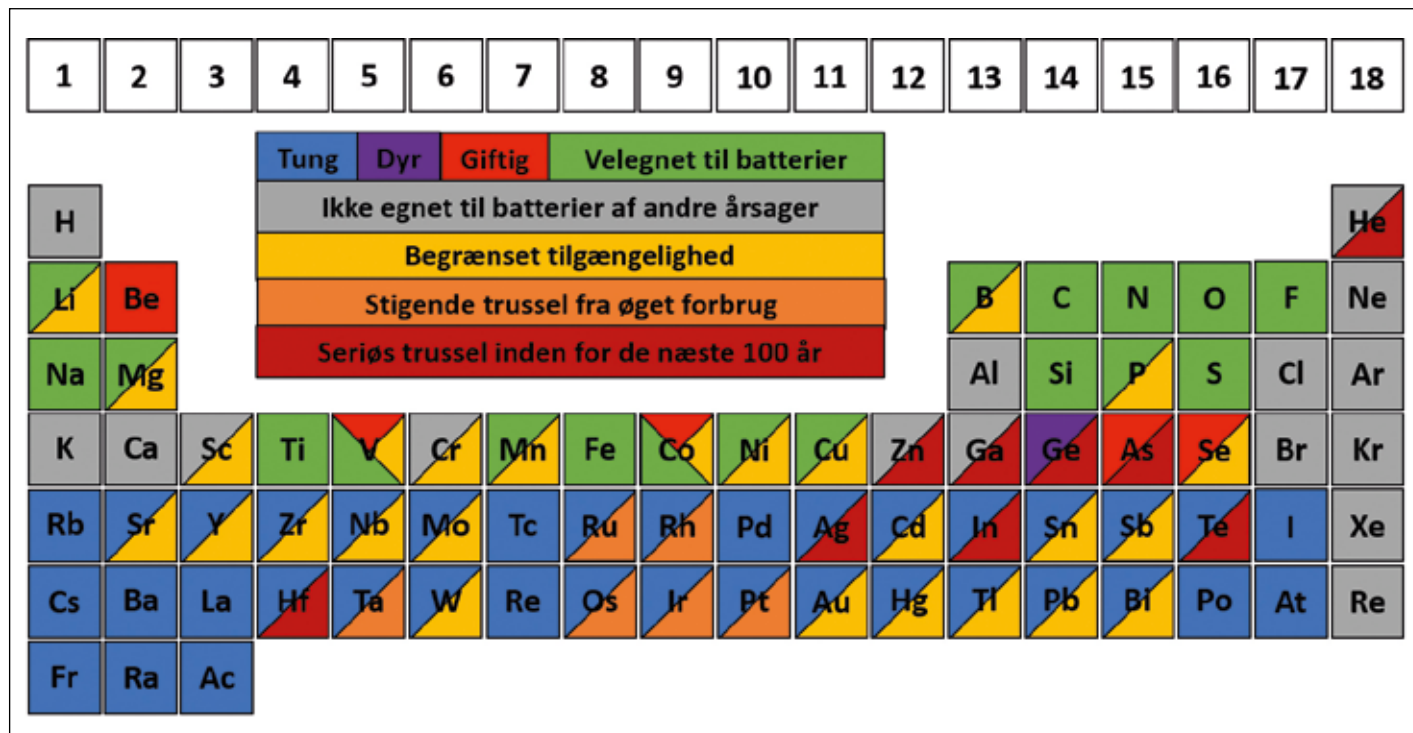


Figur 1. Zoom af et batteri med skematisk illustration af opbygningen af et klassisk Li-ion-batteri. For hver Li-ion, der bevæger sig fra katoden til anoden under opladning, flyttes én elektron (dvs. strøm) via det ydre kredsløb.

erne. Det kan for eksempel gøres ved at benytte andre metaller end kobolt eller udskifte oxid (O) med andre mere elektronegative ioner, som for eksempel fluorid (F). Teoretisk kunne man forestille sig Li-ion-batterier med en spænding på op mod 5,9V. Dog begrænses spændingen også af den elektrokemiske stabilitet af elektrolytten. Denne er bestemt af energiforskellen mel-



Figur 2. Sammenhæng mellem de elektrokemiske potentialer af elektroderne i forhold til de relative energier af HOMO og LUMO for elektrolytten. Disse tre komponenter bestemmer batteriets spænding.



Figur 3. Inddeling af det periodiske system efter elementernes vægt, pris, giffighed, tilgængelighed og egnethed til brug i batterier [13,18].

lem elektrodens højest besatte og lavest ubesatte molekyllære orbital (de såkaldte HOMO og LUMO). Det kemiske potentiale for anoden skal derfor være placeret under LUMO, mens det for katoden skal være placeret over HOMO, som illustreret på figur 2, side 13. Hvis dette ikke er opfyldt, vil elektrolytten blive reduceret eller oxideret på henholdsvis anoden eller katoden. Den elektriske energi, der tilføres batteriet under opladning, vil derved blive forbrugt i denne proces og vil ikke kunne frigives igen, da processen er irreversibel [13]. Derfor er der også, forskningsmæssigt, stor fokus på at udvikle nye elektrolytter til batterier med høj spænding.

Højere kapacitet

Hvor meget strøm et Li-ion-batteri kan levere, inden det skal genoplades (for eksempel hvor langt en elbil kan køre på en opladning), dvs. batteriets kapacitet, afhænger altså af, hvor mange elektroner, og dermed hvor mange Li-ioner, der kan flyttes mellem de to elektroder. Eller med andre ord, hvor mange Li-ioner og elektroner, der kan frigives og genindsættes i de faste materialer, der udgør elektroderne (for eksempel grafit og LiCoO_2).

Den teoretiske kapacitet af et elektrodemateriale, givet i mAh/g, kan beregnes ud fra formel (1), hvor n er antal elektroner (eller Li-ioner), der kan frigives og genindsættes i materialet, F

er Faradays konstant (96485,3 C/mol) og M er elektrodematerialets molarmasse [13].

$$C_t = \frac{nF}{3,6 \cdot M} \quad (1)$$

Formlen fortæller os, at materialer med lave molarmasser vil give en højere kapacitet. Derfor fokuserer udviklingen af nye batterimaterialer primært på grundstoffer, der ligger forholdsvis højt i det periodiske system (figur 3). Samtidig vil man naturligvis gerne øge n i formelen, dvs. øge antal elektroner (eller Li-ioner), der kan frigives og genindsættes i materialet. Det kan opnås ved at vende sig mod helt nye elektrodematerialer. For eksempel kan alle tre Li-ioner (og dermed tre elektroner) i katodematerialet $\text{Li}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$ [14] udnyttes i modsætning til kun $\frac{1}{2}$ Li i LiCoO_2 , hvorfor kapaciteterne er hhv. 197 og 137 mAh/g. Derfor undersøges brugen af silicium (Si) som anode også intenst, da det kan optage >5 Li per Si, hvilket giver en teoretisk kapacitet på >4.000 mAh/g. Desværre er Si-anoder ikke stabile og mister hurtigt deres evne til at levere den høje kapacitet [15].

Længere levetid

Vi kender alle frustrationerne forbundet med ældre telefo-

Specifik anvendelse	Li-ion batteriteknologi	Batteristørrelse	Antal enheder forventet produceret i 2016-2050
Smartphones	LCO-G, NCM-G	5-15 Wh	8 milliarder
Tablets og bærbare computere	NCM-G, LCO-G	20-150 Wh	5 milliarder
Elværktøj	NCM-G, LMO-G	15-50 Wh	400 millioner
Elcykler	NCM-G, LMO-G	150-400 Wh	2 milliarder
Hybridbiler, elbiler og varebiler	NCM-G, LMO-G, NCA-G	5-250 kWh	1,25 milliarder
Andre enheder i hjemmet	NCM-G, LFP-LTO	3-30 kWh	100 millioner

Tabel 1. Type af Li-ion batteriteknologi, der anvendes i forskellige apparater. Katodematerialer: LCO, LiCoO_2 , NCM; $\text{Li}_{1,05}(\text{Ni}_{0,6}\text{Co}_{0,2}\text{Mn}_{0,2})_{0,95}\text{O}_2$; LMO, LiMn_2O_4 ; NCA, $\text{LiNi}_{0,8}\text{Co}_{0,15}\text{Al}_{0,05}\text{O}_2$. Anodematerialer: G, grafit; LTO, $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ [3].

ner eller computere, der skal lades konstant, fordi batteriet er slidt. Men hvad sker der egentlig inde i batteriet, når det slides? Spørgsmålet har desværre ikke et simpelt svar, da forringelse af batteriers ydeevne skyldes en række komplekse fænomener, der er forbundet med hinanden og påvirkes af mange parametre [16]. Dog tyder alt på, at tab af ydeevne har tre hovedårsager [17]:

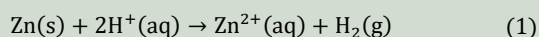
- 1) En del af Li-ionerne forbruges af uønskede kemiske reaktioner (for eksempel nedbrydning af elektrolytten).
- 2) En del af elektroderne bliver inaktive, fordi de for eksempel mister elektrisk kontakt med kredsløbet eller opløses i elektrolytten.
- 3) Batteriet mister sin evne til at transportere ioner og elektroner gennem elektroderne og elektrolytten. Det kan for eksempel ske ved dannelsen af passiverende lag på overfladen af elektroderne eller på grund af omdannelser i elektrodernes struktur [18].

Disse processer påvirkes naturligvis af, hvordan batteriet bruges. Hvis der for eksempel trækkes en høj strøm (dvs. forbruger

Batteriets historie

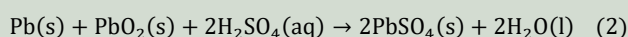
Ordet "batteri" har eksisteret siden slutningen af 1740'erne. Her brugte Benjamin Franklin ordet for første gang til at beskrive et system, der kan lagre elektricitet. Dette er blot første gang, at ordet er blevet brugt, men det menes, at det første batteri blev fremstillet allerede 250 f.Kr. Dette batteri kendes i dag som Bagdadbatteriet [5].

I 1800 fremstillede Alessandro Volta dét, der i dag er anerkendt som det første batteri. Voltasøjlen bestod af skiftende lag kobber og zink med en klud gennemvædet af en saltopløsning mellem hvert lag [5]. Herfra kunne H^+ fra saltopløsningen reduceres ved oxidation af zink-katoden, og derved danne brint ved reaktionen givet i ligning (1) [6].



Grundet udviklingen af gasformig H_2 øgedes den indre modstand og resulterede i kortslutning. Derfor udviklede John Frederic Daniell i 1836 et Daniell-element. Denne elektrokemiske celle forbedrede voltasøjlen ved at løse brintproblemet, idet en ion-permeabel separator blev introduceret, og elektroder, samt elektrolytter, blev adskilt [7].

I 1859 udviklede Gaston Planté blysyre-batteriet, det første genopladelige batteri, som i dag stadig anvendes i blandt andet transportmidler [5,8]. Blysyre-batteriet består af en anode af metallisk bly og en PbO_2 -katode, adskilt af en separator og nedsunket i svovlsyre. Ved afladning finder reaktionen givet i ligning (2) sted, mens opladning omfatter den modsatte reaktion [9]:



I 1899 opfandt Waldemar Junger et nyt genopladeligt batteri: Nikkel-cadmium-batteriet (NiCd). 90 år senere, i 1989, kom den mere miljøvenlige afløser: Det genopladelige nikkel-metalhydrid-batteri (NiMH), som stadig benyttes i et vist omfang i dag [10].

Dog er det langt mest benyttede genopladelige batteri i dag Li-ion-batteriet, som blev opfundet i 1970'erne af Michael Stanley Whittingham. I det første Li-ion-batteri blev Li-metal og titaniumdisulfid (TiS_2) anvendt som elektroder, og derved blev det første interkalationsbatteri skabt [11,12]. Herefter er udviklingen fortsat, nye elektrodematerialer og teknologier bliver udforsket og er i dag et stort forskningsområde i hele verden.

	Natrium	Litium
Redoxpotentiale (V vs. S.H.E)	-2,70	-3,04
Størrelse af kation (Å)	1,16	0,90
Atomvægt (amu)	22,99	6,94
Mængde i Jordens overflade	2%	0,002%
Pris (karbonater i 2011, €/kg)	4,11-4,49	0,07-0,37

Tabel 2. Forskelle mellem natrium og litium, som har indflydelse på blandt andet størrelse, kapacitet og pris af batteriet [19,20].

mange watt), vil risikoen for, at batteriet ældes hurtigt være større. Her skal det dog bemærkes, at nogle batterier er designet til at levere mange watt og derfor ikke påvirkes af dette i samme grad. Batteriets levetid er desuden meget påvirket af temperatur, særligt fordi processerne (1-3) forløber hurtigere ved højere temperatur. Dog kan kulde også skade batteriets levetid. Sidst, men ikke mindst, bør batterier ikke udsættes for mekanisk stress, dvs. bøjes eller udsættes for tryk, da det kan føre til uønskede reaktioner på elektrodernes overflader, og

ET CENTRALT VAKUUMSYSTEM. UTALIGE FORDELE.

Afhængigt af applikationen kan energibesparelser på op til 70 % opnås med et centralt vakuumssystem. Dette er ikke den eneste fordel. Sammen med dig kan vi identificere mange andre fordele, du kan opnå baseret på dine krav.

Lad vores eksperter rådgive dig!

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

BUSCH
VACUUM SOLUTIONS

den elektriske kontakt mellem elektroder og kredsløb kan blive ødelagt [17].

Jagten på koboltfrie materialer

Det første kommercielle genopladelige batteri, som Sony lancerede, bestod som nævnt af en grafit anode og LiCoO_2 katode. Dog blev den høje pris, lave tilgængelighed og høje toksicitet af kobolt hurtigt et problem, hvorfor materialeforskere har arbejdet ihærdigt på at finde alternativer til LiCoO_2 . Dette har ført til udvikling af en række LiCoO_2 -lignende materialer, hvor en del af kobolten er udskiftet med andre metaller som nikkel og mangan, for eksempel $\text{LiNi}_{0,8}\text{Co}_{0,15}\text{Al}_{0,05}\text{O}_2$ (tabel 1, side 13). Disse materialer har forholdsvis høje energidensiteter og god stabilitet. Desværre er det ikke lykkedes at slippe helt af med kobolt i disse materialer.

Et kobolt-frit alternativ er LiFePO_4 , hvilket er et meget billigt, stabilt og miljøvenligt materiale. Dog har den forholdsvis lave spænding, og dermed lave energitæthed, begrænset brugen af materialet, men på grund af de stigende Co-priser, spås LiFePO_4 en lys fremtid. Udover disse materialer, arbejder forskere på at finde helt nye elektrodematerialer som anvender gængse overgangsmetaller, så som jern (Fe) og titanium (Ti), samt byggesten, for eksempel fosfat og silikat, som forefindes i store mængder i naturlige mineraler (figur 3, side 14) [3].

Fra litium til natrium

Det er dog ikke kun kobolt i batterierne, der kan vise sig at blive et problem. Den stigende batteriproduktion øger fokus på pris og miljøet. Det udfordrer også brugen af litium (Li), da det er en relativt begrænset ressource (figur 3, side 14). Men hvad er alternativet? Her vendes blikket mod grundstoffer som natrium (Na), magnesium (Mg), calcium (Ca) og aluminium (Al).

Natrium har mange egenskaber tilfælles med litium og grundstoffet har en høj naturlig forekomst i vores natur, hvilket betyder, at prisen på natriumholdige råstoffer er meget lavere end for tilsvarende litiumforbindelser. Derfor er natrium en potentiel meget lovende kandidat som aktiv ion i fremtidens batterier. De åbenlyse udfordringer, som er forbundet med brugen af natrium, er den øgede ionstørrelse, hvilket besværliggør iontransport i batteriet, natriums vægt og det højere reduktionspotentiale i forhold til litium. Disse forskelle er blandt andre opsummeret i tabel 2 på forrige. Udfordringerne vil resultere i et tungere batteri med en lavere kapacitet. Kort sagt indskrænker kemien, hvor effektivt et batteri, der kan produceres, og Na-ion-batteriet kan derfor aldrig komme til at leve op til Li-ion-batteriet, når det gælder ydeevne. Men ønsket om lave priser og høj grad af bæredygtighed giver Na-ion-batteriet sin berettigelse og teknologien er i disse år ved at finde vej til det kommercielle marked [21].

Fremtidens batteriteknologier

Hvor Li-ion-batteriet i dag benyttes til stort set alle anvendelser, der kræver et genopladeligt batteri, vil fremtiden sandsynligvis byde på en vifte af batteriteknologier, der er tilpasset til den enkelte anvendelses krav om ydeevne, levetid og pris. I fremtidens batteriteknologier kommer bæredygtighed ufravigeligt til at spille en stor rolle både i forhold til, hvilke ressourcer der benyttes i batteriets komponenter og i forhold til, hvor effektivt og nemt batterierne kan genbruges.

Udviklingen af fremtidens batteriteknologier kræver en stor global forskningsindsats, hvori der skal designes og fremstilles nye funktionelle batterimaterialer, som efterfølgende skal undersøges i stor detalje for at optimere batteriernes spænding, energitæthed, kapacitet, levetid, bæredygtighed og ikke mindst deres sikkerhed.



E-mail:

Dorthe Bomholdt Ravnsbæk: dorth@chem.au.dk

Referencer

1. Tarascon, J.M. and M. Armand, *Issues and challenges facing rechargeable lithium batteries*. Nature, 2001. **414**(6861): p. 359-367.
2. Energinet, *Miljødeklaration 2020*. 2020: <https://energinet.dk/EI/Gron-el/Deklarationer>.
3. Li, M., et al., *30 Years of Lithium-Ion Batteries*. Advanced Materials, 2018. **30**(33): p. 1800561.
4. Vaalma, C., et al., *A cost and resource analysis of sodium-ion batteries*. Nature Reviews Materials, 2018. **3**(4): p. 18013.
5. MarketsandMarkets, *Lithium-Ion Battery Anode Market by Materials (Active Anode Materials and Anode Binders), Battery Product (Cell and Battery Pack), End-Use (Automotive and Non-Automotive), and Region (Europe, North America, and Asia Pacific) - Global Forecast to 2026*. 2021.
6. Bobby, *History of Batteries: A Timeline*. 2014 [cited 2022 23 Februar]; Available from: <https://www.upsbatterycenter.com/blog/history-batteries-timeline/>.
7. Bellis, M. *History and Timeline of the Battery*. 2019 [cited 2022 22 Februar]; Available from: <https://www.thoughtco.com/battery-timeline-1991340>.
8. Nave, R. *Lead-Acid Battery*. [cited 2022 22 Februar]; Available from: <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/electric/leadacid.html>.
9. Alarco, J. and P. Talbot, *The history and development of batteries*. 2015 [cited 2022 22 Februar]; Available from: <https://phys.org/news/2015-04-history-batteries.html>.
10. Decker, F. *Volta and the "pile"*. 2005 [cited 2022 22 Februar]; Available from: <https://knowledge.electrochem.org/encycl/art-v01-volta.htm>.
11. Buchmann, I. *When Was the Battery Invented?* [cited 2022 23 Februar]; Available from: <https://batteryuniversity.com/article/bu-101-when-was-the-battery-invented>.
12. *The Nobel Prize: M. Stanley Whittingham - Facts*. 2019 [cited 2022 23 Februar]; Available from: <https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/2019/whittingham/facts/>.
13. Liu, C., Z.G. Neale, and G. Cao, *Understanding electrochemical potentials of cathode materials in rechargeable batteries*. Materials Today, 2016. **19**(2): p. 109-123.
14. Sørensen, D.R., J.K. Mathiesen, and D.B. Ravnsbæk, *Dynamic charge-discharge phase transitions in $\text{Li}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$ cathodes*. Journal of Power Sources, 2018. **396**: p. 437-443.
15. Feng, K., et al., *Silicon-Based Anodes for Lithium-Ion Batteries: From Fundamentals to Practical Applications*. Small, 2018. **14**(8): p. 1702737.
16. Hu, X., et al., *Battery Lifetime Prognostics*. Joule, 2020. **4**(2): p. 310-346.
17. Dubarry, M., C. Truchot, and B.Y. Liaw, *Synthesize battery degradation modes via a diagnostic and prognostic model*. Journal of Power Sources, 2012. **219**: p. 204-216.
18. ACS, *The Periodic Table's Endangered Elements*.
19. Palomares, V., et al., *Na-ion batteries, recent advances and present challenges to become low cost energy storage systems*. Energy & Environmental Science, 2012. **5**(3): p. 5884-5901.
20. Yabuuchi, N., et al., *Research Development on Sodium-Ion Batteries*. Chemical Reviews, 2014. **114**(23): p. 11636-11682.
21. Muñoz-Márquez, M.Á., et al., *Structure, Composition, Transport Properties, and Electrochemical Performance of the Electrode-Electrolyte Interphase in Non-Aqueous Na-Ion Batteries*. Advanced Materials Interfaces: p. 2101773.



Zebrafisk - en yderst populær model for hvirveldyrers udvikling under kemikalieeksponering.

Udvikling og forbedring af tests til identifikation af hormonforstyrrende stoffer

ERGO - Endocrine Guideline Optimization.

Af Henrik Holbech, Biologisk Institut, SDU, og Helle Elisabeth Lyngborg, Research & Innovation Organisation, SDU

Der er i de seneste årtier kommet stor fokus på, at kemikalier kan påvirke menneskers og dyrs hormonesystemer på en måde, der kan forårsage alvorlige effekter på sundhed, herunder udvikling og reproduktion. Derfor har man i de seneste 20 år arbejdet i internationalt regi (såsom i EU og OECD) på at udvikle og validere tests, der kan identificere hormonforstyrrende kemikalier, så de kan reguleres lovgivningsmæssigt. Man

er kommet langt, men der er stadigvæk store huller i de tests, der er til rådighed i dag og lovgivningsmæssigt er man heller ikke helt på plads i EU.

Derfor har EU i forskningsprogrammet Horizon 2020 støttet otte europæiske projekter, der forsker i at gøre tests bedre. Et af dem er projektet ERGO, koordineret af forskningsgruppen Økotoxikologi fra Biologisk Institut på SDU. ERGO forsker dels i bedre testmetoder til at identificere hormonforstyrrende stoffer, der påvirker skjoldbruskkirtelsystemet, og dels i at anvende viden fra dyreforsøg med fisk, padder og pattedyr til at forudsige effekter hos mennesker.

Hvorfor bekymrer vi os om de hormonforstyrrende stoffer?

Både hos mennesker og hos dyr i naturen har der været tegn på problemer med kønsudvikling siden 1970'erne. For menneskers sundhed kan det være meget svært at bevise effekter af specifikke stoffer. Imidlertid har man i flere studier set en sammenhæng mellem eksponering for kemikalier og effekter på især den mandlige kønsudvikling og reproduktion såsom faldende sædcelletal og øget risiko for testikelkræft [2], men også effekter på piger og kvinder såsom brystkræft og tidlig menstruation [3] sættes i forbindelse med kemikalieeksponering. ►



Svømmeblæreooppustning i zebrafiskelarve hæmmes af kemikalier, der påvirker thyreoideahormonerne T4 og T3. Her ses effekten efter fire dages eksponering for den polycykliske aromatiske hydrocarbon, phenanthren. Kilde: Vergauwen et al., 2015 [7].

I forhold til miljøet er der klare beviser for effekter af specifikke stoffer. For eksempel er det påvist, at fisk kan blive hermafroditter på grund af østrogenlignende stoffer som nonylphenol og octylphenol i spildevand [4], og hunsnegle danner hanlige kønsorganer på grund af tributyltin (TBT) i skibes bundmaling [5].

Regulering af hormonforstyrrende stoffer

I mange år kunne man i EU stort set ikke regulere kemikalier på baggrund af hormonforstyrrelser, fordi man ikke kunne blive enige om, hvilke kriterier for identifikationen der var nødvendige. Efter mange års til tider meget hårde diskussioner mellem industri, medlemslande, forskere og EU-Kommissionen blev der endeligt i 2018 vedtaget videnskabelige kriterier for identifikation af hormonforstyrrende stoffer i biocider og pesticider. Simplificeret betyder kriterierne, at biocider og pesticider ikke må indeholde hormonforstyrrende stoffer, medmindre de kun rammer de mål-

organismer, som midlerne er lavet for at bekæmpe. Kriterierne er farebaserede, hvilket betyder, at man hovedsageligt kigger på stoffernes farlighed og ikke så meget på, hvor meget mennesker og miljø eksponeres for stofferne. Denne tilgang skyldes, at man vurderer hormonforstyrrende stoffer som uønskede på lige fod med for eksempel kræftfremkaldende stoffer.

Der er et ønske i EU om horisontale kriterier, der regulerer stofferne ens i alle lovgivninger, men det er endnu ikke implementeret. Industrikemikalier (omkring 20.000 registrerede i EU) reguleres under forordningen REACH (Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemical substances). Her er det endnu ikke et krav at undersøge kemikalierne for hormonforstyrrende effekter, men de enkelte medlemslande eller ECHA (EU's kemikaliebureau) kan nominere specifikke kemikalier som SVHC (Substances of Very High Concern) på baggrund af bekymring for hormonforstyrrelser.

En proces går så i gang for at under-

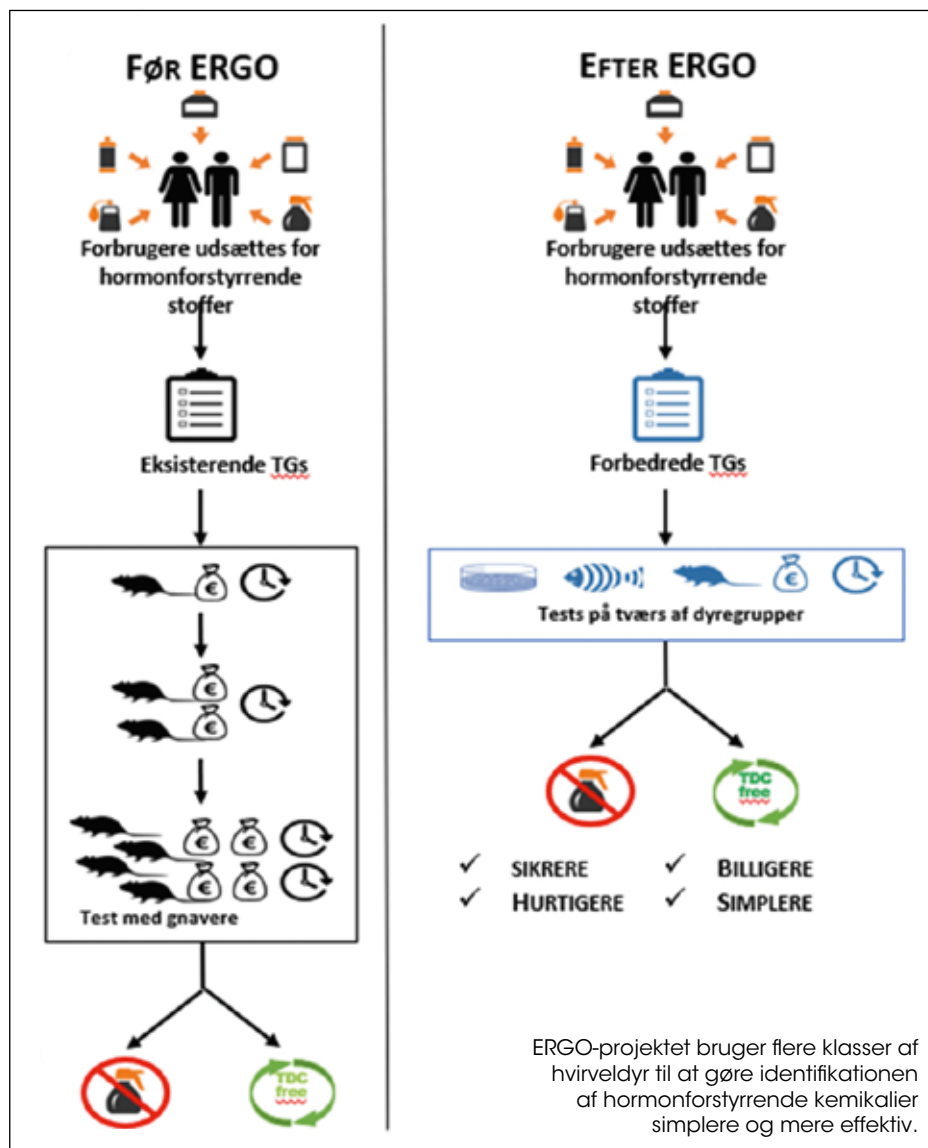
søge bekymringen, der kan stamme fra forskningsresultater eller resultater fremlagt af producenten/importøren af kemikaliet. Hvis processen fører til enighed om, at et kemikalie er hormonforstyrrende og lige så bekymrende som for eksempel kræftfremkaldende stoffer (jf. Artikel 57(f) i REACH), kommer kemikaliet på en såkaldt kandidatliste. Når et stof er på kandidatlisten, er det leverandørens pligt at oplyse om indholdet af stoffet i produktet. ECHA vurderer jævnlige stofferne på kandidatlisten og prioriterer stoffer, der er af særlig bekymring for sundhed og/eller miljø, og de kommer på en autorisationsliste. Stoffer på autorisationslisten skal udfases, og der gives kun midlertidige tilladelser til specifik brug. Der arbejdes i øjeblikket på at lave kriterier for REACH, som minder om kriterierne for biocider og pesticider.

ERGO forbedrer tests til identifikation af hormonforstyrrende stoffer

For at kunne identificere hormonforstyrrende kemikalier kræves det, som tidligere nævnt, at man har egnede tests til det. De nuværende test-guidelines, som er validerede af OECD og dermed accepteret af alle OECD's medlemslande, identificerer nogle effekter og virkninger, især for kemikalier, der påvirker kønshormonsystemet (hvor hormonerne er østrogen som 17β -østradiol og androgen som testosteron). Imidlertid mangler mange andre virkningstyper stadigvæk tests.

Et eksempel er skjoldbruskkirtelhormonsystemet, hvor thyreoideahormoner (T4 og T3) er vigtige for blandt andet udviklingen af alle pattedyrs hjerne og senere for stofskiftet, og hos padder og fisk er thyreoideahormoner afgørende for især overgangen fra haletudse/fiskelarve til frø/fisk. Skjoldbruskkirtlens hormonsystem er stort set ens i pattedyr, fisk og padder [6], og det udnytter vi i ERGO, hvor vi blandt andet udvikler såkaldte biomarkører for effekter på skjoldbruskkirtelhormonsystemet i fisk. En af de lovende markører er oppustning af fisks svømmeblære, der er kontrolleret af thyreoideahormoner.

Selvom det lyder mærkværdigt, vil en manglende oppustning af svømmeblæren i en zebrafiskelarve efter eksponering for et kemikalie i mange tilfælde kunne forudsige effekter i mennesker af samme kemikalie. Desværre (af historiske grunde) er regulatoriske procedurer for farevurdering af kemikalier adskilt for menneskers sundhed (hvor man bruger pattedyr som gnavnere) og for miljøet



(hvor man blandt andet bruger fisk og padder). Det betyder, at nyttige data fra tests med andre hvirveldyr end pattedyr hidtil er blevet ignoreret i human sundhedsforskning.

ERGO's hypotese er, at resultater fra forsøg med fisk og padder kan forudsige skadelige effekter på hormonsystemer i pattedyr og omvendt. Vi bruger zebra fisk, sporefrøer, mus og en række cellebaserede tests til at vise dette. Nye markører udvikles ved hjælp af avan-

■ Hormonforstyrrende stof - definition

Et hormonforstyrrende stof er defineret som "Et udefra kommende stof, der ændrer den endokrine funktion og som konsekvens forårsager alvorlige skadevirkninger i organismen, dens afkom og/eller i (sub)populationer af organismen". Oversat fra WHO/IPCS 2002 [1].

cerede analysemetoder for ændringer i genekspression, proteinekspression og metabolisme (transcriptomics, proteomics, metabolomics). Målet er at udvikle og forbedre OECD-tests, både for at vi får en mere effektiv identifikation af hormonforstyrrende stoffer og dermed en bedre beskyttelse af forbrugere og miljø, og desuden for at vi med tiden mindsker brugen af forsøgsdyr.

For mere information besøg ERGO: <https://ergo-project.eu/about/project-overview/> eller EURION: <https://eurion-cluster.eu/>.

E-mail:
Henrik Holbech: hol@biology.sdu.dk

Referencer

1. IPCS (2002). Global assessment of the state-of-the-science of endocrine disruptors. Geneva, Switzerland, World Health Organization, International Programme on Chemical Safety.
2. Skakkebaek et al., 2015. Male reproductive

■ ERGO

ERGO har modtaget en bevilling på 6 millioner euro fra Horizon 2020, Europa-Kommissionens støtteprogram til forskning under Grant Agreement nummer 825753 - ERGO. ERGO koordineres af lektor Henrik Holbech, Biologisk Institut, SDU og administreres af projektleder Helle Elisabeth Lyngborg, SDU og har 15 partnere fra EU og Japan. Projektet løber fra 2019 til midten af 2024. ERGO står for Endocrine Guideline Optimization, og bevillingen består af 45 millioner kroner fra EU og 7,5 millioner kroner fra industrielle partnere. Blandt samarbejdspartnerne er universiteter i Heidelberg, Antwerpen og Aarhus, den tyske miljøstyrelse, L'Oréal og BASF.

ERGO har sammen med de syv andre EU-støttede projekter lavet et klynge-samarbejde, et såkaldt "cluster", EURION, for at opnå synergi og undgå forskningsoverlap. EURION er den største EU-investering i bedre regulering af hormonforstyrrende stoffer med en samlet bevilling på cirka 375 millioner DKK.

disorders and fertility trends: influences of environment and genetic susceptibility *Physiol. Rev.*, 96 (2015), pp. 55-97, 10.1152/physrev.00017.2015.

3. Blanck et al., 2000. Age at menarche and tanner stage in girls exposed in utero and postnatally to polybrominated biphenyl. *Epidemiology* 11(6), 641-647.
4. Metcalfe et al., 2001. Estrogenic potency of chemicals detected in sewage treatment plant effluents as determined by in vivo assays with Japanese medaka (*Oryzias latipes*). *Environmental Toxicology and Chemistry* 20(2), 297-308.
5. Matthiessen & Gibbs, 1998. Critical appraisal of the evidence for tributyltin-mediated endocrine disruption in mollusks. *Environmental Toxicology and Chemistry* 17(1), 37-43.
6. Holbech et al., 2020. ERGO: Breaking Down the Wall between Human Health and Environmental Testing of Endocrine Disruptors. *International journal of molecular sciences*, Vol 21, Issue 8. DOI: 10.3390/ijms21082954.
7. Vergauwen et al., 2015. A high throughput passive dosing format for the Fish Embryo Acute Toxicity test. *Chemosphere* 139: 9-17.

Anvendelse af tidsdomæne NMR i medicinalindustrien

Tidsdomæne kernemagnetisk resonans (TD NMR) tilbyder en bred vifte af hurtige, ikke-destruktive anvendelser til forskningslaboratorier og produktionsmiljøer inden for kvalitetskontrol.

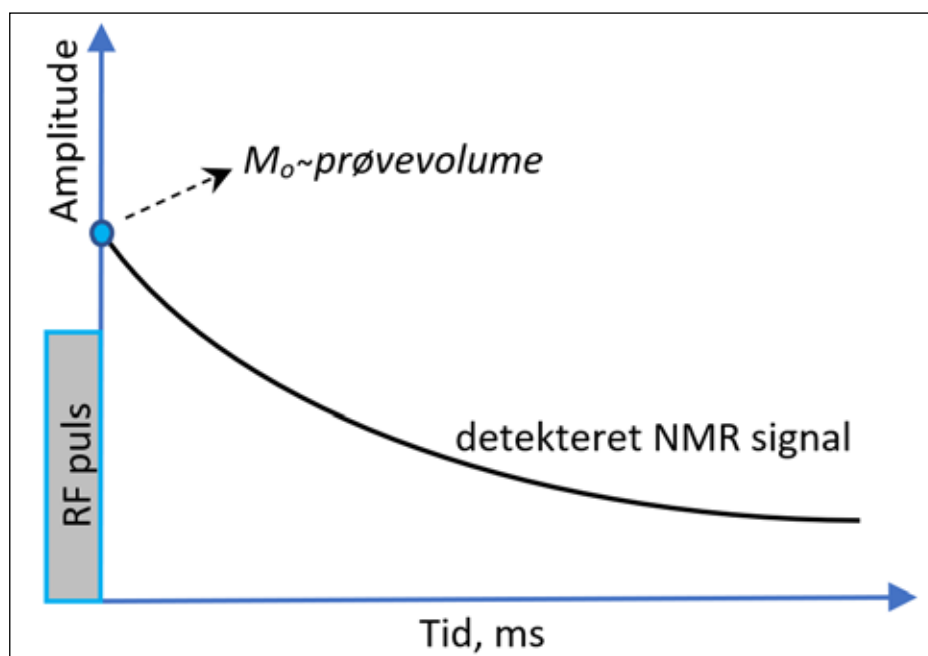
Af Emil Veliyulin,
Samsi Instruments

Tidsdomæne kernemagnetisk resonans (TD NMR) er en forenklet og væsentlig billigere version af de velkendte spektroskopiske instrumenter baseret på kernemagnetisk resonans. TD NMR finder mange anvendelser, hvor en hurtig, ikke-destruktiv og præcis måling ønskes. TD NMR er således blevet implementeret i forskellige forskningslaboratorier og industrielle sammenhænge inden for kvalitetskontrol af råvarer og slutprodukter, samt optimering af produktionen. Operatører uden særlig ekspertise kan udføre de fleste rutinetests takket være den høje grad af automatisering af moderne TD NMR-instrumenter.

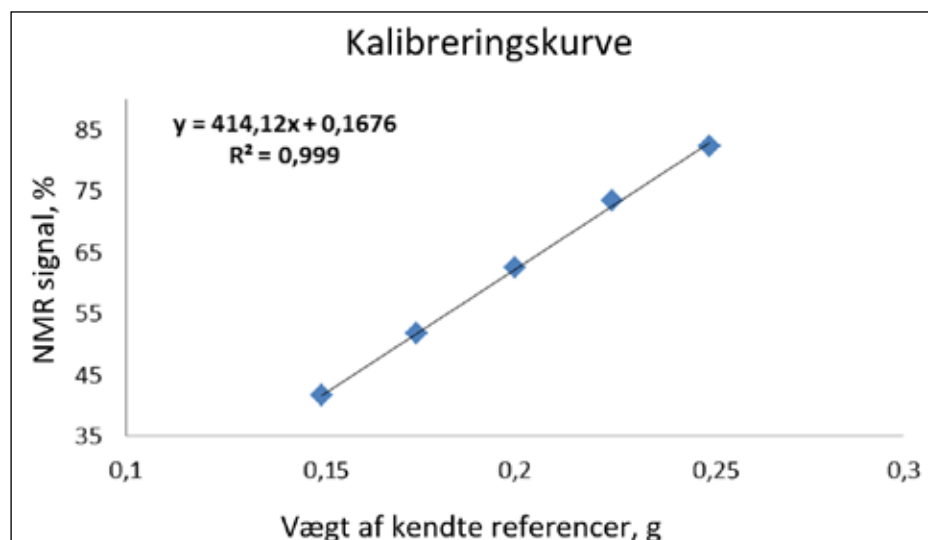
Håndtering af lægemidler

Medicinalindustrien har meget strenge kvalitets- og hygiejnekraav til fremstilling af mobil medicin. Sådanne lægemidler fremstilles af fuldautomatiske

Et TD NMR-instrument kan udføre en række eksperimenter, som giver forskellig og supplerende information om det undersøgte materiale. Dette opnås ved at udføre specifikke såkaldte NMR-pulssekvenser, såsom "Free Induction Decay" (FID), "Hahn-echo", CPMG, "solid echo" og andre. Valget af NMR-pulssekvens afhænger ikke kun af den type information, der kræves, men også i høj grad af prøvernes fysiske og kemiske egenskaber. Tilstedeværelsen af faste og flydende faser, deres mobilitet, stivhed og "levetiden" af NMR-signalet er blandt de vigtigste parametre, der skal tages i betragtning.



Figur 1. Detekteret NMR-signal efter eksitation af prøven med en radiofrekvenspuls. Amplituden M_0 ved $t=0$ er direkte proportional med prøvevolume.



Figur 2. Kalibreringskurve.



Figur 3. Forskellige typer af beholdere til flydende lægemidler, som kan bruges til præcis måling af volume ved hjælp af TD NMR.

linjer i kemisk rene produktionsfaciliteter med størst mulig reduktion af interferens med mennesker og minimal manuel håndtering af produktet. Oftest er lægemidlet hermetisk forseglet i en glasampul eller i en glasbeholder med en korkprop. Nøjagtig kontrol over mængden af lægemiddel i hver ampul er en af de vigtige parametre i kvalitetskontrollen, og det udstyr, der automatisk fylder væsken, bør kontrolleres og om nødvendigt kalibreres med korte intervaller for at undgå afvigelser fra det specificerede volumen.

Målinger til bestemmelse af volume

Når et NMR-rør med en prøve placeres i et permanent magnetfelt i NMR-instrumentet, er alle brintatomer i prøven "polariseret". For at udføre et simpelt NMR-eksperiment sendes en impuls i form af en radiofrekvens, der vipper alle polariserede brintatomer i prøven ud af ligevægt. Derefter vil prøven vende tilbage til ligevægt ved at afgive den ekstra energi, der kom fra radiofrekvensimpulsen, og dette vil inducere vekselstrøm i spolen, som detekteres i form af et dæmpningssignal (figur 1). Hvert brintatom i prøven bidrager til dette detekterede NMR-signal, og derfor vil amplituden M_0 (figur 1) på tidspunktet $t = 0$ være direkte proportional med

” For at udføre et simpelt NMR-eksperiment sendes en impuls i form af en radiofrekvens, der vipper alle polariserede brintatomer i prøven ud af ligevægt

mængden af væske i prøven. Dette kan for eksempel danne grundlag for en ultrahurt og nøjagtig måling af fyldningsvolumen af lægemidlet i ampuller og andre beholdere.

I denne analyse måles i praksis kun de første 20-30 punkter, så tæt på begyndelsen af kurven som muligt for at udligne dem og dermed forbedre nøjagtigheden (blå cirkel i figur 1). Metoden skal først kalibreres mod nogle få (cirka fem-syv) prøver med en præcis og kendt vægt af væsken. En typisk standardkurve er vist i figur 2, hvor Y-aksen repræsenterer det målte NMR-signal, og X-aksen

er vægten af fem referenceprøver. En brugervenlig kalibreringsrutine er integreret i alle TD NMR-instrumenter og kan nemt udføres af personale uden særlig kompetence på få minutter. Selve analysen af en ukendt prøve tager typisk 15-30 sekunder, og måletiden kan forkortes yderligere ved særlige behov (for eksempel i et fuldautomatisk online målesystem).

En konstant og veldefineret prøvetemperatur er vigtig for at opnå den højeste nøjagtighed med NMR-teknikken. Derfor er det en fordel at have temperaturstyring i både produktionslokalet og i selve NMR-magneten. Det er vigtigt at understrege, at TD NMR-teknikken kan udføre denne analyse på alle typer væskelignende prøver, hvor hverken form, farve, konsistens eller sammensætning har betydning for resultatet. Lægemidler kan analyseres i de fleste typer beholdere, som for eksempel sprøjter, hætteglas, flasker, ampuller osv. (figur 3). Målingen er uafhængig af typen, størrelsen og formen af prøvebeholderen, gummiprop eller plastik brugt i beholderen, aluminiumshætte og/eller metalnål placeret ovenpå (for eksempel krympede hætteglas) eller inde i beholderen (for eksempel sprøjter).

Billeddannende målinger

Magnetic Resonance Imaging (MRI) er en meget nyttig og vigtig NMR-teknik til medicinsk billeddannelse. Konventionel NMR (både spektroskopisk NMR og TD NMR) analyserer altid hele prøven, dvs. alle hydrogen eller andre NMR-aktive atomer i prøven bidrager lige meget til det observerede NMR-signal. Med andre ord har almindelig NMR ikke rumlig opløsning til at skelne mellem og visualisere forskellige strukturer og inhomogeniteter i prøven. I modsætning til NMR har MRI evnen til at præsentere NMR-signaler i form af et digitalt billede, hvor hver pixel i billedet indeholder information om NMR-egenskaberne i netop dette punkt af det objekt, der undersøges. Medicinsk billeddiagnostik handler om at skabe tværsnitsbilleder af interesseområder med den ønskede kontrast og kvalitet, der kan hjælpe læger med bedre at forstå misdannelser og sygdomme og komme med mere effektive behandlingsstrategier for hver enkelt patient.

Da MR er harmløs og kan udføres ikke-invasivt, er denne teknik ideel til opfølgning og kontrol af behandlingsforløbet. Blandt de vigtigste NMR-egenskaber, som har stor betydning for den observerede kontrast i MR-billeder, er mængden af aktive atomer i en

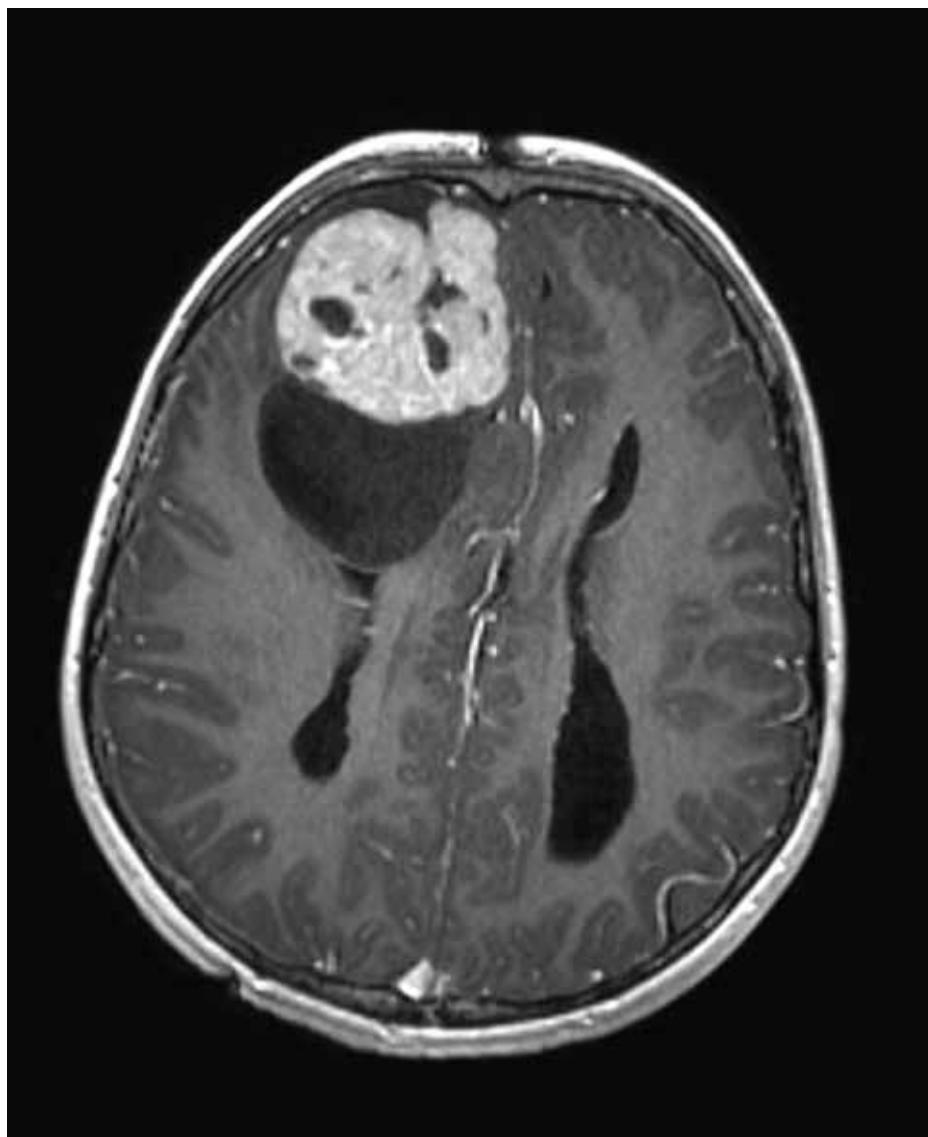
given pixel (såkaldt protondensitet) og NMR-relaksation. Den målte intensitet af NMR-signalet er normalt en kompleks kombination af disse parametre, og læger kan ofte opnå væsentlig bedre kontrast mellem forskellige strukturer og organer i et MR-billede ved at optimere MR-måleparametre samt ved at injicere et såkaldt MR-kontrastmiddel i patientens blodbane før MR-undersøgelsen. Dette fører til hurtigere NMR-relaksation i blodkar og væv med høj vaskularitet (for eksempel tumurvæv) end i normalt væv og dermed øget kontrast i MR-billeder. Et typisk eksempel er vist i figur 4, der viser et MR-billede af hjernen taget med et intravenøst kontrastmiddel, hvor en stor hjernetumor lyser op på grund af injiceret kontrastmiddel. Alle kontrastmidler vil efter kort tid blive udskilt af kroppen gennem urinen, uden at det påvirker kroppen på nogen skadelig måde.

TD NMR som redskab i udvikling af kontrastmidler

Et typisk kontrastmiddel er en væske, der indeholder paramagnetiske partikler af gadolinium (Gd). Brugen af ekstremt giftigt tungmetal Gd i MRI-kontrastmidler gør udviklingen, design og produk-

Bench-top TD NMR-instrumenter har flere fordele:

- Hurtig analyse (sekunder)
- Ingen prøvebehandling
- Mulighed for fuldautomatisk implementering
- Kan producere meget specifik og detaljeret information på forskellige niveauer til brug i R&D
- Ikke-invasiv og ikke-destruktiv for prøven
- Ikke-forurenende for miljøet - bruger ingen kemiske opløsningsmidler, sikkert for operatøren
- Nemt at bruge, kan udføres rutinemæssigt af personale uden særlig ekspertise
- Lineære og stabile over tid kalibreringer, derfor kræves der kun få kalibreringstests
- Lave vedligeholdelsesomkostninger
- Det samme instrument kan bruges til forskellige applikationer
- Brugerdefinerbare applikationer, evne til at skræddersy og udvikle egne applikationer.



Figur 4. MRI med intravenøs kontrast viser en stor hjernesvulst på højre side. Svulsten lyser op på grund af injiceret kontrastmiddel. Gentryk med tilladelse fra Dr. Robert Schubert, Radiopaedia.org, rID: 14088.

Da MR er harmløs og kan udføres ikke-invasivt, er denne teknik ideel til opfølgning og kontrol af behandlingsforløbet

tionen af moderne kontrastmidler til en ekstremt kompliceret teknologisk proces. Hver Gd-partikel skal indkapsles i et bærer-molekyle (chelateringsmiddel), der forhindrer toksiciteten af gadolinium, mens kontrastegenskaberne bibehol-

des. For at opnå den ønskede kontrast i MR-billeder er det vigtigt, at kontrastmidlet ændrer NMR-relaksationstider på en velkontrolleret måde. Samtidig er MR-scannere meget dyre, og MR-tid er værdifuld. Et meget enklere og billigere TD NMR-instrument som alternativ kan derfor være nyttigt. Det er muligt at bruge TD NMR til udvikling, test og kvalitetskontrol af MR-kontrastmidler. Da NMR-relaksationstiden er en funktion af magnetens styrke, er det vigtigt, at TD NMR-instrumentet har den tilsvarende magnetiske feltstyrke som MR-scanneren. I praksis anvendes normalt TD NMR-instrumenter med 20, 40 og 60 MHz protonresonansfrekvenser, der dækker behovene for kommercielle MRI-systemer.

E-mail:
Emil Veliyulin: emil@samsi.no

Kuldioxidkoncentrationer i klasseværelser

Billige og let tilgængelige sensorer kan indikere, om der er for høje CO₂-koncentrationer i skolernes klasseværelser.

Af Morten Frausig¹, Carlos Sangüesa Ferrer¹, Philip Becher Jørgensen¹, Anne Birgitte Lauridsen³ og Matthew S. Johnson^{1,2}

¹ Kemisk Institut, Københavns Universitet

² Airlabs

³ Gefion Gymnasium

Fem dage om ugen bruger skole- og gymnasieelever mange timer indendørs i et klasselokale, hvor de skal koncentrere sig om opgaver og følge med i undervisningen. Uden ordentlig udluftning stiger koncentrationen af CO₂ i klasseværelset fra elevernes udånding og chancen for smitte med den nye SARS-CoV-2 virus stiger [1]. Standardkoncentrationen af CO₂ i atmosfæren er cirka 400 parts per million (ppm), og i et klasselokale omkring 700 ppm, men som timerne går, stiger koncentrationen til over 1.000 ppm, hvilket har store konsekvenser for indlæring og helbred [1]. CO₂-sensorer kan være et godt værktøj til at indikere, om der skal luftes ud i lokalet.

Dårligt indeklima i klasselokaler

Dårligt indeklima har i mange år været et problem i danske klasseværelser. Lige fra folkeskolen til gymnasiet sidder elever mange timer dagligt og følger med i undervisningen, mens CO₂ langsomt bygger sig op i lokalet, hvis der ikke bliver ventileret ordentligt. Det er desuden anerkendt, at SARS-CoV-2 (covid-19) virus smitter gennem luftbåren transmission som små dråber og bioaerosoler og derfor er det vigtigt at have god udluftning [1,3]. Modulerne på gymnasier kan ofte trække ud og vare længe, hvilket gør, at der ikke bliver åbnet hverken døre eller vinduer i 45-90 minutter. Om sommeren er det for det meste nemt at have et vindue åbent, da udendørstemperaturen er tilpas, men når det nærmer sig efterår og vinter, forbliver vinduerne lukket, og der luftes ikke nær så meget ud. En løsning på dette kan være at opsætte effektiv mekanisk ventilation, der automatisk regulerer indeklimaet



Figur 1. Sensoren, der blev benyttet til målinger af CO₂. Den er på størrelse med en 50 cl mælkekarton.

uden at påvirke temperatur eller genere eleverne [1].

Forhøjede koncentrationer af CO₂ formindsker blandt andet koncentrations-evnén og evnen til at tage initiativ, giver hovedpine og kan lede til respiratoriske sygdomme på længere sigt. Et studie undersøgte, hvordan forhøjede koncentrationer af CO₂ påvirkede mennesker, der udførte forskellige opgaver, hvor det tydeligt kunne ses, at allerede ved 1.000 ppm klarede personerne sig dårligere i de opgaver og tests, de blev præsenteret for [2]. Studiet blev udført ved at tilføre CO₂ fra en gasflaske for at kunne kontrollere koncentrationerne. Studiet undersøgte helt op til 2.500 ppm, men det er set i andre undersøgelser, at koncentrationerne helt naturligt ved menneskelig udånding kan nå højere end det.



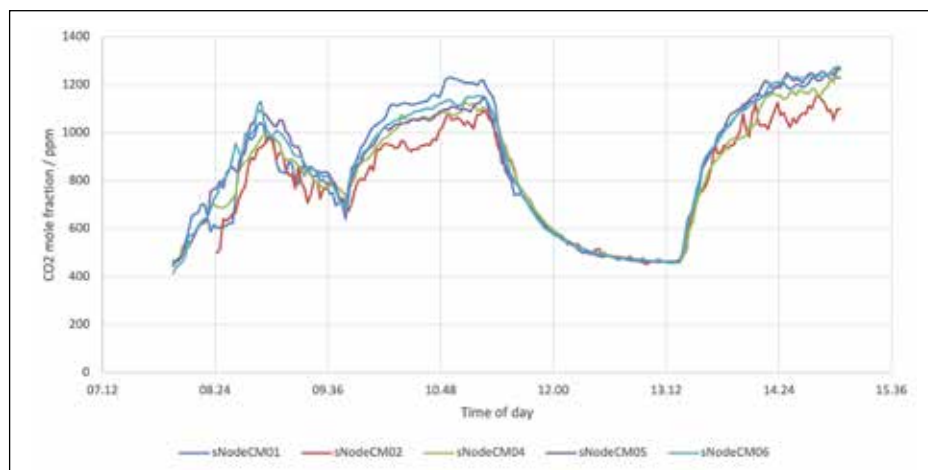
Foto: Anne Birgitte Lauridsen.

Målinger i et klasseværelse

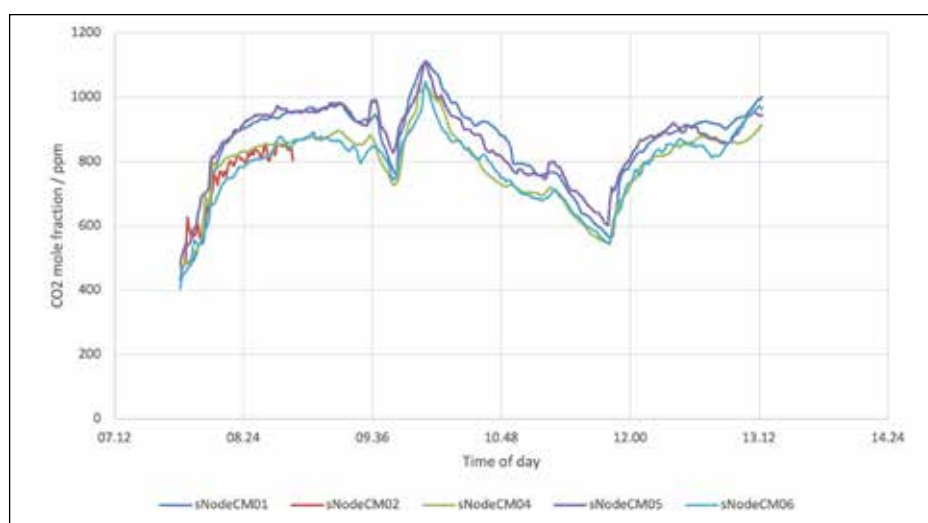
I november måned 2020 blev der foretaget målinger i et gymnasielokale for at give et overblik over CO₂-koncentrationerne og udluftning. Målingerne blev udført med 4-5 små portable sensorer udlånt fra Airlabs, der benytter infrarødt lys til at måle koncentrationerne, da CO₂ absorberer infrarødt lys ved 15 mikrometer (figur 1). Sensorerne var model SCD30 ikke-dispersiv infrarød sensor (Nova Fitness, Jinan, Kina) med automatisk baseline offset korrektion. Denne lavprissensor har en rækkevidde på 400 til 10.000 ppm og en nøjagtighed på 3 procent. Desuden blev sensorerne kalibreret mod et Gaser One fotoakustisk instrument i et kammer på Københavns Universitet. Sensorerne blev placeret jævnt i lokalet ved skoledagens start klokken cirka 8 om morgenen, og blev hentet igen mellem klokken 13 og 15.

Klasseværelset var tæt på 200 m³ og der var typisk mellem 15 og 30 elever i lokalet i hver time. De tre resultater er fra den 24., 26. og 27. november (figur 2, 3 og 4, se side 24) og viser, hvordan koncentrationerne stiger og falder i løbet af dagene. Sensor 5 (lilla kurve på graferne) manglede en kalibrering før målingerne, hvilket formentlig forklarer, at resultaterne fra denne sensor ligger et par hundrede ppm højere end de øvrige sensorer.

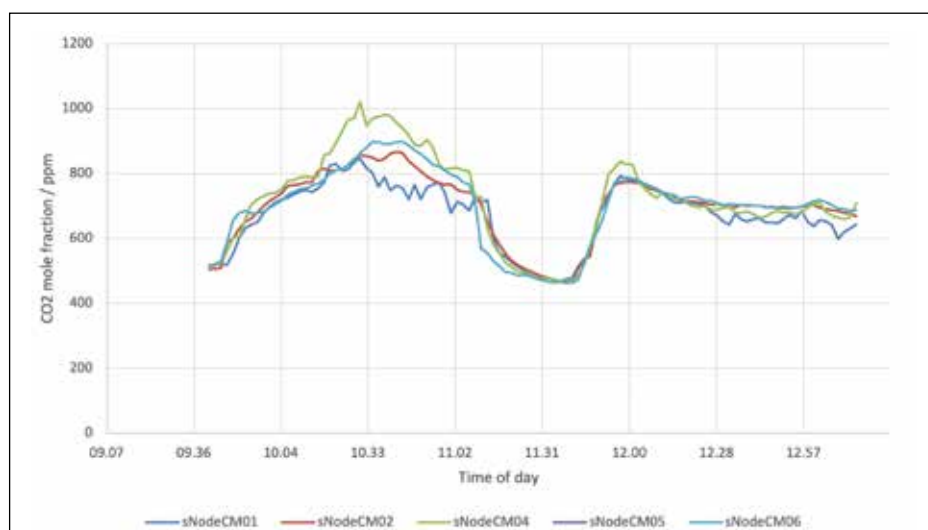
Det kan ses, hvor hurtigt koncentrationerne nærmer sig 800-1000 ppm om morgenen og hvornår der er pause, hvor



Figur 2. CO₂-koncentrationen i klasseværelset den 24. november.



Figur 3. CO₂-koncentrationen i klasseværelset den 26. november.



Figur 4. CO₂-koncentrationen i klasseværelset den 27. november.

eleverne forlader lokalet og en dør bliver åbnet. Mellem kl. 9.45 og 11.15 den 24. november sidder eleverne halvanden time i koncentrationer mellem 800 og næsten 1.200 ppm, mens koncentrationen stiger til mellem 1.100 og 1.300 ppm sidst på dagen. Det store fald fra

omkring kl. 11.15 skyldes en lang pause uden elever i lokalet.

Man kan se en lignende tendens den 26. november, hvor koncentrationerne ligger forholdsvis stabilt mellem 800 og 1.000 ppm det meste af dagen, hvor der er lektioner. Det langsomme fald

omkring klokken 10 kan skyldes, at elever har bevæget sig ind og ud af lokalet, og at døren har stået åbent under en lektion.

Målingen fra den 27. november viser koncentrationer mellem 800 og 1.000 ppm som de højeste koncentrationer i løbet af dagen. Koncentrationerne er lidt lavere end de andre dage grundet et mindre antal elever i lokalet i løbet af dagen. Desuden stod vinduerne åbent om formiddagen, hvilket har medført udluftning i lokalet og en mindre CO₂-koncentration.

Konklusion

Vores undersøgelse viste, at CO₂-koncentrationen i de undersøgte klasseværelser i løbet af skoledagen nåede niveauer, der i andre studier er fundet at påvirke indlæringssevnen. Det er klart, at dette fund lægger op til, at der bør overvejes, hvordan der kan træffes yderligere foranstaltninger for at opretholde en passende luftkvalitet indendørs på danske skoler. Et andet relevant aspekt er, at det er anerkendt, at covid spredes via luftbåren transmission [3]. Vi udånder CO₂, men også dråber og aerosolpartikler, såkaldte bioaerosoler. Forskning viser en klar kobling mellem CO₂ og bioaerosoler [4]. REHVA, Federation of European Heating, Ventilation and Air Conditioning Associations, anbefaler, at CO₂-sensorer indstilles til at give en advarsel ved 800 ppm for at opretholde sikre forhold under pandemien [5]. Det er klart, at der bør træffes yderligere foranstaltninger for at opretholde en passende luftkvalitet indendørs.

E-mail:

Matthew S. Johnson: msj@chem.ku.dk

Referencer

1. L. Brix, Forskere efter covid-19: Alle skoler bør skaffe ventilationsanlæg, 8 Sept. 2020, Videnskab.dk, <https://videnskab.dk/krop-sundhed/forskere-efter-covid-19-alle-skoler-boer-skaffe-ventilationsanlaeg>.
2. Satish, U., Mendell, M.J., Shekhar, K., Hotchi, T., Sullivan, D., Streufert, S. and Fisk, W.J., 2012. Is CO₂ an indoor pollutant? Direct effects of low-to-moderate CO₂ concentrations on human decision-making performance. *Environmental health perspectives*, 120(12), pp.1671-1677.
3. Borak, J., 2020. Airborne transmission of covid-19. *Occupational Medicine*, 70(5), pp.297-299.
4. N. Kappelt, H. Russell, S. Kwiatkowski, A. Afshari and M.S. Johnson, Correlation of Respiratory Aerosols with Metabolic Carbon Dioxide, *Sustainability* 13(21), 12203; <https://doi.org/10.3390/su132112203>, 2021.
5. Covid-19 ventilation and building services guidance for school personnel, REHVA Federation of European Heating, Ventilation and Air Conditioning Associations, 25 November 2020.

Quantum Computing: Et nyt værktøj for kemi- og biotekniske ingeniører

Quantum Computing kan bruges til at studere en bred vifte af emner lige fra katalysators reaktivitet til komplekse optimeringer af produktionsanlæg. Teknologien kan således bidrage til udvikling af avanceret og effektiv terapi samt udvikling af mere effektive og mere miljømæssigt bæredygtige produktionsanlæg.

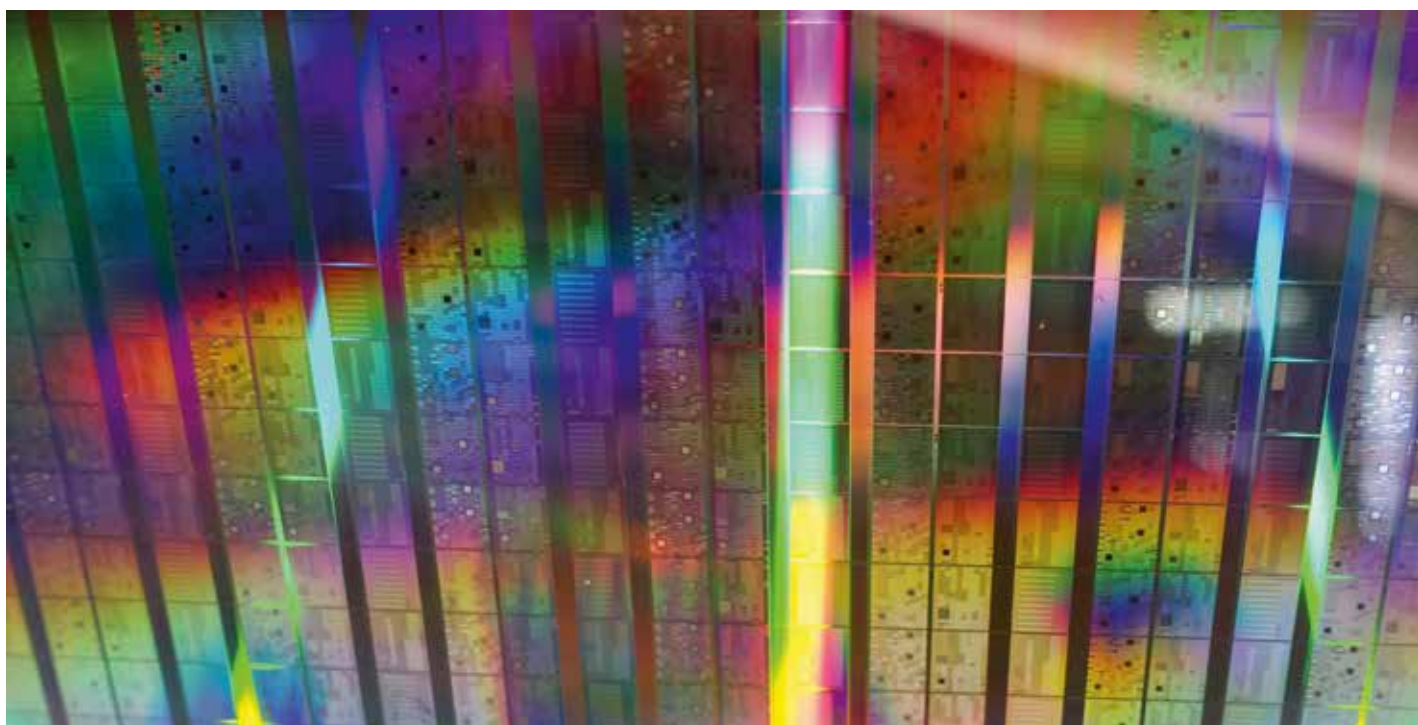


Foto: Wikimedia

Af Seyed Soheil Mansouri¹,
Matrin Peter Andersson¹, Izabela
Balicka² og Christian Beenfeldt³

¹ Institut for Kemiteknik, DTU

² AIChE - American Institute of Chemical
Engineers, New York

³ Knowledge Hub Zealand

Vi drager nytte af fordelene ved klassiske computere hver dag. Der er imidlertid mange typer af problemer, som - i

takt med at de vokser i størrelse, bliver så beregningsmæssigt komplekse, at klassiske computere aldrig vil kunne løse dem. Quantum computing (QC) er en beregningsmodel, der anvender kvantemekaniske materialeegenskaber til at løse sådanne problemer. QC befinder sig på et tidligt stadie af et omfattende indtog i forskellige områder af industrien, hvor der kan drages fordel af de algoritmiske hastighedsforøgelser,

som teknologien kan tilbyde. QC kan anvendes inden for en række områder som for eksempel datalogi, matematik, kemisk og biokemisk ingeniørvidenskab og inden for finansindustrien.

Udviklingen af de første kvantecomputere og "quantum advantage"

Kvantecomputere begyndte at vinde indpas i 1982, da fysikeren Richard

Feynman holdt et foredrag, hvor han forklarede, at klassiske computere ikke kunne behandle beregninger, der beskriver kvantefænomener, og at der derfor var brug for en QC-metode for at fjerne flaskehalse [1]. I midten af 1990'erne udviklede Peter Shor sin banebrydende algoritme, som beviste, at en kvantecomputer kan beregne primfaktorer af store tal eksponentielt hurtigere end klassiske computere, hvilket illustrerede styrken af denne nye teknologi [2]. I dag er et stigende antal virksomheder, startups og akademiske forskningslaboratorier afhængige af QC for at accelerere udviklingen af nye teknologier. Det forudses, at QC-markedet vil vokse hurtigt over de næste 10 år, især drevet af QC's anvendelsesmuligheder inden for farma, kemi og biologi.

Nogle af de problemer, som ingeniører i disse industrier skal løse, kræver en enorm stor beregningskapacitet/databehandlingskapacitet på grund af problemernes kompleksitet og størrelse, og de kan derfor ikke løses med klassisk computerteknologi. Udtrykket "quantum advantage" bruges til at beskrive, hvordan kvantecomputere kan anvendes til at løse problemer, som det ville være umuligt at løse med klassiske databehandlingsmetoder/beregningsmetoder. Kvantecomputere anvender sandsynligheder og sammenfiltring på en unik måde, som gør dem til et potentielt særligt nyttigt redskab til at løse mange af de optimeringsproblemer, som man kan støde på inden for natur- og ingeniørvidenskaben.

Kvantecomputere lagrer information i qubits, dvs. kvantebits. I modsætning til klassiske bits, der eksisterer som enten 0 eller 1, eksisterer qubits i superpositioner af 0 og 1 og bruger sammenfiltring og interferens mellem en række af qubits til at løse en beregning med et stort antal udfaldsområder. Når quantum advantage er opnået, anslås det, at en kvantecomputer med kun et par hundrede qubits vil kunne udføre flere beregninger samtidig, end der er atomer i det kendte univers [3]. QC-teknologien har vist sig at have særligt stort potentiale til at løse problemer, som involverer kemi, kunstig intelligens, optimering, simulering, komplekse sammenhænge mellem indbyrdes forbundne elementer samt problemer med store datasæt, der ligger uden for de klassiske computers skaleringsgrænser [4].

Bidrag til bæredygtighed og optimering i cancerbehandling

QC-værktøjet har også adskillige relevante anvendelsesmuligheder inden for miljø- og biomedicinsk ingeniørvidenskab. Da QC kan bruges til at undersøge katalysators reaktivitet, kan oplysningerne fra QC-beregninger hjælpe ingeniører med at erstatte nuværende fremstillingsproceskatalysatorer med katalysatorer, der har en mindre miljøbelastning. For eksempel tegner kemiske katalysatorer, der anvendes i gødningsproduktionen, sig i øjeblikket for to procent af de globale kuldioxidudledninger og kan potentielt erstattes, hvis vi har de nødvendige værktøjer til

at undersøge alternative muligheder [5]. Desuden kan QC hjælpe ingeniører med at afdække billigere og mere effektive katalysatorer til kulstofopsamling end dem, der anvendes i øjeblikket, hvilket kan bidrage til at fremskynde tilpasning til teknologien [6].

Ingeniører inden for biomedicin har påvist, at QC kan have forskellige anvendelsesmuligheder inden for sundhedssektoren som for eksempel udvikling af forbedrede kræftbehandlingsmetoder. Computerne kan for eksempel analysere tusindvis af variabler for at udvikle strålingsplaner, der er rettet mod kræftceller med den ideelle dosis og det ideelle mål uden at skade raske celler [7]. QC er også blevet anvendt til at forstå diagnostiske billeder ved hjælp af maskinlæringsværktøjer. Inden for lægemiddeludvikling kan QC-værktøjer reducere tiden og forbedre resultaterne i forbindelse med "in silico"-lægemiddelforskning [8].

QC-teknologi er allerede ved at blive anerkendt af en række fremtrædende virksomheder. Google har bygget en kvantecomputer, der kan simulere en simpel kemisk reaktion [9]. Exxon-Mobil udvikler QC-teknologier til optimering af elnet, mere forudsigelig miljømodellerung samt nye materialer til kulstofopsamling [10]. De japanske kemivirksomheder JSR og Mitsubishi Chemical har sluttet sig til IBM Q Hub på Keio University for at få adgang til kvantecomputere på 20 og 50 qubit, som kan undersøge unikke virksomhedsløsninger [11]. Øget støtte fra private equity og venturekapital har medført, at flere nystartede virksomheder specialiserer sig i at bruge QC-teknologi til en række forskellige formål.

Fremtiden

QC's potentiale realiseres allerede på tværs af mange forskellige områder, selvom det er en ny teknologi, der befinder sig på et tidligt udviklingsstadium, og som kræver langt mere udvikling med hensyn til hardwarekapacitet, tilpasning af løsningsstrategier for at udnytte anvendelsesmuligheder samt reelt at løse virkelige problemer. I denne sammenhæng er forbindelsen mellem kemisk og biomolekylær produktdesign og QC blevet diskuteret. Kemisk og biomolekylær produktdesign har i vid udstrækning draget nytte af computerunderstøttede metoder og værktøjer ved hjælp af klassiske computere. I forbindelse med produktudvikling af mere bæredygtige processer som for eksempel udvikling af grønne opløsningsmidler, mere effektivt procesdesign, integreret proces-produkt-design samt udvikling af nye lægemidler

■ Vi finder følgende områder inden for kemisk produkt-procesdesign relevante i forhold til at bruge QC-metoder fremover:

- **Hybride QC-metoder.** Disse vil sandsynligvis komme til at spille en vigtig rolle, da mange multivariable problemer vil blive løst optimalt ved hjælp af en kombination af "dyre" QC-ressourcer og "billige" klassiske databehandlingsressourcer. Front-end-applikationer, der kan optimere forholdet mellem QC og klassiske databehandlingsressourcer, vil sandsynligvis også være nyttige, såvel som understøttende trænings- og uddannelsesinitiativer vil komme til at spille en vigtig rolle.
- **Identificering af optimeringsudfordringer.** Identificering af relevante udfordringer, der kan anses som optimeringsudfordringer, og som kan løses med kvantecomputere. QC skal ikke erstatte alle eksisterende former for beregninger.
- **Anvendelse af QC i kombination med maskinlæringsmetoder.** Anvendelse af QC (hybrid eller "stand-alone") kombineret med maskinlæringsmetoder kan give betydelige fordele ved udvikling af multivariable statistiske procesovervågnings- og fejlagnosesystemer.
- **Computerbaseret modellering af kvantemekaniske systemer** som for eksempel molekyler, herunder forudsigelser af molekylers egenskaber, struktur og reaktivitet, vil sandsynligvis blive meget mere præcis ved hjælp af QC, hvilket vil få direkte indflydelse på områder som for eksempel opdagelse af lægemidler og design af kemiske specialmaterialer.

AICHe var sammen med DTU Kemiteknik og Knowledge Hub Zealand vært for workshoppen "Quantum Computing Applications in Chemical and Biochemical Engineering Workshop" (www.aiche.org/qc) der blev afholdt den 1.-3. april 2022 i København. Workshoppen var finansieret af Novo Nordisk Foundation.

eller vacciner til en fremtidig pandemi, kan der imidlertid drages fordel af nye beregningsværktøjer som for eksempel QC. Ligesom QC også ser ud til at kunne anvendes inden for procesdesign, -styring og -overvågning.

Der er blevet identificeret adskillige behov og udfordringer, og der er blevet givet specifikke forslag til, hvordan QC kan anvendes i denne sammenhæng [12]. Vi forudser rige muligheder for at udnytte QC til at udvikle og designe mere effektive, økonomiske og bæredygtige produkter og kemiske processer i en ikke så fjern fremtid.

E-mail:

Seyed Soheil Mansouri: seso@kt.dtu.dk

Referencer:

1. Gamble S. Quantum Computing: What It Is, Why We Want It, and How We're Trying to Get It. In: National Academy of Engineering. Frontiers of Engineering: Reports on Leading-Edge Engineering from the 2018 Symposium. Washington (DC): National Academies Press (US); 2019.
2. <https://news.mit.edu/2019/mit-professor-peter-shor-wins-micius-quantum-prize-0426>.
3. <https://www.technologyreview.com/2018/02/21/145300/serious-quantum-computers-are-finally-here-what-are-we-going-to-do-with-them/>.
4. <https://www.ibm.com/downloads/cas/8QDGKDZJ>.
5. <https://karmainc.com/quantum-computers-harnessed-to-solve-climate-change-may-be-on-the-horizon/#:~:text=Quantum%20computers%20will%20help%20the,CO2%20emissions%2C%20expert%20tells%20panel>.
6. <https://www.weforum.org/agenda/2019/12/quantum-computing-applications-climate-change/>.
7. Solenov, D. The Potential of Quantum Computing and Machine Learning to Advance Clinical Research and Change the Practice of Medicine. *Mo Med*. 2018, 115(5): 463-467.
8. <https://cen.acs.org/business/informatics/Lets-talk-quantum-computing-drug/98/i35>.
9. Savage, N. Google's Quantum Computer Achieves Chemistry Milestone. *Scientific American*; 2020 Sept 4.
10. IBM.
11. IBM.
12. Andersson, M.P., Jones, M.N., Mikkelsen, K., Fengqi, Y., Mansouri, S.S. Quantum computing for chemical and biomolecular product design. *Current Opinion in Chemical Engineering*, 2022, 36, 100754.

Kvalitetssikring af manuelle plukke- og samleprocesser

Af Klaus Hansen, journalist

Ifm har lanceret et nyt kvalitetssikrings-system til overvågning af manuelle plukke- og samleprocesser. Systemet bygger på moderne billedbehandling kombineret med kunstig intelligens.

Det kan være for omkostningskrævende for virksomhederne at automatisere plukke- og samleprocesser. Her må man ty til pakkeoperatører - der manuelt plukker, samler og pakker produkterne. Som bekendt laver mennesker fejl - men naturligvis er det også her nødvendigt at sikre en høj kvalitetsstandard. Til dette formål har ifm bragt en løsning på markedet, nemlig ifm mate. Dette kvalitetssikringssystem overvåger ved hjælp af et kamera pakkeoperatørens hænder - og giver enten en akustisk alarm eller blink fra en lampe, hvis hænderne foretager sig noget "forkert", dvs. at plukke- og samleprocessen ikke forløber korrekt.

Systemet kan anvendes i alle industrier, hvor der udføres en manuel plukning af emner, der efterfølgende samles til et færdigt og salgsklart produkt. Et eksempel på anvendelse kunne være i medicinalindustrien ved manuel montage af medicinske enheder. Særligt i medicinalindustrien er kvalitetssikring i produktionen vigtigt. Et andet eksempel kunne være i elektronikindustrien, når de forskellige komponenter samles og monteres til de færdige og salgsklare produkter.

Systemet anvender kunstig intelligens

Systemet består af et 2D/3D-kamera (optisk sensor), der holder øje med, hvad pakkeoperatørens hænder foretager sig. Data fra kameraet behandles i et billedbehandlingsprogram, og ved hjælp af kunstig intelligens vurderer systemet løbende, om medarbejderne plukker og samler produkterne korrekt.

Som grænseflade til pakkeoperatøren anvender ifm mate normalt en touchskærm, der placeres foran medarbejderen.

De forskellige plukke- og samleprocesser defineres fleksibelt i softwaren. Konfigurering af ifm mate til de forskellige samleopgaver er nem, og der er ikke



Med Ifm's nye kvalitetssikringssystem er det muligt at kvalitetssikre manuelle plukke- og samleprocesser. Pakkeoperatøren griber her ud efter en momentskruetrækker med sin højre hånd. Hun er ved at samle en ifm sensor. Hvis hun laver en plukke- eller samlefejl, så vil systemet straks afgive en alarm, og hun får mulighed for at rette op på fejlen. Derved sikres det, at fejlbehæftede produkter ikke forlader hendes arbejdsstation.

behov for programmering eller særlige it-kyndige til at køre systemet ind. Ligeledes er systemet fleksibelt og kan hurtigt ændres til overvåge og kvalitetssikre andre tilsvarende plukke- og samleopgaver i virksomheden.

Systemet kan suppleres af en alarmdel, der afgiver et lyd- eller lyssignal, hvis pakkeoperatøren laver fejl i sit arbejde. Hvis systemet således registrerer en plukke- eller samlefejl, skal operatøren kvittere på touchskærmen - og herefter udføre arbejdet korrekt. På den måde sikres det, at alle de produkter, der forlader pakkeoperatøren, ikke er fejlbehæftede. Det betyder en forbedret og mere ensartet produktkvalitet - og et betydeligt fald i antallet af reklamationssager.

Yderligere information:

Ifm

Ole Jørgensen

Tlf. 43 35 07 06

ole.jorgensen@ifm.com

Et glemt dansk bidrag til kvantekemien

En vigtig kvantemekanisk teori for atomer med mange elektroner er blevet overset i dansk og international kemihistorie. Det bliver der nu rettet op på.

Af Helge Kragh

I Stig Veibels omfangsrige kemiske bibliografi fra 1943 leder man forgæves efter navnene Øyvind Burrau og Christian Møller [1]. Og dog var disse de to eneste danske forskere, der bidrog med vigtige afhandlinger om den nye kvantemekaniks anvendelse på kemiske områder. Deres fravær i Veibels værk skyldes måske, at hverken Burrau eller Møller var kemikere, men derimod fysikere på Niels Bohrs Institut for Teoretisk Fysik. Burrau (1896-1979) var den første, der anvendte Schrödingerligningen til at beregne bindingsstyrken i et molekyle - det simplest tænkelige, nemlig hydrogenionen H_2^+ - hvilket han gjorde i starten af 1927.

Hans arbejde var en inspirationskilde for de to tyske fysikere Walter Heitler og Fritz London, der senere i 1927 formulerede den banebrydende teori for den kovalente binding, der i dag betragtes som begyndelsen på den egentlige kvantekemi [2]. Mens Burraus indsats er velkendt, er det samme på ingen måde tilfældet med den teori, Møller (1904-1980) og hans amerikanske kollega Milton Plesset (1908-1991) offentliggjorde i *Physical Review* i 1934 [3]. Faktisk gik der mere end 40 år, før Møller-Plesset-teorien for alvor blev bemærket blandt kvantekemikerne. Men efter årtiers dvaletilstand blev den voldsom populær med

Portrætfoto af Christian Møller fra 1936. Niels Bohr Arkivet, København.

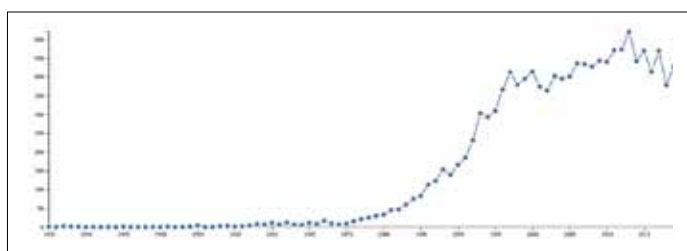


det resultat, at det samlede antal citationer til Møller-Plesset-artiklen nu overstiger 16.000. Det er en af historiens mange ironier, at hverken Møller eller Plesset interesserede sig det fjerneste for kemi og i øvrigt ikke betragtede deres teori som værende af synderlig betydning.

Kvantekemiens barndom

I deres pionerarbejde fra 1927 viste Heitler og London, at den kovalente binding i H_2 -molekylet kan forklares kvantemekanisk *ab initio*, altså uden at gøre brug af empiriske data. Mere overordnet var budskabet i den nye kvantekemi, som den blev udviklet de følgende år af især Friedrich Hund, Linus Pauling og Robert Mulliken, at den kemiske binding kan forklares (og kun forklares) via kvantemekanikken og de kræfter, der stammer fra elektronens spin. Som forståelsen af bindingens natur lå uden for den klassiske kemi, sådan lå den matematiske formalisme uden for de fleste kemikers rækkevidde.

Den tidlige kvantekemi var fokuseret på bindingsforhold i simple molekyler, men der var også flere forsøg på at beregne strukturen af atomer eller ioner med flere elektroner ud fra approksimationer til Schrödingerligningen. Den første succesrige mangeelektronteori ("self-consistent field theory") skyldtes den engelske fysiker Douglas Hartree, hvis metode fra 1928



Citationskurve for Møller-Plesset-artiklen fra 1934. Web of Science.



Konference på Bohrs Institut 1933. Møller er på tredje række, nummer tre fra højre, og Plesset er foran ham, nummer fire fra højre. Niels Bohr Arkivet, København.

dog ikke tog hensyn til elektronernes spintilstand. Metoden blev forbedret og generaliseret af den russiske fysiker Vladimir Fock, hvilket resulterede i den meget anvendte, men matematisk komplicerede Hartree-Fock approksimationsmetode. Selv denne forbedrede metode redegjorde dog ikke for de enkelte elektroners vekselvirkning, sådan som den endnu mere sofistiskerede Møller-Plesset-metode fra 1934 netop gjorde.

Møller-Plesset-teorien

Milton Plesset opholdt sig som postdoc på Bohrs Institut 1933-1934, hvor han samarbejdede med Møller om en kort artikel med titlen "Approximation Treatment for Many-Electron Systems", der udkom i oktober 1934. Heri viste de to fysikere, at Hartree-Fock-metoden kunne udvikles til en stærkere teori ved at tilføje et perturbationsled, der i anden orden svarede til en vekselvirkning mellem de enkelte elektroner. Den i hovedsagen matematiske artikel i *Physical Review* var ment som et bidrag til den kvantemekaniske teori for systemer af mange elektroner og ikke som et bidrag til den nye kvantekemi. Faktisk optræder ord som "atom" og "molekyle" slet ikke i artiklen, hvilket utvivlsomt har bidraget til dens usynlighed i kemiske kredse.

Ingen af de to forfattere bidrog senere til den kvantekemiske litteratur, som den især udfoldede sig i tidsskriftet *Journal of Chemical Physics* fra 1933 og senere i *International Journal of Quantum Chemistry* grundlagt i 1967. Mens Møller i sin senere karriere især arbejdede med mesonteori og generel relativitetsteori, fokuserede Plesset på ingeniørmæssige aspekter af hydrodynamik og kernefysik. Umiddelbart syntes Møller-Plesset-teorien at være en gedigen fiasko, idet den ikke blot blev ignoreret af kemikerne, men også af de fleste fysikere. Således blev artiklen kun citeret fem gange i perioden 1934-1940 og i ingen af tilfældene i relation til atomers elektronstruktur.

En teori i tornerosesøvn

Videnskabssociologer har indført et begreb om "torneroseartikler" for den slags videnskabelige bidrag, der i lang tid forbliver upåagtede for så, på næsten magisk vis, at blive vakt til live [4]. Oversat til citationsmål betyder det, at en artikel, der næsten ikke citeres, efter flere årtier oplever en eksplosiv vækst i antallet af citationer. Møller-Plesset-teorien fra 1934 er et markant eksempel på en torneroseartikel. Endnu i 1962 var det samlede antal citationer til artiklen blot 22, altså mindre end én per år. Til sammenligning blev den citeret hele 6.100 gange i årtiet mellem 2012 og 2021.

Den drastiske ændring i popularitet fandt sted omkring 1980 og skyldtes til dels den engelsk-amerikanske teoretiske kemiker John Pople, der på den tid udviklede og promoverede Møller-Plesset-metoden som en effektiv metode til kemiske beregninger. I 1998 blev Pople, sammen med den amerikanske fysiker Walter Kohn, tildelt den første og hidtil eneste nobelpris for bidrag til kvantekemien. Pople benyttede sit nobelforedrag til at fremhæve den da 64 år gamle teori som en banebrydende og stadig værdifuld metode i moderne kvante- og beregningskemi [5].

Fysik og kemi

I kemiens nyere historie er der talrige eksempler på, at fysikere mere eller mindre utilsigtet har leveret vigtige bidrag til det kemiske fagområde. Mindst et dusin fremtrædende fysikere er i det 20. århundrede blevet tildelt nobelprisen i kemi, mens ingen kemikere har fået en fysikpris. Et tidligt eksempel på førstnævnte er Ernest Rutherford, der ikke havde høje tanker om kemien som videnskab, men alligevel i 1908 fik prisen i kemi for sine undersøgelser af radioaktivitet. Var han nu pludseligt



Milton Plesset (til venstre) sammen med Niels Bohr og andre fysikere. Niels Bohr Arkivet, København.

blevet kemiker? Grundlaget for kvantekemien blev tilsvarende skabt af fysikere, der uden at vide eller ville det skabte en ny kemividenskabelig disciplin.

Det er indlysende urimeligt at betegne Christian Møller som "en dansk kemiker", sådan som det gøres i Wikipedia-artiklen om ham [6]. Men heraf følger ikke, at han og den meget anvendte Møller-Plesset-metode ikke har en naturlig plads i dansk og international kemihistorie. Bohr var jo heller ikke kemiker, om end han to gange blev indstillet til en kemisk nobelpris. Under alle omstændigheder bidrog hans atomteori afgørende til kemiens udvikling og han optræder derfor som fast inventar i seriøse beskrivelser af kemiens nyere historie. Det samme burde gælde for Møller med hensyn til kvantekemien.

E-mail:

Helge Kragh: helge.kragh@nbi.ku.dk

Referencer

1. S. Veibel 1943, *Kemien i Danmark*, II. Nyt Nordisk Forlag.
2. K. Gavroglu og A. Simões 2012, *Neither Physics nor Chemistry*. MIT Press.
3. C. Møller og M. Plesset 1934, *Physical Review*, 46, 618-622.
4. A. van Raan 2004, *Scientometrics*, 59, 467-472.
5. J. Pople 1999, *Angewandte Chemie International Edition*, 38, 1894-1902.
6. https://en.wikipedia.org/wiki/Christian_M%C3%B8ller.

■ Schrödingerligningen

Denne fundamentale differentialligning, der blev formuleret af Erwin Schrödinger i 1926, beskriver en partikel, der påvirkes af ydre kræfter. For en partikel med masse m , der i én dimension bevæger sig under indflydelse af potentialet V , kan ligningen skrives

$$\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi = \frac{i\hbar}{2\pi} \frac{\partial \psi}{\partial t},$$

hvor $\hbar$ er Plancks konstant og $i = \sqrt{-1}$ den imaginære enhed. Størrelsen $\psi(x, t)$ er den bølgefunktion, der i kvantemekanikken beskriver partiklens tilstand. Ved at løse ligningen i konkrete tilfælde, for eksempel et hydrogenatom hvor en elektron bevæger sig omkring en proton, kan de mulige energitilstande for systemet findes. Mens dette går let for hydrogenatomet, er beregningerne meget komplicerede, når der er flere elektroner.

Emissioner af metan og lattergas: Fremtidens vigtigste klimagasser?

Mødet blev aflyst i efteråret 2021 på grund af corona,
men nu skulle vi gerne kunne mødes!

Onsdag den 29. juni 2022 kl. 13.00 - 16.15

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

Alle er velkomne!

Med klimaloven fra sidste år er Danmark forpligtet til at have reduceret sine udledninger af drivhusgasser med 70% i 2030 (ift. 1990) og være CO₂-neutral i 2050. Omstillingen er allerede godt i gang med stigende andel vedvarende energi, som erstatter de mest direkte CO₂-udledninger fra kul, olie og gas. Der er derfor en stigende opmærksomhed på andre klimagasser end

CO₂: metan, lattergas, CFC'er osv. Vi har inviteret en række foredragsholdere og forskere til at fortælle om den nyeste viden om problemstillingen, og til at vurdere om mulighederne for at nå en tilstrækkelig reduktion i forhold til de nationale danske mål, også inden for udvalgte sektorer hvor der forventes en særlig indsats.

13.00 Velkomst og introduktion

Jakob Klenø Nøjgaard, IGAS

13.15 Hovedkonklusioner vedr. klimagasser i IPCC's 6. statusrapport

*Jens Hesselbjerg Christensen,
Niels Bohr Institutet, Københavns Universitet*

13.35 Gemte eller glemte klimagasser

*Mads Peter Sulbæk Andersen,
California State University Northridge/Københavns Universitet*

14.05 Tales of old air in polar ice

Michael Dyonisius, Niels Bohr Institutet, Københavns Universitet

14.25 Emissioner af metan fra danske lossepladser og biogasanlæg

Jacob Mønster, Force Technology

14.45 Kaffe, te og kage

15.15 Er koen klimasynder eller...?

Mette Olaf Nielsen, Institut for Husdyrvidenskab, Aarhus Universitet

15.45 Diskussion

16.15 Afslutning

Der er ingen mødeafgift. Tilmelding foretages senest den 10. juni 2022 til:

Karsten Fuglsang, Force Technology, e-mail: kfu@force.dk

Ny serie klimakamre

Strenometers leverandør Aralab har lanceret en ny serie klimakamre, som har fået navnet Testa E.

Testa E temperatur- og fugtkamre tilbyder præcise, reproducerbare betingelser for klima- og temperaturtest og er velegnede til brug i mange industrier. Kamrene er i overensstemmelse med de internationale standarder og krav: EN, IEC, DIN, ISO, NP og UNE.

Alle kamrene anvender topavanceret teknologi til klimakontrol og har en række tidsbesparende funktioner med let konfigurerbare testprogrammer, der kan køre, starte og stoppe automatisk.

Indvendigt sikrer et aerodynamisk design ensartede klimatiske forhold, og alt interiør, der blandt andet består af højdejusterbare, aftagelige hylder, er fremstillet af højresistent stål, som giver maksimal holdbarhed og nem rengøring. Såvel konstruktion som kølesystem er ikke-forurenende.

Testa E-serien består af disse modeller:

- Testa E Mini: En lille bordmodel med en volumen på 35 liter.
- Testa E Kompakt: Et 60 liters prøvechamber.

- Testa E: Kamre med en testvolumen fra 100-2.400 liter.
- Testa E 120 TS: Et todelt klimakammer som kan teste ved høj temperatur, ved lav temperatur, ved temperaturændringer og ved varmechok. Prøveemnet kan, via en kurv der kører det op og ned mellem to temperaturzoner, nemt og hurtigt eksponeres forskellige temperaturer.

Yderligere information:
Strenometer ApS
Tlf. 45 95 07 00
salg@strenometer.dk



Meget mere kemi?

Dansk Kemi



Følg Dansk Kemi på Facebook



eller på Instagram

/dansk kemi.dk - @dansk kemi



Python for Chemometricians

The course is intended for chemometricians who want to learn about Python, either to make a transition from MATLAB to Python or simply to add another tool to the toolbox.

10. maj 2022, København

Læs mere: www.ida.dk/arrangementer/344222.



Jagten på enzymer til at omdanne CO₂

Hør om enzymeres evne til at omdanne CO₂ i luften til myresyre ved hjælp af enzymer, som konverterer myresyren til metanol. Det er et gennembrud at finde de CO₂-omsættende enzymer og producere dem i en produktionsorganisme.

11. maj 2022, København

Læs mere: www.ida.dk/arrangementer/344084.



We support Environmental Applications

Whether its the air we breathe, toxic metals in our soil, organic pollutants in food or microplastics and macronutrient analysis. Our solutions cover the full spectrum of environmental applications.



Earth: Soil Analysis

Assess important soil parameters like organic, inorganic, and total carbon; total nitrogen; pH and cation exchange capacity; clay, silt and sand content; water holding capacity and more.



Water: Microplastics

Evaluate the contamination of water, air, and soil with microplastics. Our solutions provide reliable chemical data on particle identity, size distribution, shape and many more at a mouseclick.



Atmosphere: Air Quality

We offer the quantification of greenhouse gases in the atmosphere, determination of silica dust in a workplace environment or analysis of exhaust gases from car engines and much more.

Contact us for more details:

www.bruker.com/optics • info.bopt.nordic@bruker.com