

Dansk Kemi

Nummer 5 - Oktober 2026 / 107. årgang

Kemisk Forening - Kemiingeniørgruppen

Fra kvantekemi til AI

Fra elastik til batteri

Rustbeskyttende maling til barske maritime forhold

Beskyttelse af unikke idéer

Plougmann Vingtoft er et prisvindende konsulentfirma, der har specialiseret sig i håndtering, beskyttelse og kommercialisering af IPR - patenter, varemærker og designs.



Scan QR-koden
og læs mere på
www.pv.dk

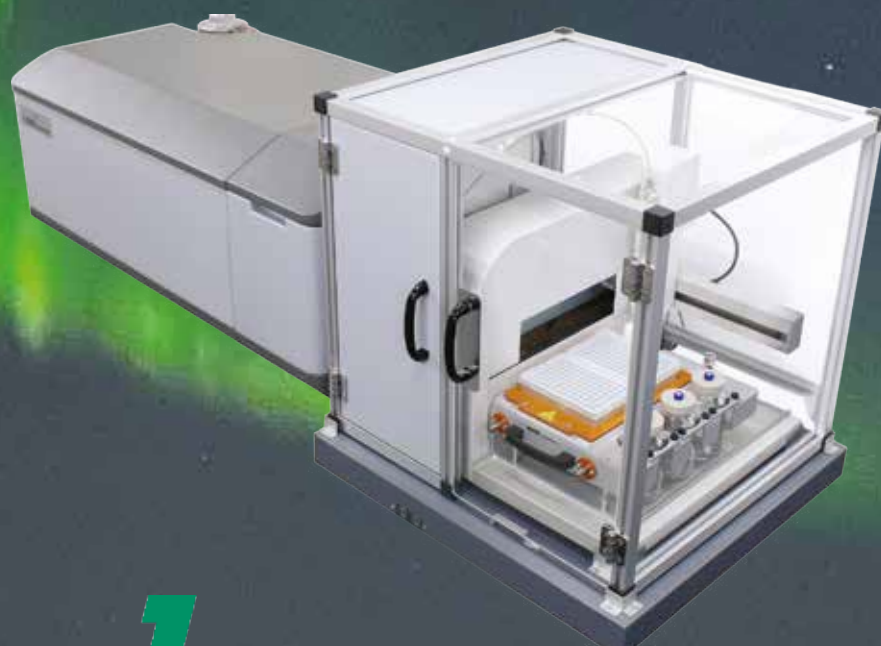
PLOUGMANN
VINGTOFT®



Intelligent Chemistry Biolab A/S Automation Specialist

JASCO Circular Dichroism HTCD Plus High-Throughput Circular Dichroism

For scientists in pharmaceutical, process- and biotechnology, and food chemistry labs who need reproducible, automated measurements and reliable structural analysis software, the high-throughput circular dichroism (HTCD) system eliminates human error and bias in measurement acquisition and biomolecular characterization.

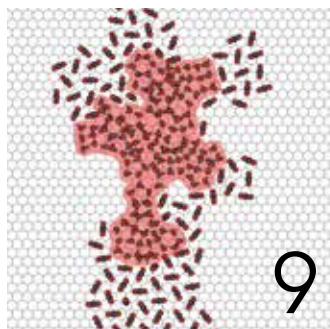


JASCO

The only limitation is your imagination



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



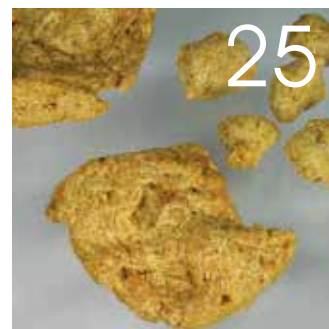
9



18



22



25

1 Forside
3D-profilometri af rustunderkryb omkring en ridse i en malet overflade. Foto: Ziyou Li.
Læs artiklen på side 28.

6 Fra elastik til batteri
Kan princippet bag en almindelig elastik løse udfordringen med at lagre energi?

9 Fra kvantekemi til AI
Kvantekemi gav os evnen til at forstå kemiske processer på atomart niveau. AI gør det nu muligt at anvende denne forståelse på realistiske og komplekse systemer.

12 Jagten på bæredygtige fotoaktive materialer
Hvordan kan nogle af jordskorpens mest almindelige metaller omdanne lys til kemisk energi, og hvilke udfordringer skal løses, før de kan erstatte ruthenium og iridium i fremtidens lysdrevne teknologier?

18 Boganmeldelse af to bøger til gymnasieskolen
"I dybden med kemi" og "Klædt på til skriftlig kemi".

19 Biotin[6]uril – en makrocyclisk forbindelse
Læs om Biotin[6]uril – en makrocyclisk forbindelse, der vekselvirker med anioner.

22 Hvad skal kalken bruges til?
Kan 55 millioner år gammel vulkansk aske måske hjælpe med at gøre CO₂ til sten?

25 Hvordan får vi saftige plantebøffer?
En undersøgelse af hvordan pH og ionstyrke påvirker rehydrering af tekstureret vegetabilsk protein.

28 Evaluering af rustbeskyttende maling under barske maritime forhold
Ny viden og avanceret testning skal sikre mere holdbare og bæredygtige beskyttelsessystemer til fremtidens infrastruktur.

31 Boganmeldelse: "Universets byggeklodser"
Her gøres det periodiske system levende, forståeligt og relevant.

TechMedia

Gammel Strandvej 20
2990 Nivå
Telefon 43 24 26 28
www.techmedia.dk

Ledelse:
David Wall

Redaktion:
Katja Salomon Johansen
(ansvarshavende)
katja@techmedia.dk
Professor Søren Kiil
sk@kt.dtu.dk
Ph.d. Kristian B. Krogh
kbk@novonesis.com
Professor Henrik Skov
hsk@envs.au.dk

Redaktionskomité:
Professor, dr. scient. Mikael Bols (formand)
Professor Morten J. Bjerrum
(Kemisk Forening)
Lektor, ph.d. Peter Szabo
(Kemiingenørgruppen)
Lektor, civilingeniør, ph.d.
Merete Norsker Bergsøe
Vibeke Richter Foersom
(tidl. næstformand i Kemilærerforeningen)
Lektor ved Nærum Gymnasium
Chefkonsulent Helle Westphal
Senior Environmental Specialist,
Inge Margrethe Jensen
Fagkonsulent Mette Malmqvist
Lektor Knud Villy Christensen

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

Bladsekretær:
Heidi Thode
Tlf. 51 34 83 06, ht@techmedia.dk

Annoncer:
Tanja Wulff Dühring
Tlf. 51 34 83 66, twd@techmedia.dk

Annonceproduktion:
Maria Frausing
Tlf. 26 77 90 54, maria@techmedia.dk

Layout: Helle Hansen
Tryk: PE Offset A/S

Antal abonnenter: 3.600

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

Trykt på
miljøvenligt papir
med vegetabiliske
miljøfarver.



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

Læs bladet online:
www.dansk kemi.dk

Se også: www.kemifokus.dk

Eller find
Dansk Kemi på: 



Scan og hent Dansk Kemi
medieinformation 2026 her!
Scan med kameraet
på din smartphone.



Bedre analyser kræver klogere og mere proportionale beslutninger

Jo mere og jo bedre vi kan måle, desto vigtigere bliver det at skelne mellem målinger og risiko ”

Det er svært ikke at blive begejstret over de seneste fremskridt inden for analytisk kemi. Nye metoder baseret på såkaldt non-target screening gør det muligt at identificere hundredvis eller endda tusindvis af kemiske forbindelser i en enkelt vandprøve. Hvor vi tidligere har ledt efter de specifikke og kendte stoffer, vi var interesserede i som PFAS, pesticider eller lægemiddelrester, kan vi nu afdække langt større dele af det kemiske fingeraftryk i vores miljø. Forskere fra Københavns Universitet peger på, at vores drikkevand sandsynligvis indeholder mange flere miljøfremmede stoffer end de få hundrede, der i dag indgår i de traditionelle analyseprogrammer. Mere viden er godt, men hvad gør vi med den nye viden?

De nye analysemetoder afslører stoffer, som tidligere har været usynlige. PFAS er et oplagt eksempel. Men med muligheden for at måle stadig mindre koncentrationer og identificere stadig flere stoffer, opstår der en risiko for, at vi forveksler tilstedeværelsen med risiko for miljø og sundhed.

At et stof kan måles, er ikke det samme som, at det udgør et miljøproblem. Og at et stof kan spores i meget lave koncentrationer, er ikke nødvendigvis et argument for, at det skal fjernes. Forsigtighedsprincippet kan begrunde handling, når der er en plausibel risiko, men væsentlig videnskabelig usikkerhed. Det bør imidlertid ikke føre til, at enhver målbar forekomst automatisk behandles som en uacceptabel risiko. Her bliver den politiske debat vanskelig. For når vi kan identificere flere problematiske stoffer med de nye analysemetoder, vil vi også identificere mange stoffer, som vi ikke nødvendigvis kender betydningen af – og for mange stoffer formentlig også i koncentrationer langt under niveauet, hvor de kan forventes at have en effekt. Derfor bliver det afgørende at holde fast i principperne for risikovurdering. En politisk fastsat grænseværdi er ikke det samme som et videnskabeligt fastlagt niveau, hvor der forventes effekter i miljøet. Hvis debatten reduceres til et spørgsmål om, hvorvidt et stof kan måles eller ej, risikerer vi at miste proportionerne.

Diskussionen er lige nu aktuel i forbindelse med det reviderede byspildevandsdirektiv. Her skal et nyt fjerde rensetrin på spildevandsanlæggene reducere udledningen af mange miljøfremmede stoffer, og regningen for rensningen skal primært finansieres gennem producentansvaret for lægemidler og kosmetik. Samtidig vil rensningen med de tilgængelige rensningsmetoder ikke kun fjerne disse stoffer, men også en lang række andre stoffer fra helt andre kilder. Det understreger behovet for et solidt datagrundlag og en åben diskussion af, hvordan omkostninger og gevinster fordeles.

Ingen ønsker flere miljøfremmede stoffer i naturen. Men hvis målsætningen bliver at rense for alt ned til detektionsgrænsen, løber regningen hurtigt fra miljøgevinsten.

Den teknologiske udvikling giver os et langt bedre billede af den kemiske virkelighed. Det bør vi glæde os over. Men jo mere detaljeret billedet bliver, desto vigtigere bliver det at skelne mellem videnskabelige observationer og politiske prioriteringer.

Kemianalyserne kan vise, hvad der findes. Vi mangler en seriøs politisk diskussion af, hvad der skal handles på.

Helle Westphal, Dansk Industri



Fleksibilitet og præcision i et kompakt design.
IONIC er den første titrator med indbygget forbindelse til skyen!

Oplev vores helt nye **IONIC Titrator** og **OMNIS IC!**

Tilpas og opskalér efter behov
Kombinér med titrering, automatisering og NIR spektroskopi



Fra elastik til batteri

Princippet bag en almindelig elastik kan måske hjælpe med at løse en af den grønne omstillings største udfordringer: Lagring af energi.

Af Agnete Jenfort, Frederikke Bahrt Madsen og Anne Ladegaard Skov, Dansk Polymer Center (DPC), Kemiteknik, Danmarks Tekniske Universitet

Når en elastik strækkes, lagrer den energi, som senere kan frigives igen. Det samme princip udnyttes i gummibatterier, der kan bidrage til at lagre energi fra vedvarende energikilder. Her beskrives teknologien bag gummibatterier og udviklingen af nye silikonebaserede materialer med høj energilagringskapacitet.

Fra elastik til batteri

En elastik kan fungere som et batteri. Når vi bruger elastikker i hverdagen, for eksempel til at sætte håret op eller holde låget på en madbeholder, strækker vi dem og giver dem energi. Denne energi lagres i elastikken, indtil den frigøres igen. I den periode fungerer elastikken derfor som et lille batteri. Når elastikken slippes, frigives den lagrede energi, som kan omsættes til andre energiformer, herunder elektrisk energi.

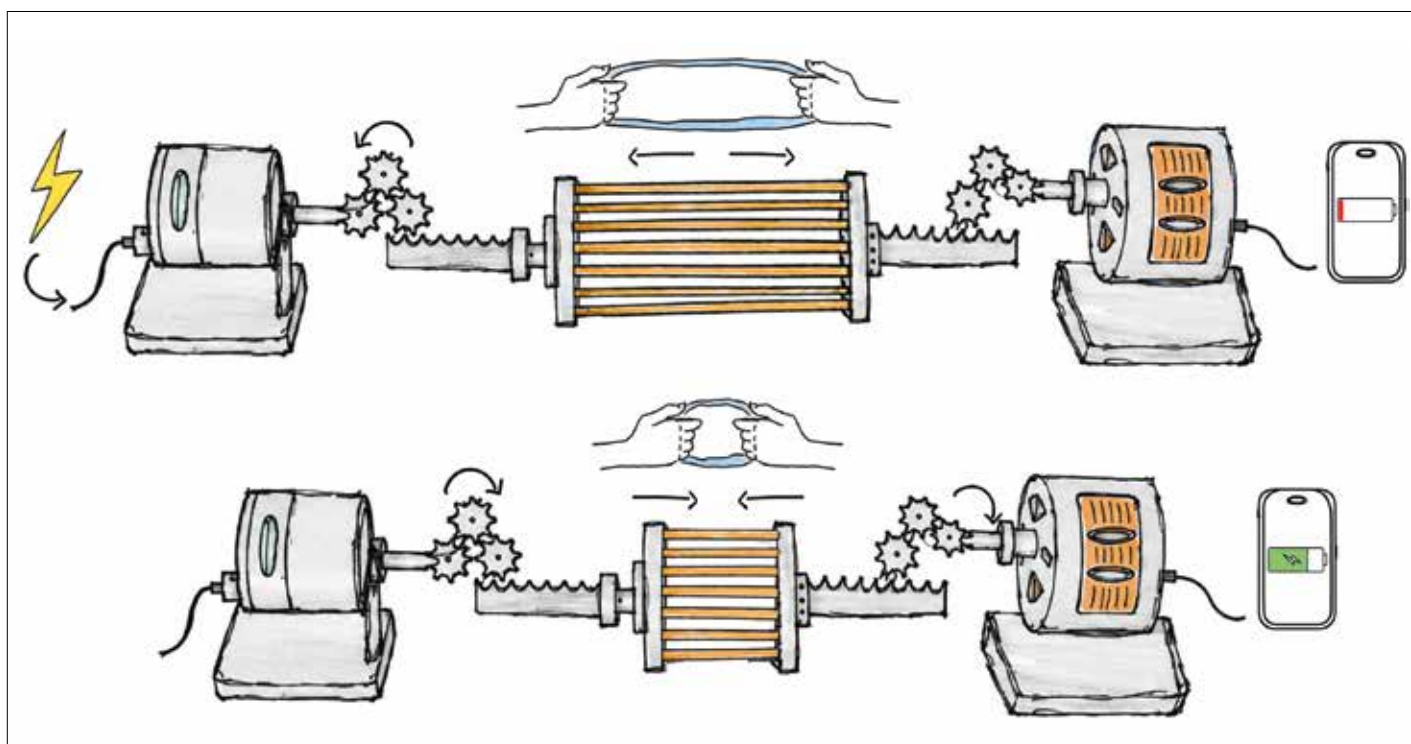
Selvom energimængden i en almindelig elastik er begrænset, illustrerer eksemplet et vigtigt princip: energi kan lagres og frigives efter behov. Netop lagring af energi er en af de store udfordringer i den grønne omstilling. Behovet for energi stiger, samtidig med at grønne energiformer vinder frem, hvilket er positivt for klimaregnskabet. Et problem opstår dog, fordi

energiefterspørgslen er relativ konstant, men produktionen fra vedvarende energikilder varierer. På dage uden vind og sol kan produktionen være lav, mens den på blæsende og solrige dage kan overstige forbruget.

En mulig løsning er derfor at lagre den overskydende energi fra perioder med høj produktion og bruge den senere, når produktionen ikke kan følge med efterspørgslen. Dette kræver store energilagere eller store batterier. Eksisterende litium-ionbatterier er forbundet med udfordringer, blandt andet brandrisiko og afhængighed af kritiske råmaterialer [1]. På DTU's Dansk Polymer Center (DPC) arbejder vi derfor med en ny type batterier, der lagrer energi mekanisk – modsat litium-ionbatterier, som lagrer energi kemisk. Disse nye batterier kaldes gummibatterier.

Gummibatterier udnytter den potentielle energi, der opstår, når en elastik strækkes. Princippet er meget simpelt. En elastik strækkes og fungerer som et batteri, indtil strækket slippes og energien bliver omdannet til elektrisk energi via en motor og en generator. På den måde kan overskydende grøn energi bruges til at strække elastikken og dermed gemme energien, indtil den skal bruges senere. En illustration af gummibatteriet ses i figur 1.

Udfordringen ved en sådan løsning ligger dog i valget af materiale til elastikken. Det skal have en høj strækbarhed og samtidig være stabilt og stærkt nok til at kunne holde et stræk over længere tid. Strækbarheden påvirker mængden af energi,



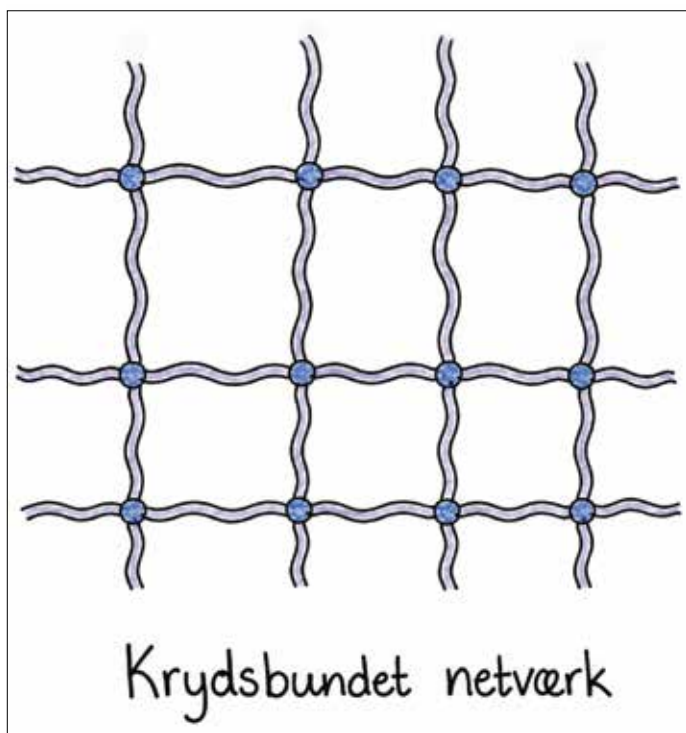
Figur 1. Princippet bag gummibatterier. Overskydende energi bruges til at strække de orange elastikker. Strækket holdes, og den mekaniske energi bevares, indtil elastikken slippes, og energien kan omdannes til elektrisk energi.

der kan lagres i materialet. Jo længere materialet kan strækkes, desto mere energi kan der lagres. Et materiale, der kan opfylde disse kriterier, er silikonegummi. På DPC arbejder vi derfor med at udvikle en ny type silikonegummi. Valget af silikone skyldes materialets særlige kombination af mekanisk og kemisk stabilitet, hvilket gør det velegnet til anvendelse i gummibatterier.

Silikone som fundament for gummibatterier

Silikone er et meget anvendt materiale i en lang række industrier. Modsat de fleste polymerer, som bliver sprøde i kulden og bløde i varmen, kan silikone opretholde sine mekaniske egenskaber, altså forblive fleksibel ved store udsving i temperatur, helt ned til -100°C og op til $+200^{\circ}\text{C}$.

Et klassisk gummi består af krydsbindingspunkter, hvor lange polymerkæder er kovalent bundet sammen. Således dannes et netværk, der fungerer som et stort molekyle, som vist i figur 2 [2]. Netværket kan strækkes op til 600 procent af sin oprindelige længde og har et energipotential på 53 mJ/g [3]. Energipotentialet beskriver, hvor meget energi materialet kan lagre ved stræk, og bestemmes som arealet under materialets strækkurve.

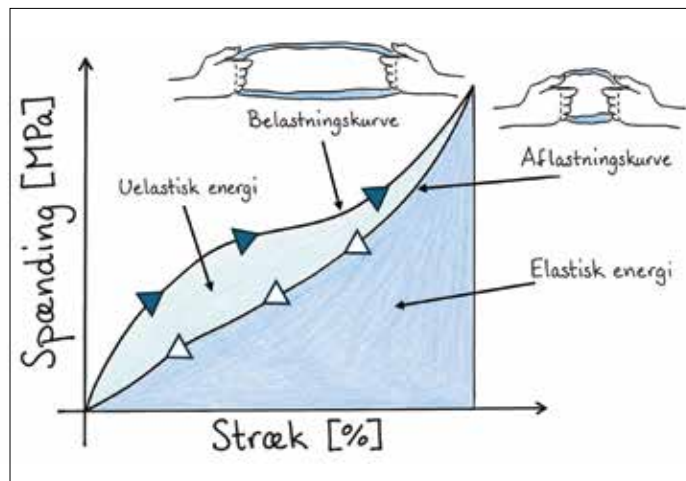


Figur 2. Silikonegummi med krydsbundet netværksstruktur. De lille kæder er silikonepolymerkæderne og de blå prikker er krydsbindingspunkterne.

Hvor meget energi kan lagres?

For at sammenligne nye typer silikonegummi er det nødvendigt at måle, hvor meget energi materialet kan lagre. Dette kan gøres med en stræktest, hvor materialet strækkes, mens den nødvendige kraft måles. Resultatet vises som en strækkurve, der ses i figur 3, hvor den lagrede energi svarer til arealet under kurven.

Når materialet aflastes, følger det ikke den samme kurve tilbage. En del af energien går tabt til irreversible processer, og den energi der kan lagres og senere udnyttes i et gummibatteri, svarer derfor til arealet under aflastningskurven [4].

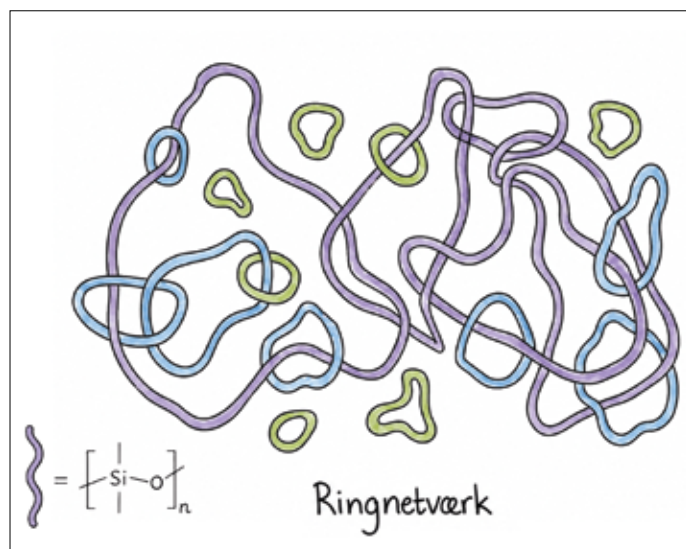


Figur 3. Illustration af resultatet af en stræktest. De farvede pile illustrerer belastningskurven, og de hvide pile illustrerer aflastningskurven, mens arealet under aflastningskurven svarer til mængden af energi, der lagres i materialet.

Ved optimering af materialet er målet at maksimere dette areal. Det kan opnås ved at gøre materialet mere strækbart, så kurven forlænges, eller stivere, så kurven bliver stejlere. For at opnå en høj energilagring er det ideelle materiale derfor både stift og meget strækbart. Det er to egenskaber, der kan være svære at kombinere.

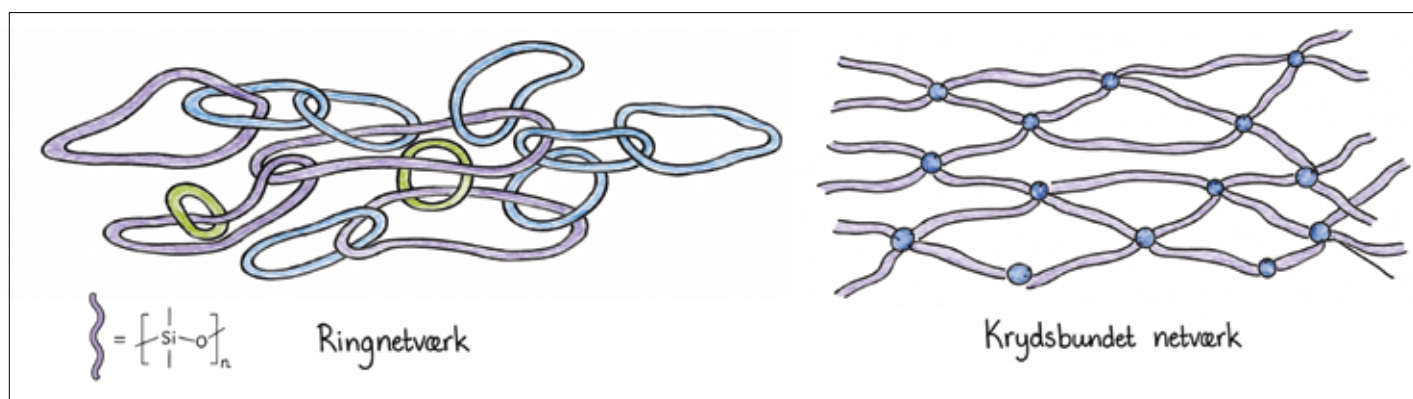
Ringnetværk

En innovativ måde at opnå den høje strækbarhed på er at opbygge silikonen i en ringstruktur og herfra danne et netværk. Forskellen på et krydsbundet netværk og et ringnetværk ligger i, hvordan de lange polymerkæder er bundet sammen, som illustreret i figur 4.

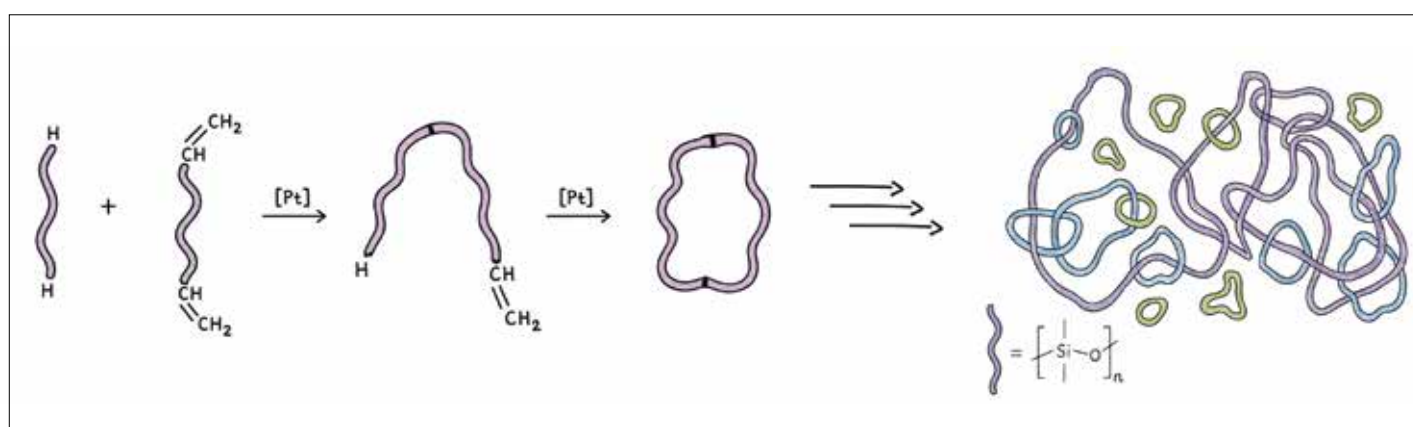


Figur 4. Struktur af silikonegummi, når det dannes som ringnetværk. Farverne på ringene skal tydeliggøre de forskellige ringstørrelser. De farvede kæder er silikonepolymerkæder.

I ringstrukturen findes der ingen krydsbindingspunkter, men i stedet er ringene kædet sammen på kryds og tværs. Dette gør silikonegummiet langt mere strækbart, idet ringene kan glide i forhold til hinanden. Det står i kontrast til klassiske krydsbindingspunkter, som danner en mere fast struktur, som kan begrænse strækbarheden, som vist i figur 5 på side 8 [5]. Med højere strækbarhed kan ringstrukturen opnå større areal under



Figur 5. Ringnetværk af silikonegummi (til venstre) og en klassisk krydsbundet silikonegummi (til højre), der begge strækkes.



Figur 6. Reaktion af polymerkæder til et ringnetværk med en platin (Pt) katalysator. Forskellige farver i ringnetværket viser ringenes forskellige størrelser [5].

strækkurven og dermed en højere energidensitet, der kan udnyttes i gummibatteriet.

Design af fremtidens gummi

Ringstrukturer kan laves på forskellige måder. Én måde involverer to polymerkæder med forskellige reaktive endegrupper. Først reagerer endegrupperne i den ene ende med hinanden, så der dannes en længere polymerkæde. Derefter reagerer de resterende endegrupper, så kæden lukker sig og danner en ring, som vist i figur 6. Reaktionen fortsætter, når flere kæder reagerer på samme måde. Undervejs bliver ringene viklet ind i hinanden og skaber en struktur i stil med en ringbrynje.

En mulighed for at øge elasticiteten ligger i netværksdesignet, for eksempel ved at ændre molekyllægten af de to polymerer, der reagerer. En højere molekyllægt giver længere polymerkæder, hvilket fører til større ringe. De større ringe har større bevægelsesfrihed og kan lettere vikles ind i hinanden. Når materialet strækkes, kan kæderne derfor udfolde sig mere, før de bliver spændt. Dette øger dermed materialets strækbarhed.

Ulempen ved at anvende længere polymerkæder til dannelse af ringe er, at det bliver sværere for kædens to ender at finde hinanden. Jo længere kæden er, desto større er afstanden mellem enderne, og dermed falder sandsynligheden for, at kæden lukker sig og danner en ring. Derudover falder koncentrationen af aktive endegrupper med stigende kædelængde. Det handler derfor om at finde den optimale kædelængde for at opnå den højeste mulige strækbarhed [6].

Vejen mod praktiske gummibatterier

I udviklingen af materialer til gummibatterier undersøges strækbarhed og stivhed. Målet er at udvikle silikonegummi, der på udvalgte områder kan konkurrere med eller på sigt overgå litium-ionbatterier. I DPC arbejder vi med gummibatterier, der sigter mod en energidensitet på 460 kWh/ton, omtrent tre gange højere end litium-ionbatterier [7]. Gummibatterier repræsenterer dermed en lovende tilgang til lagring af energi fra vedvarende energikilder. Lykkes det at forbedre silikonegummiet yderligere, kan teknologien bidrage til energilagring uden brug af litium-ionbatterier og samtidig tilbyde en højere grad af brandsikkerhed.

E-mail:

Agnete Jenfort: agnthe@kt.dtu.dk

Anne Ladegaard Skov: al@kt.dtu.dk

Referencer

1. D. Wu, Fire, 2026, 9, 76, DOI: 10.3390/fire9020076.
2. P. Mazurek, S. Vudayagiri and A.L. Skov, Chem. Soc. Rev., 2019, 48, 1448–1464, DOI: 10.1039/C8CS00963E.
3. J. Vaicekauskaitė, P. Mazurek, S. Vudayagiri and A.L. Skov, J. Mater. Chem. C, 2020, 8, 273–1279, DOI: 10.1039/C9TC05072H.
4. C. Nedelcu, F.B. Madsen and A.L. Skov, Polym. Chem., 2026, 17, 1278–1290, DOI: 10.1039/D5PY01201E.
5. N.S. Frederiksen, L. Yu, D. Kizilkaya, et al., Commun. Mater., 2026, DOI: 10.1038/s43246-026-01256-0.
6. P. Hu, J. Madsen, Q. Huang and A. L. Skov, ACS Macro Lett., 2020, 9, 1458–1463, DOI: 10.1021/acsmacrolett.0c00635.
7. Epec Engineered Technologies, Battery Comparison of Energy Density – Cylindrical and Prismatic Cells, <https://www.epectec.com/batteries/cell-comparison.html> (tilgået 24. august 2026).

Fra kvantekemi til AI: Nye værktøjer til overfladekemi

Kvantekemi gav os evnen til at forstå kemiske processer på atomart niveau. AI gør det nu muligt at anvende denne forståelse på realistiske og komplekse systemer.

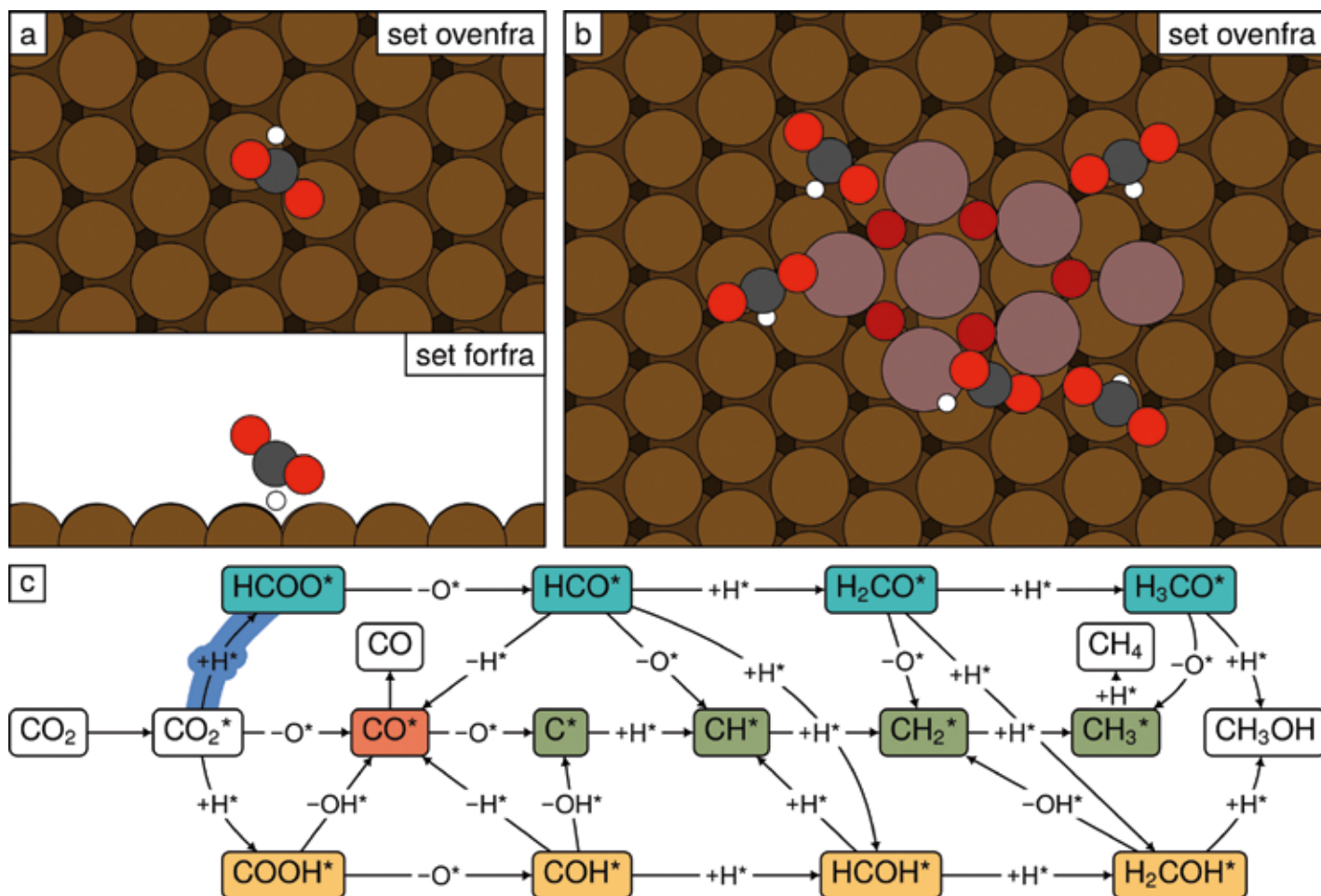
Af Mie Andersen, Marius Juul Nielsen og Luuk Kempen, Institut for Fysik og Astronomi, Aarhus Universitet

Forskning i, hvordan faste stoffers overflader kan katalysere kemiske reaktioner, går over 100 år tilbage. Et af de mest kendte eksempler er Fritz Haber og Carl Boschs udvikling af en jernbaseret katalysator til industriel produktion af ammo-

niak – et gennembrud, der førte til Nobelpriser i kemi i 1918 og 1931.

Fra 1990'erne blev det muligt at supplere laboratorieforsøg med computerberegninger. Fremskridt inden for kvantekemiske metoder, især tæthedsfunktionalteori (DFT), gjorde det muligt med høj nøjagtighed at beskrive molekylære processer som dannelse og brydning af kemiske bindinger.

En grundlæggende udfordring har imidlertid været, at DFT-



Figur 1. Reaktion mellem CO_2 og H på (a) simpel model af kobberbaseret materiale og (b) mere kompleks model af grænseflade mellem metal- og oxidkomponenter i et katalysatormateriale med mange forskellige typer reaktionssteder. (c) Reaktionsnetværk for konvertering af CO_2 til kemiske produkter som CO , CH_4 og CH_3OH .

Beregningsmetoder

Kvantemekanik

Kemiske reaktioner bestemmes af, hvordan elektroner og atomkerner vekselvirker. Kvantemekanikken giver i princippet mulighed for at beregne disse vekselvirkninger og dermed systemets energi. I praksis er beregningerne (via Schrödingerligningen, vist nedenfor) dog meget krævende, især når mange atomer og elektroner skal beskrives samtidig.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \Psi = E \Psi$$

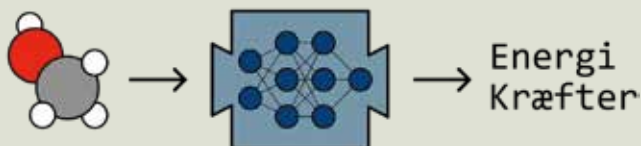


Tæthedsfunktionalteori (DFT)

DFT er en kvantekemisk metode, der gør det muligt at beregne energier og kræfter for systemer med mange atomer ved at bruge en simplere model for vekselvirkningerne mellem elektronerne. DFT bruges derfor ofte som reference, når man vil forstå kemiske reaktioner på atomart niveau.

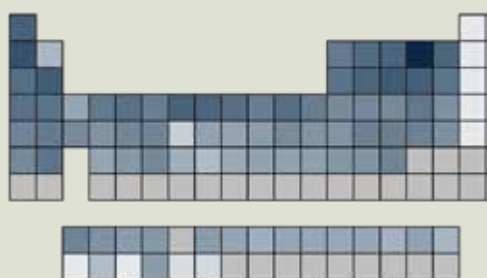
Maskinlæringspotentialer

Et maskinlæringspotential kan i stedet lære sammenhængen mellem atomernes placering og den energi og de kræfter, som en kvantekemisk beregning ville give. Dermed bliver det muligt at udføre beregninger for meget større systemer og over længere tidsskalaer end muligt med DFT.



Universelle maskinlæringspotentialer

Her tages skridtet videre. I stedet for at træne til ét bestemt materiale, trænes de på meget store datasæt, der dækker mange forskellige grundstoffer og kemiske strukturer. Målet er at få én model, der kan bruges på tværs af mange typer kemi.



beregninger kræver betydelige computerressourcer. Derfor har beregningsstudier af katalyse traditionelt været begrænset til stærkt forsimplede modeller af overflader og reaktionsmekanismer (figur 1a, side 9). Denne situation er nu ved at ændre sig markant. Nye AI-baserede metoder kan udføre beregninger med en hastighed, der tidligere var utænkelig, samtidig med at de bevarer en nøjagtighed tæt på DFT. Det åbner mulighed for at studere langt mere realistiske katalysatorer og kemiske processer end hidtil.

Maskinlæringspotentialer

En af de vigtigste udviklinger inden for AI-baserede beregningsmetoder er maskinlæringspotentialer baseret på neurale netværk [1]. På få år har de revolutioneret beregninger inden for katalyse og overfladekemi samt relaterede discipliner som biokemi og materialefysik. Et neuralt netværk består af mange forbundne enheder, kaldet neuroner. Man kan betragte det som en fleksibel matematisk model med et meget stort antal parametre, som automatisk tilpasses et datasæt under træningen.

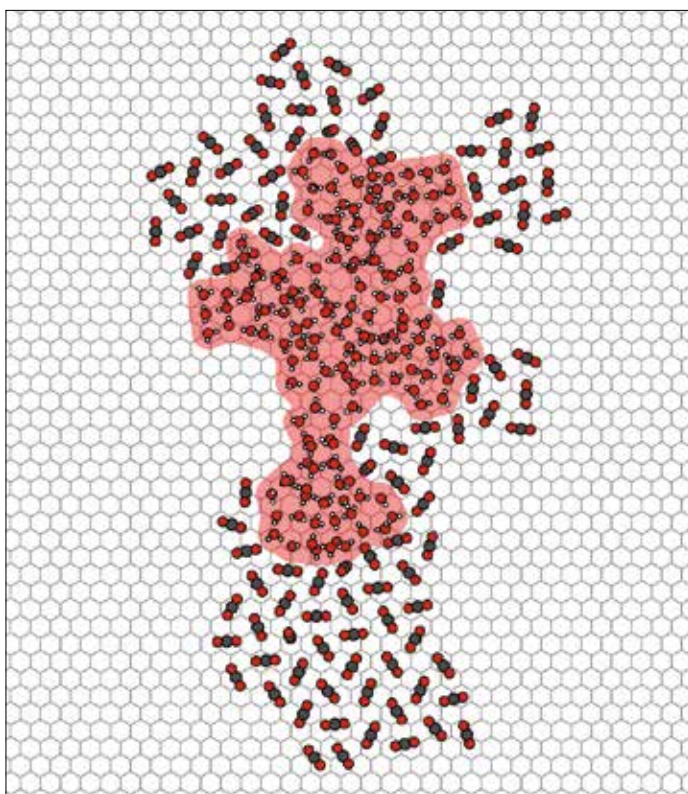
For maskinlæringspotentialer består træningsdata af atomare strukturer – for eksempel molekyler eller faste stoffer – samt deres energier og de kræfter, der virker på atomerne. Disse data beregnes med kvantekemiske metoder som DFT. Under træningen justeres modellens parametre, så den lærer sammenhængen mellem atomernes placering og systemets energi og kræfter. Når træningen er afsluttet, kan modellen effektivt forudsige energier og kræfter for nye atomare strukturer uden at skulle udføre en ny kvantekemisk beregning.

AI til katalyse

I vores forskning udvikler vi AI-baserede beregningsmetoder til at designe katalysatorer, der kan omdanne drivhusgassen CO₂ til værdifulde kemiske produkter som metanol. En central udfordring er, at realistiske katalysatorer er langt mere komplekse end de idealiserede modeller, der traditionelt anvendes i beregninger. De består ofte af flere materialer, for eksempel metaller og oxider, og de kemiske reaktioner kan følge mange forskellige reaktionsveje (figur 1b og c, side 9).

På en simpel metaloverflade, for eksempel kobber, findes kun få forskellige typer reaktionssteder (sites), hvor molekyler kan adsorbere og reagere. På en mere realistisk katalysator med både oxid- og metalkomponenter findes der derimod et stort antal ikke-ækvivalente sites, som alle kan have forskellige kemiske egenskaber. For at forstå katalysatoren må man derfor undersøge reaktioner på mange forskellige sites på overfladen, hvilket hurtigt fører til et meget stort antal nødvendige beregninger.

I et nyligt studie udviklede vi et maskinlæringspotential, der kan forudsige reaktionsbarrierer på tværs af de mange forskellige sites på oxidpartikler understøttet af en metaloverflade [2]. Modellen gør det muligt at beregne reaktionsbarrierer med en nøjagtighed tæt på DFT, men til en brøkdel af beregningsomkostningerne. Dermed bliver det praktisk muligt systematisk at kortlægge, hvordan den lokale atomstruktur påvirker katalysatorens aktivitet, og hvilke egenskaber der gør bestemte steder mere aktive end andre.



Figur 2. Model af karbonbaseret støvkorn (her grafen – et enkelt lag af grafit) med is af H_2O og CO_2 , som er blandt de mest udbredte molekyler i gasskyer i rummet. Modellen er konstrueret ved brug af molekylodynamik-simuleringer drevet af et maskinlæringspotentialer.

Universelle maskinlæringspotentialer

En af de mest markante nyskabelser i de senere år er fremkomsten af universelle maskinlæringspotentialer. Hvor traditionelle maskinlæringspotentialer ofte udvikles til ét specifikt materiale eller problem, forsøger universelle modeller at lære generelle mønstre på tværs af hele det kemiske rum [3].

Udviklingen kan sammenlignes med den rolle, som ChatGPT og andre large language models (LLM'er) har fået inden for tekstbehandling. LLM'er trænes på enorme tekstmængder og kan derfor generere meningsfuld tekst om næsten ethvert emne. På samme måde trænes universelle maskinlæringspotentialer på store mængder kvantekemiske data, så de kan forudsige energier og kræfter for mange forskellige kemiske strukturer – fra små molekyler og krystaller til kemiske reaktioner i gasfasen eller på overflader.

Ligesom LLM'er er de universelle modeller dog ikke fejlfrie. Som vi har vist i et nyligt studie [4], kan de give upræcise resultater for katalytiske systemer, der ligger uden for de typer af strukturer, de er trænet på, eller for særligt vanskelige kemiske problemstillinger. Alligevel udvikler feltet sig med en bemærkelsesværdig hastighed. Nye modeller offentliggøres hver måned og opnår stadig højere nøjagtighed og bedre evne til at generalisere til nye kemiske systemer. Udviklingen drives ikke alene af universiteter og forskningsinstitutioner; også store teknologivirksomheder som Google, Microsoft og Meta investerer betydelige ressourcer i at udvikle næste generation af universelle maskinlæringspotentialer.

Selv om de universelle modeller endnu ikke generelt kan beregne reaktionsbarrierer med samme nøjagtighed som kvantekemiske metoder, udgør de allerede et stærkt udgangspunkt.

Ved at videretræne modellerne på et relativt lille, systemspecifikt datasæt kan deres nøjagtighed forbedres betydeligt [5]. I et nyligt samarbejde med forskere fra Carnegie Mellon University har vi udviklet en metode til netop denne type finjustering for overfladereaktioner, som gør det muligt at opnå DFT-lignende nøjagtighed med beskedne computerressourcer [6].

Yderligere perspektiver

Maskinlæringspotentialer er på få år blevet et centralt værktøj inden for atomistisk modellering og anvendes i dag i forskning inden for kemi, materialefysik, biokemi, geovidenskab og astrokemi. I vores forskning anvender vi dem også til at undersøge, hvordan molekyler som H_2O , CO_2 og CO binder til mikroskopiske støvkorns overflader og danner is i det interstellare rum (figur 2) [7]. Disse isdækkede støvkorn fungerer som reaktionssteder, hvor komplekse organiske molekyler kan dannes. Nogle af disse, for eksempel sukkerstoffer [8], kan have været blandt byggestenene i den præbiotiske kemi, der gik forud for livets opståen. Med AI-baserede beregningsmetoder kan vi nu studere disse processer med en hidtil uset detaljeringsgrad og dermed opnå en bedre forståelse af kemien i støv- og gasskyer, hvor nye stjerner og planeter dannes.

Udviklingen af maskinlæringspotentialer går i øjeblikket meget hurtigt. Sammen med stadig kraftigere AI-modeller tegner det et billede af en fremtid, hvor beregninger, der tidligere var urealistiske, bliver rutine. Det åbner nye muligheder for at forstå og designe materialer og kemiske processer – fra katalysatorer til den kemi, der finder sted mellem stjernerne.

E-mail:

Mie Andersen: mie@phys.au.dk

Litteratur

- Behler, J. and M. Parrinello, Generalized Neural-Network Representation of High-Dimensional Potential-Energy Surfaces. *Physical Review Letters*, 2007. 98(14): p. 146401.
- Kempen, L.H.E., M.J. Nielsen, and M. Andersen, Breaking Scaling Relations with Inverse Catalysts: A Machine Learning Exploration of Trends in CO_2 -to-Formate Energy Barriers. *ACS Catalysis*, 2025. 15(21): p. 17635–17644.
- Chen, C. and S.P. Ong, A universal graph deep learning interatomic potential for the periodic table. *Nature Computational Science*, 2022. 2(11): p. 718–728.
- Kempen, L.H.E., R. Cheula, and M. Andersen, How accurate are foundational machine learning interatomic potentials for heterogeneous catalysis? *The Journal of Chemical Physics*, 2026. 164(19).
- Focassio, B., L.P. M. Freitas, and G.R. Schleider, Performance Assessment of Universal Machine Learning Interatomic Potentials: Challenges and Directions for Materials' Surfaces. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2024. 17(9): p. 13111–13121.
- Cheula, R., M. Andersen, and J.R. Kitchin, Fine-tuning universal machine learning potentials for transition state search in surface catalysis. *npj Computational Materials*, 2026 (in press).
- Vaishnav, A., N.M. Mikkelsen, and M. Andersen, Machine Learning Exploration of Binding Energy Distributions of H_2O at Astrochemically Relevant Dust Grain Surfaces. *ACS Earth and Space Chemistry*, 2026. 10(5): p. 1380–1390.
- Jiménez-Serra, I., et al., Detection of a four-carbon sugar in interstellar space. *Nature Astronomy*, 2026 (in press).

Fra sjældne ædelmetaller
til jern og mangan:

Jagten på bæredygtige fotoaktive materialer

Hvordan kan nogle af jordskorpens mest almindelige metaller omdanne lys til kemisk energi, og hvilke udfordringer skal løses, før de kan erstatte ruthenium og iridium i fremtidens lysdrevne teknologier?

Af Anette S. Hansen og Christina Wegeberg,
Institut for Fysik, Kemi og Farmaci,
Syddansk Universitet

Den grønne omstilling kræver ikke blot nye energikilder, men også nye måder at producere kemikalier og brændstoffer på. Solen leverer enorme mængder energi til Jorden hver eneste dag, og derfor er der stor interesse for at udnytte lys direkte som drivkraft i kemiske processer. Sådanne lysdrevne processer kan blandt andet anvendes til produktion af brint, omdannelse af CO₂ til værdifulde kemikalier og bæredygtig organisk syntese (figur 1).

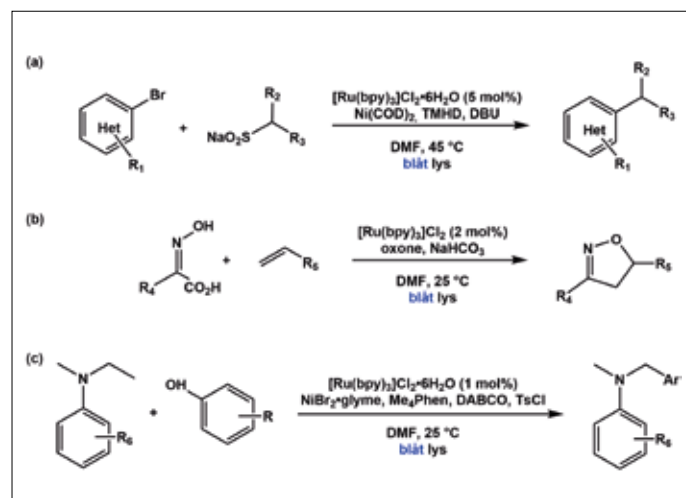
I centrum for mange af disse teknologier står fotoaktive molekyler, der absorberer lys og omsætter energien til kemisk aktivitet. Når et molekyle absorberer en foton, opnås et højere energiniveau for molekylet, som kan overføre energi eller elektroner til andre molekyler og dermed sætte en kemisk proces i gang. På denne måde kan lysenergi omdannes til kemisk energi.

De mest effektive fotoaktive molekyler, der er udviklet gennem de seneste årtier, er ofte baseret på ædelmetaller som ruthenium og iridium. Disse metaller har nærmest sat standarden for, hvad der er muligt inden for fotokemi. Men brugen af ædelmetallerne har også en væsentlig ulempe: de er sjældne og dyre, fordi der er begrænsede ressourcer til rådighed. Hvis lysdrevne teknologier skal implementeres i stor skala, er det derfor relevant at spørge, om nogle af Jordens mest almindelige metaller kan bruges i stedet?

Hvorfor er fotoaktive molekyler så vigtige?

Fotoaktive molekyler fungerer som bindeled mellem lys og kemi. Molekylet absorberer lys og bringes i en tilstand af højere energi, også kaldet en exciteret tilstand. Denne exciterede tilstand er ustabil, så den eksisterer kun i en begrænset periode, men hvis den lever længe nok, kan energien udnyttes til at drive en kemisk reaktion. For mange anvendelser er det afgørende, at den exciterede tilstand har den rette energi

og en tilstrækkelig lang levetid. Hvis den exciterede tilstand henfalder tilbage til grundtilstanden for hurtigt, går den absorberede energi tabt som varme, før den kan udføre nyttigt arbejde. Ruthenium- og iridiumkomplekser kombinerer netop effektiv lysabsorption med relativt langlivede exciterede tilstande og høj kemisk stabilitet, hvilket har gjort dem så succesfulde.



Figur 1. Det ruthenium-baserede kompleks [Ru(bpy)₃]Cl₂ (figur 3) bruges som fotokatalysator i reaktionstyper af stor betydning for life-science industrien, for eksempel i (a) krydskoblingsreaktioner [1], (b) dannelse af femleddet heterocykliske ringe [2], og (c) aktivering af C-H bindinger [3], der er vigtige i produktionen af lægemidler og agrokemikalier [4]. Hvis lys undlades i reaktionsbetingelserne, forløber reaktionerne ikke. Ar: aryl; DABCO: 1,4-diazabicyclo[2.2.2]oktan; DBU: 1,8-Diazabicyclo[5.4.0]undek-7-en; DMF: *N,N*-Dimethylformamid; Het: heterocyklisk enhed; Me₂Phen: 3,4,7,8-tetramethyl-1,10-phenanthrolin; NiBr₂·glyme: Dibromo(1,2-dimethoxyethane)nikkel(II); Ni(COD)₂: Bis(1,5-cyklooktadien)nikkel(0); TMHD: 1,1,6,6-tetramethylheptan-2,5-dion; TsCl: 4-toluensulfonfyl chlorid.

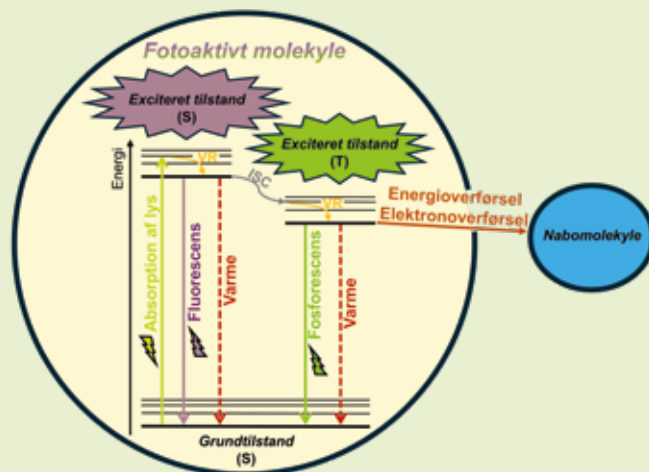
Hvad er en exciteret tilstand?

I et molekyle befinder elektronerne sig normalt i den laveste energitilstand, grundtilstanden. Når molekylet absorberer lys, kan en elektron flyttes til et højere energiniveau. Molekylet befinder sig nu i en exciteret tilstand.

Den exciterede tilstand er typisk kortlivet og vil hurtigt vende tilbage til grundtilstanden. Den ekstra energi kan blandt andet frigives som:

- lys (fluorescens eller fosforescens)
- varme
- energioverførsel til andre molekyler
- elektronoverførsel, som kan drive kemiske reaktioner.

For lysdrevne teknologier er de sidste to processer særligt interessante. Derfor er det et mål at udvikle materialer med exciterede tilstande, der lever længe nok til at kunne udføre nyttig kemi. Typisk vil det betyde levetider på hundredvis af nanosekunder.



Absorption af lys vil føre molekylet fra dets grundtilstand til en exciteret tilstand, hvorfra molekylet først vil frigive den ekstra energi ved vibrationel relaxation (VR). Herefter er der flere mulige veje, hvorved molekylet kan føres tilbage til grundtilstanden. Den absorberede lysenergi kan enten afgives som lys eller varme, eller det fotoaktive molekyle kan videregive den ekstra energi til et nabomolekyle i en energioverførsel eller elektronoverførsel, hvorved lysenergi kan omdannes til kemisk energi. Det fotoaktive molekyle kunne for eksempel være $[Ru(bpy)_3]^{2+}$, og nabomolekylet kunne for eksempel være en af reaktanterne i figur 1. For de elektroniske tilstande indikerer S og T hhv. spin multipliciteterne *singlet* og *triplet*. Ved hjælp af processen *intersystem crossing* (ISC) kan en *singlet* tilstand omdannes til en *triplet* tilstand.

Hvorfor udskifte ædelmetallerne med netop jern og mangan?

Jern og mangan er blandt de mest almindelige overgangsmetaller i jordskorpen. Sammenlignet med ruthenium og iridium er de langt mere tilgængelige og betydeligt billigere (tabel 1 på side 14) [5-7]. Derudover spiller begge metaller allerede vigtige roller i naturen. Jern findes i en lang række biologiske processer. For eksempel indgår det i proteinet hæmoglobin, som transporterer ilt fra lungerne til kroppens væv, mens mangan indgår som en central komponent i fotosyntesen, hvor planter, alger og cyanobakterier bruger lys til at spalte vand og producere ilt. Fra et bæredygtighedsperspektiv virker jern og mangan derfor som oplagte kandidater til fremtidens lysdrevne teknologier. Desværre er virkeligheden mere kompliceret.

Den store udfordring inden for moderne fotokemi er at kombinere de attraktive fotofysiske egenskaber fra ruthenium og iridium med den høje tilgængelighed og lave pris, som kendetegner jern og mangan. Mens ruthenium er omkring 100 gange mere almindeligt end iridium, er mangan og jern henholdsvis omkring en milliard og hundrede milliarder gange mere tilgængelige. Netop disse enorme forskelle motiverer udviklingen af fotoaktive komplekser baseret på metaller, der er langt mere tilgængelige.

En direkte erstatning af ædelmetallerne vanskeliggøres af, at de reaktive exciterede tilstande i jern- og manganbaserede komplekser har meget korte levetider og derfor hurtigt henfalder til grundtilstanden. Energien finder simpelthen alternative veje tilbage til grundtilstanden, før den kan bru-

drifton.dk

PRÆCISION TIL DIT LABORATORIUM



Find udstyr til analytisk kemi, prøveforberedelse og væskehåndtering, herunder pipetter, pipettespidser, rør, filtre, laboratorieglas, centrifuger og magnetomrørere. Og selvfølgelig vores brede udvalg af pumper, slanger og fittings til dosering og væskeoverførsel.

Se hele sortimentet på drifton.dk



Besøg drifton.dk, eller kontakt os på 3679 0000 eller info@drifton.dk

Metal	Relativ tilgængelighed (Iridium = 1)	Prisniveau	Fotokemiske egenskaber
Iridium	1	Meget høj	Blandt de mest effektive fotoaktive molekyler
Ruthenium	10^2	Høj	Veletableret standard i fotokemi
Mangan	10^9	Lav	Lovende kandidat inspireret af naturens fotosyntese
Jern	1011	Meget lav	Bæredygtigt alternativ, men med korte exciterede tilstande

Tabel 1. Tilgængelighed og lavere prisniveau for jern og mangan motiverer brugen af disse til lysaktiverede anvendelser [5-7], men de fotokemiske egenskaber for komplekser med disse overgangsmetaller halter gevaldigt efter komplekser baseret på iridium og ruthenium.

Tidsskala	Tid i sekunder	Typiske lys-relaterede processer
1 ms	10^{-3} s	Fosforescens
1 μ s	10^{-6} s	Fosforescens, langlivede exciterede tilstande
1 ns	10^{-9} s	Fluorescens
1 ps	10^{-12} s	Elektronoverførsel, energioverførsel, strukturel relaxation
1 fs	10^{-15} s	Elektronbevægelse, vibrationer og de første molekylære omorganiseringer

Tabel 2. Oversigt over tidsskalaer og processer relevante for lysaktiverede processer.

ges til kemiske processer. Udfordringen bliver derfor at forstå præcis, hvordan energien bevæger sig gennem molekylet, og hvordan energitabet kan bremses ved at optimere molekylets struktur.

At forstå processerne bag lysets energi

For at forbedre fotoaktiviteten af jern- og manganbaserede komplekser er det nødvendigt at forstå, hvad der sker i de før-

ste øjeblikke efter lysabsorption. Disse processer foregår på ekstremt korte tidsskalaer (tabel 2). Elektroner omorganiseres ofte på få picosekunder eller endnu hurtigere. Molekylets egenskaber afgøres derfor af begivenheder, som finder sted, længe før traditionelle måleteknikker kan nå at registrere dem.

Derfor er det nødvendigt at anvende ultrahurtige spektroskopiske teknikker som transient absorption spektroskopi,



Figur 2. a) En opløsningsprøve i en 0,1 cm kvarts kuvette indsættes i strålegangen i vores transient absorption setup på Syddansk Universitet, hvorefter overlappet mellem excitationsstrålen (pump-pulsen) og det hvide lys (probe-pulsen) i både tid og sted skal optimeres manuelt. b) En prøve exciteres af blåt lys (pump-pulsen) og udsender som resultat orange fluorescens. Probe-pulsen kan ikke ses på billedet, da den har en meget svagere intensitet end den blå excitationsstråle.

der kan følge molekylernes udvikling på netop disse korte tidsskalaer (figur 2). Ved at følge ændringerne i molekylets absorptionsspektrum efter excitation med en ultrakort laserpuls kan vi observere de exciterede tilstandes udvikling i realtid. På den måde bliver det muligt at identificere de mekanismer, som enten favoriserer eller begrænser den ønskede fotokemi. Denne viden er afgørende, når nye overgangsmetalkomplekser skal designes. På transient absorption setuppet på Syddansk Universitet, kan vi måle levetider fra 0,5 ps op til 0,5 ms, dvs. levetider der spænder over ni størrelsesordener.

Molekylært design som nøglen

Selvom jern og mangan er attraktive alternativer til ruthenium og iridium ud fra et bæredygtighedsperspektiv, har de fotokemiske egenskaber for komplekser af disse metaller traditionelt været utilstrækkelige. De ønskede exciterede tilstande henfalder ofte meget hurtigt, hvilket begrænser deres anvendelse i lysdrevne processer. I mange år blev dette betragtet som en grundlæggende begrænsning ved brugen af let tilgængelige overgangsmetaller. Men forskning gennem de seneste årtier har vist, at et metals fotofysiske egenskaber ikke alene bestemmes af ►

■ Sådan følger vi lysets vej gennem et molekyle

Når et molekyle exciteres, sker de efterfølgende processer ekstremt hurtigt, ofte på tidsskalaer fra femtosekunder til mikrosekunder. For at forstå, hvordan lysenergien omdannes til kemisk energi, er det nødvendigt at kunne følge disse processer i realtid.

Vi anvender den optiske målemetode transient absorption spektroskopi til dette formål. Metoden anvender princippet om *pump-probe*-teknikken og bruges til at følge, hvordan et molekyles absorption ændrer sig over tid efter excitation. Først exciteres prøven med en kort laserpuls (*pump*), der har én bestemt farve, hvorefter en anden lyspuls (*probe*) bestående af hvidt lys (dvs. alle farver) sendes igennem prøven for at måle absorptionen af den exciterede tilstand. Ved at ændre på timingen mellem hvornår *probe*-pulsens kommer i forhold til *pump*-pulsens introduceres et tidsafhængigt aspekt i målingen, og man kan derved måle udviklingen af exciterede tilstande over tid. Forskellige typer af exciterede tilstande har forskellige absorptionsegenskaber, og derfor giver teknikken mulighed for at:

- identificere kortlivede exciterede tilstande
- følge elektronoverførsel mellem molekyler
- observere energioverførsel og ladningsseparation
- bestemme levetider for reaktive mellemprodukter
- afdække, hvorfor et fotokemisk system fungerer eller mister energi.

Ved hjælp af transient absorption spektroskopi kan vi derfor følge de første trin i lysdrevne processer og dermed opnå indsigt, som er afgørende for udviklingen af nye luminescerende forbindelser, fotokatalysatorer og fotoaktive materialer til bæredygtige energiteknologier.

Præcis vakuum-teknologi til dine mest krævende opgaver

Oplev vores innovative HiCube Neo-serie

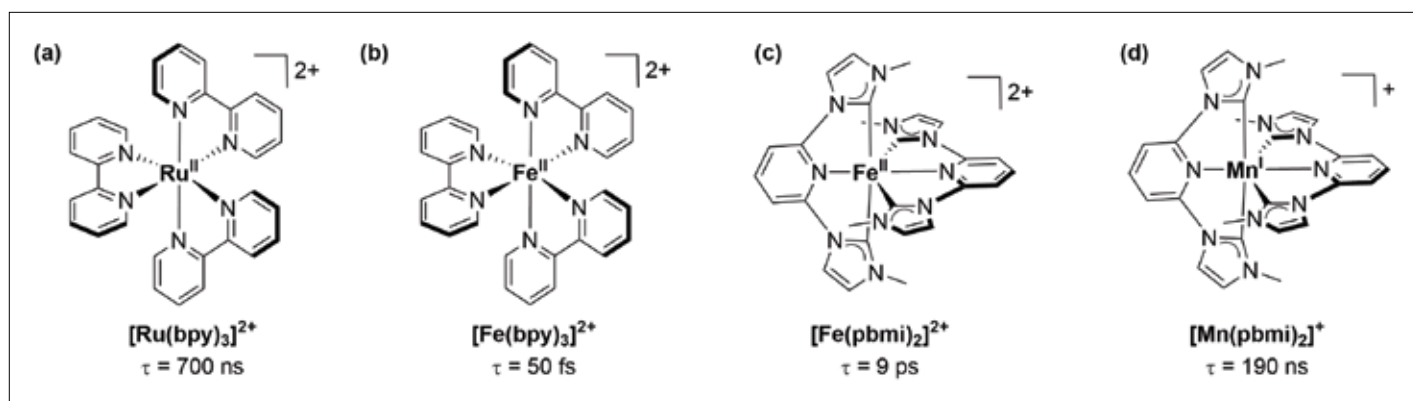
HiCube Neo-serien er udviklet til dig, der kræver pålideligt højvakuum – hver gang. Med en kombination af avancerede turbomolekylære pumper og effektive forpumper (tør eller oliesmurt) opnår du vakuumniveauer helt ned til 10^{-10} hPa (mbar). Den intuitive betjening, modulopbyggede konstruktion og det lave energiforbrug giver dig en fleksibel og brugervenlig løsning til fx restgasanalyse, vakuumovne og andre avancerede applikationer.

www.pfeiffervacuum.com



Part of the **BUSCH GROUP**

PFEIFFER
VACUUM+FAB SOLUTIONS



Figur 3. Udviklingen af exciterede tilstandslevetider gennem molekylært design af fire overgangsmetalkomplekser. Den exciterede levetid er angivet ved det græske bogstav tau, τ . Direkte udskiftning af ruthenium med jern i bipyridinbaserede komplekser fører til meget korte levetider, men introduktion af carben-ligander giver markante forbedringer for både jern- og manganbaserede systemer [13,17]. bpy = 2,2'-bipyridin; pbmi = (pyridin-2,6-diyl)bis(3-methylimidazol-2-yliden).

selve metalionen. De ligander, der omgiver metallet, spiller en afgørende rolle for molekylets elektroniske struktur og dermed for dets evne til at lagre og omsætte lysenergi [8,9].

Et illustrativt eksempel ses i figur 3. Det klassiske fotoaktive kompleks $[\text{Ru}(\text{bpy})_3]^{2+}$, der består af et ruthenium(II) center omgivet af tre polypyridin ligander, har en exciteret tilstand med en levetid på omkring 700 ns og har derfor længe fungeret som en slags "guldstandard" inden for molekylær fotokemi [10]. Hvis ruthenium erstattes direkte med jern i det tilsvarende kompleks $[\text{Fe}(\text{bpy})_3]^{2+}$, falder levetiden imidlertid til blot 50 fs [11,12], dvs. at denne simple udskiftning af metallet får levetiden til at blive 10 millioner gange kortere. Energien tabes derved så hurtigt, at jernkomplekset kun i et meget begrænset omfang kan udnyttes til fotokemiske processer.

Et vigtigt gennembrud kom, da *N*-heterocykliske carbener blev introduceret i ligandstrukturen [13-16]. Carbenbaserede ligander ændrer energien af de elektroniske tilstande i komplekset favorabelt og kan dermed hæmme nogle af de processer, der ellers fører til hurtig deaktivering. Som vist i figur 3 øges levetiden (τ) i et jernbaseret carbenkompleks, $[\text{Fe}(\text{pbmi})_2]^{2+}$, til omkring 9 ps [13] mere end to størrelsesordener længere end for det klassiske jern-bipyridinkompleks, $[\text{Fe}(\text{bpy})_3]^{2+}$.

Lignende strategier anvendes i dag også til manganbaserede systemer. De seneste forskningsresultater har vist, at mangankomplekser med carben-ligander kan opnå exciterede tilstandslevetider på op til 190 ns [17]. Det er en bemærkelsesværdig forbedring sammenlignet med tidligere generationer af fotoaktive komplekser baseret på let tilgængelige metaller og

demonstrerer den afgørende betydning af molekylært design.

Udviklingen i de exciterede tilstandes levetider har været afgørende for at bringe jern- og manganbaserede komplekser tættere på praktisk anvendelse. Levetiden er imidlertid kun én af flere egenskaber, der afgør, om et kompleks har fotokemisk potentiale. En anden væsentlig parameter er kompleksernes absorptionsegenskaber, da de skal overlappende med solens spektrum. Intensiteten af solens lys er stærkest i den del af det elektromagnetiske spektrum, som det menneskelige øje kan opfange (380-750 nm). For optimal udnyttelse af solens lys er det derfor vigtigt, at komplekserne har intense absorptionsegenskaber i dette område. Ved at ændre ligand-designet omkring metallet kan man altså optimere efter en ønsket lysabsorption. I praksis betyder dette, at de nye jern- og mangankomplekser skal have flotte farver (figur 4). Emissionsadfærd og sandsynligheden for de ønskede elektron- og energioverførsler spiller også en helt central rolle i at evaluere, om et nyt overgangsmetalkompleks har fotokemisk potentiale.

Sammenholdes tabel 3 med figur 3 tegner der sig et mere nuanceret billede af udviklingen inden for fotoaktive komplekser baseret på let tilgængelige metaller. Mangan-carbenkomplekset, $[\text{Mn}(\text{pbmi})_2]^+$, opnår en exciteret tilstandslevetid, der nærmer sig det klassiske $[\text{Ru}(\text{bpy})_3]^{2+}$ kompleks. Samtidig absorberer komplekset effektivt det synlige lys, dvs. ekstinktionskoefficienten er stor i det synlige spektrum. Til gengæld er emissionen meget svag, hvilket vidner om, at andre deaktiveringsveje dominerer den exciterede tilstands skæbne. Tilsvarende viser jern-carbenkomplekset en markant forbedring i forhold til det klassiske jern-bipyridinkompleks, men levetiden

Fotofysisk egenskab	$[\text{Ru}(\text{bpy})_3]^{2+}$	$[\text{Fe}(\text{bpy})_3]^{2+}$	$[\text{Fe}(\text{pbmi})_2]^{2+}$	$[\text{Mn}(\text{pbmi})_2]^+$
Levetid af exciteret tilstand [ns]	700	0.00005	0.009	190
Maksimal absorption i det synlige spektrum [nm]	450	525	460	505
Ekstinktionskoefficient, ϵ [$\text{M}^{-1} \text{cm}^{-1}$]	14500	8000	15000	23000
Emissionsmaksimum [nm]	600	Ingen emission	Ingen emission	1025
Emissionskvanteudbytte [%]	6	Ingen emission	Ingen emission	$< 10^{-3}$

Tabel 3. Sammenligning af fotofysiske egenskaber for komplekserne vist i figur 3 [10-13, 17]. Ekstinktionskoefficienten ϵ beskriver, hvor stærkt et kemisk stof absorberer lys ved en bestemt bølgelængde og har enheden $\text{L}/(\text{mol} \cdot \text{cm})$. Sammenhængen mellem absorbansen og ekstinktionskoefficienten er beskrevet ved Lambert-Beers lov: $\text{Abs} = c \cdot l \cdot \epsilon$, hvor c er koncentration af den kemiske forbindelse i mol/L og l er kuvettebredden i cm.



Figur 4. En række komplekser baseret på let tilgængelige metaller i opløsning. Kompleksernes farve bestemmes af sammenspiillet mellem metallet og liganderne, for eksempel er den gule opløsning $[\text{Fe}(\text{pbmi})_2]^{2+}$ og den røde opløsning et mangan-carben kompleks.

er fortsat flere størrelsesordener kortere end for både ruthenium- og mangankomplekserne.

Figur 3 og tabel 3 illustrerer derfor både de fremskridt, der er opnået gennem molekylært design, og hvorfor der stadig er behov for grundforskning inden for dette område. En lang exciteret tilstandslevetid alene er ikke tilstrækkelig til at skabe et effektivt fotoaktivt molekyle. Før jern- og manganbaserede systemer kan konkurrere med de etablerede rutheniumkomplekser, skal sammenhængen mellem struktur, exciterede tilstande og fotokemisk funktion forstås langt bedre.

Samtidig viser nyere forskningsresultater, at manganbaserede komplekser kan have egenskaber, som rækker ud over klassisk fotoaktivitet [17-20]. I vores egen forskning har vi eksempelvis for nyligt observeret, at lys kan fremkalde en ændring af mangankompleks spintilstand. Sådanne lysstyrede spin-skift er interessante i forbindelse med udviklingen af molekylære kontakter og responsive materialer [21]. Resultatet understreger også, at forskning fokuseret på brugen af let tilgængelige metaller ikke alene handler om at efterligne ruthenium- og iridiumkompleksernes egenskaber, men også om at udforske nye former for lysaktiverede funktioner.

Det er netop disse processer, vi forsøger at forstå ved hjælp af transient absorption spektroskopi. Ved at følge de exciterede tilstandes udvikling fra femtosekunder til mikrosekunder kan vi kortlægge de mekanismer, som enten fremmer eller begrænser den ønskede fotokemi. Denne viden er afgørende, hvis fremtidens bæredygtige fotoaktive materialer skal designes rationelt frem for at gætte på må og få.

Perspektiver for fremtidens bæredygtige teknologier

Der er stadig et stykke vej, før fotoaktive komplekser baseret på jern og mangan kan konkurrere direkte med de bedste systemer baseret på ruthenium og iridium. Men udviklingen går hurtigt. I dag er forskningen ikke længere alene drevet af ønsket om højere effektivitet. Bæredygtighed, råstofforsyning og skalerbarhed spiller en stadig større rolle. Hvis fremtidens energiteknologier skal implementeres globalt, bliver adgang til de nødvendige materialer afgørende.

Derfor er forskningen i jern og mangan mere end en jagt på nye fotoaktive komplekser. Den repræsenterer et forsøg på at udvikle teknologier, hvor både energikilden og materialerne er bæredygtige. Måske bliver fremtidens lysdrevne teknolo-

gier ikke baseret på sjældne ædelmetaller, men på nogle af de mest almindelige grundstoffer på vores planet. For at nå dertil skal vi forstå, hvad der sker i de første milliarddele af et sekund efter lysabsorption. Det er netop denne grundlæggende forståelse, der driver jagten på næste generation af bæredygtige fotoaktive materialer i vores laboratorium.

E-mail:

Christina Wegeberg: wegeberg@sdu.dk

Referencer

1. T. Knauber, R. Chandrasekaran, J.W. Tucker, J.M. Chen, M. Reese, D.A. Rankic, N. Sach and C. Helal, *Org. Lett.*, 2017, **19**, 6566–6569.
2. T.D. Svejstrup, W. Zawodny, J.J. Douglas, D. Bidgeli, N.S. Sheikh and D. Leonori, *Chem. Commun.*, 2016, **52**, 12302–12305.
3. Y.-Y. Gui, Z.-X. Wang, W.-J. Zhou, L.-L. Liao, L. Song, Z.-B. Yin, J. Li and D.-G. Yu, *Asian J. Org. Chem.*, 2018, **7**, 537–541.
4. L. Candish, K.D. Collins, G.C. Cook, J.J. Douglas, A. n. Gómez-Suárez, A. Jolit and S. Keess, *Chem. Rev.*, 2021, **122**, 2907–2980.
5. R.L. Rudnick and S. Gao, Elsevier, 2014, DOI: 10.1016/b978-0-08-095975-7.00301-6, pp. 1–51.
6. T.E. Graedel, E.M. Harper, N.T. Nassar, P. Nuss and B.K. Reck, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 2015, **112**, 4257–4262.
7. P. Dierks, Y. Vukadinovic and M. Bauer, *Inorg. Chem. Front.*, 2022, **9**, 206–220.
8. C. Wegeberg and O.S. Wenger, *JACS Au*, 2021, **1**, 1860–1876.
9. N. Sinha and O.S. Wenger, *J. Am. Chem. Soc.*, 2023, **145**, 4903–4920.
10. D.M. Arias-Rotondo and J.K. McCusker, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2018, DOI: 10.1002/9783527674145.ch1, pp. 1–24.
11. G. Auböck and M. Chergui, *Nat. Chem.*, 2015, **7**, 629–633.
12. J.E. Monat and J.K. McCusker, *J. Am. Chem. Soc.*, 2000, **122**, 4092–4097.
13. Y. Liu, T. Harlang, S.E. Canton, P. Chábera, K. Suárez-Alcántara, A. Fleckhaus, D.A. Vithanage, E. Göransson, A. Corani, R. Lomoth, V. Sundström and K. Wärnmark, *Chem. Commun.*, 2013, **49**, 6412–6414.
14. K.S. Kjær, N. Kaul, O. Prakash, P. Chábera, N.W. Rosemann, A. Honarfar, O. Gordivska, L.A. Fredin, K.-E. Bergquist, L. Häggström, T. Ericsson, L. Lindh, A. Yartsev, S. Styling, P. Huang, J. Uhlig, J. Bendix, D. Strand, V. Sundström, P. Persson, R. Lomoth and K. Wärnmark, *Science*, 2019, **363**, 249–253.
15. P. Chábera, Y. Liu, O. Prakash, E. Thyraug, A.E. Nahhas, A. Honarfar, S. Essén, L.A. Fredin, T.C.B. Harlang, K.S. Kjær, K. Handrup, F. Ericson, H. Tatsuno, K. Morgan, J. Schnadt, L. Häggström, T. Ericsson, A. Sobkowiak, S. Lidin, P. Huang, S. Styling, J. Uhlig, J. Bendix, R. Lomoth, V. Sundström, P. Persson and K. Wärnmark, *Nature*, 2017, **543**, 695–699.
16. P. Chábera, L. Lindh, N.W. Rosemann, O. Prakash, J. Uhlig, A. Yartsev, K. Wärnmark, V. Sundström and P. Persson, *Coord. Chem. Rev.*, 2021, **426**, 213517.
17. S. Kronenberger, R. Naumann, C. Förster, N.R. East, J. Klett and K. Heinze, *Nat. Commun.*, 2025, **16**, 7850.
18. P. Herr, C. Kerzig, C.B. Larsen, D. Häussinger and O.S. Wenger, *Nat. Chem.*, 2021, **13**, 956–962.
19. S. Kronenberger, R. Naumann, C. Förster, J. Klett, D. Schollmeyer, L.M. Carrella, E. Rentschler and K. Heinze, *Nat. Chem.*, 2026, DOI: 10.1038/s41557-026-02193-8.
20. N.R. East, R. Naumann, C. Förster, C. Ramanan, G. Diezemann and K. Heinze, *Nat. Chem.*, 2024, **16**, 827–834.
21. P. Gütllich, A.B. Gaspar and Y. Garcia, *Beilstein J. Org. Chem.*, 2013, **9**, 342–391.

"I dybden med kemi" og "Klædt på til skriftlig kemi"

I dybden med kemi af Lone Brun Jakobsen og *Klædt på til skriftlig kemi* af Lone Brun Jakobsen m.fl. Begge udgivelser på Nucleus Forlag ApS, 2026, 1. udgave, 1. oplag.

Anmeldt af Keld Nielsen

I dybden med kemi er en ny lærebog til gymnasieskolens kemiundervisning i det almene gymnasium (stx). Bogen er afslutningen på et lærebogssystem, som forlaget Nucleus har udgivet de senere år. De to tidligere udgivelser, *I gang med kemi* og *Videre med kemi*, dækker tilsammen kemi C- og B-niveauerne i stx, mens *I dybden med kemi* har fokus på de faglige kernestofområder, som er nye på kemi A sammenlignet med de to andre niveauer. Det gælder for eksempel IR- og ¹H-NMR-spektroskopi, kemisk termodynamik og reaktionskinetik. A-niveau bogen samler også op på relevante faglige områder, som er behandlet i de tidligere bøger, men som på A-niveau kræver yderligere fordybelse. *I dybden med kemi* er således sammenknyttet med lærebogssystemets to andre kemibøger, så bogen kan ikke bruges på kemi A uafhængigt af disse, medmindre der suppleres med andre materialer.

Opbygning og andre materialer

Forfatteren til *I dybden med kemi* har ikke været en del af forfatterteamet bag Nucleus' to andre kemilærebøger. Men lærebogssystemet har samlet set den samme opbygning. De enkelte kapitler har fokus på et bestemt fagligt område knyttet til kernestoffet, temaafsnit som for eksempel omhandler perspektivering af det gennemgåede faglige stof, eller uddybninger, som underviseren kan vælge som supplerende stof. Endvidere er der opgaver i de enkelte afsnit, og

kapitlerne afsluttes med en liste over vigtige emner og begreber, som eleverne skal have med.

De fleste kapitler kan dog læses uafhængigt af hinanden, så man som lærer ikke er bundet af bogens rækkefølge. I tilknytning til *I dybden med kemi* kan hentes yderligere materialer på nettet, for eksempel alle bogens figurer (en stor hjælp for underviseren) og arbejdsopgavesæt til de enkelte kapitler i bogen. Som selvstændig bog findes også en facitliste til opgaverne i *I dybden med kemi*.

I dybden med kemi sammenlignet med andre kemi A-lærebøger

I dybden med kemi repræsenterer ikke en ny og meget anderledes tilgang til kemi A's faglige indhold set i forhold til andre kemilærebogssystemer til gymnasiet. I de to forudgående Nucleus kemibøger er der en relativ stærk toning med biologiske anvendelser og eksempler. I *I dybden med kemi* er kobling til biologiske emner mindre fremtrædende. Det er forståeligt, da kemi A's læreplan er krævende at nå på et løftehold i 3.g, og fordi fødelinjen af elever til kemi A-hold typisk ikke kommer fra biologi A-kemi B studieretningen, men fra de andre naturvidenskabelige studieretninger i stx.

Selvom *I dybden med kemi* ikke i sin tilgang til kemi A viser en væsentlig nyskabelse i forhold til andre kemi A-lærebøger, så er behandlingen af kernestoffet i bogen generelt opdateret. Bogen er generelt velskrevet og rigt illustreret med figurer og eksempler på brugen af den kemiske teori, og er generelt holdt relativt stramt til det væsentligste (kernestoffet). Der er lagt vægt på, at eleverne skal kunne anvende de behandlede emner, for eksempel ved opgaveløsning.

Som anmelder er der ofte valg, som kan undre. For eksempel valget af et let opløseligt salt ved gennemgang af beregninger i opløselighedsberegning, den gennemgåede termodynamiske teori ikke fuldt udnyttes i det afsluttende tema om glycolysen eller den relativt store vægt på organiske reaktions-

mekanismer (plads til, at den enkelte lærer udvælger i forhold til sit hold). Men alt i alt er *I dybden med kemi* en gennemført afrunding af Nucleus' lærebogssystem til kemi i stx, så bogsystemet fremtræder som en helhed.

Klædt på til skriftlig kemi – et opslagsværk til kemi i stx og htx

Samtidig med kemi A-lærebogen *I dybden med kemi* har Nucleus Forlag også udsendt bogen *Klædt på til skriftlig kemi*. Der er ikke tale om en lærebog til kemi, men et opslagsværk, som især kan benyttes ved arbejdet med skriftlige opgaver i kemi A, som de kendes fra de afsluttende prøver i htx og stx. Bogen omtaler ikke kun teoretisk stof fra den gymnasiale kemiundervisning, men også relevante eksperimentelle metoder. Hvert faglige emne beskrives kort og uddybes med mange fine illustrationer. Afsnittene afsluttes også med en reference til "typeopgaver" fra de skriftlige prøver i kemi A, og hvordan man kan løse disse. Man kan mest betragte bogen som en blanding af en formelsamling og et kompendium over kernefaglige områder i gymnasieskolens kemiundervisning.

Klædt på til skriftlig kemi er ikke knyttet direkte til kemi A-lærebogen *I dybden med kemi*, men den kan også benyttes i forbindelse med andre kemilærebogssystemer. Forfatterne omtaler, at bogen også vil kunne anvendes i kemi B-undervisningen. Men det vil nok kun være i begrænset omfang, da opslagsværket især er anvendeligt ved arbejde med den skriftlige genre, som skriftlige prøver i kemi A udgør. Bogen "klæder" ikke direkte eleverne på til at arbejde med denne særlige genre. Men når kemi A-eleverne er "klædt på" igennem undervisningen, vil bogen kunne fungere som et godt opslagsværk for eleverne, både i hverdagen og ved prøver. Spændende at se, hvilken plads denne type materiale får i en ny AI-tid?

E-mail:

Keld Nielsen: keld.nielsen02@gmail.com



Biotin[6]uril – en makrocyklisk forbindelse, der vekselvirker med anioner

Ved at udnytte at reaktionen mellem formaldehyd og D-Biotin (et vitamin, og et naturligt forekommende *N,N'*-dialkylurinstof) er reversibel, kan oligomeriseringsreaktionen *guides* ved at tilsætte en *templat*. I dette bidrag forklarer jeg, hvordan dette er blevet udnyttet til at syntetisere makrocykler, der vekselvirker stærkt og selektivt til anioner, som var blevet brugt som templat i syntesen af makrocyklen, biotin[6]uril.

Af Michael Pittelkow.
Kemisk Institut,
Københavns Universitet

Hvis man lader urinstof ($\text{CO}(\text{NH}_2)_2$) reagere med formaldehyd (CH_2O) i koncentreret svovlsyre (H_2SO_4), får man en hård polymer (en såkaldt thermoset polymer), hvor de to NH_2 -grupper har reageret et antal gange med formaldehyd og er krydsbundet med CH_2 -grupper. De individuelle urinstof-enheder er altså forbundet via såkaldte aminor-funktionaliteter (figur 1).

Denne polymer kan dernæst nedbrydes, hvis man koger den i vandig syre, for eksempel vandig koncentreret saltsyre. Dette er helt klassisk, og observationen, at polymeren kan dannes og nedbrydes, åbner interessante muligheder for at bruge denne type af reaktion til at danne molekyler og materialer, der kan tilpasse sig de eksperimentelle omstændigheder, da den kemiske reaktion er reversibel (aminal-dannelsen) [1].

Hvis man i stedet for at bruge simpel urea reagerer formaldehyd med et *N,N'*-di-substitueret urinstof, så får man ikke længere krydsbundne polymerer, men i stedet enten lineære polymerer eller cykliske forbindelser. To eksempler på cykliske forbindelser er stofklasserne cucurbit[n]uriler og hemicucurbit[n]uril (n er antallet af monomere enheder) som er vist i figur 2, se side 20 [2-3].

Når hhv. hemicucurbit[n]uril og cucurbit[n]uril syntetiseres, er de konkrete betingelser vigtige, da kon-

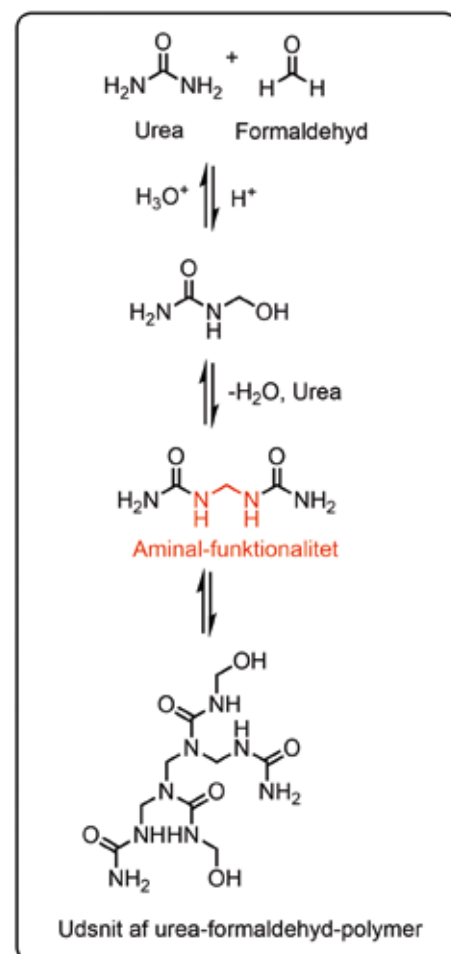
centrationen og arten af den valgte syre influerer udfaldet af syntesen. Som et eksempel dannes hemicucurbit[6]uril i næsten kvantitativt udbytte i 4 M HCl, hvorimod udfaldet er næsten kvantitativt til dodecameren hemicucurbit[12]uril, når 1 M HCl bruges. Faktisk kan hemicucurbit[6]uril dannes fra hemicucurbit[12]uril ved at opløse den i 4 M HCl, hvilket bekræfter, at aminor-dannelse er reversibel. Ligeledes kan størrelsen af makrocykler af cucurbit[n]uril-arten påvirkes betragteligt ved at ændre reaktionsbetingelserne (valg af syre, temperatur og koncentration).

Biotin[6]uril – en makrocyklisk forbindelse, der vekselvirker med anioner

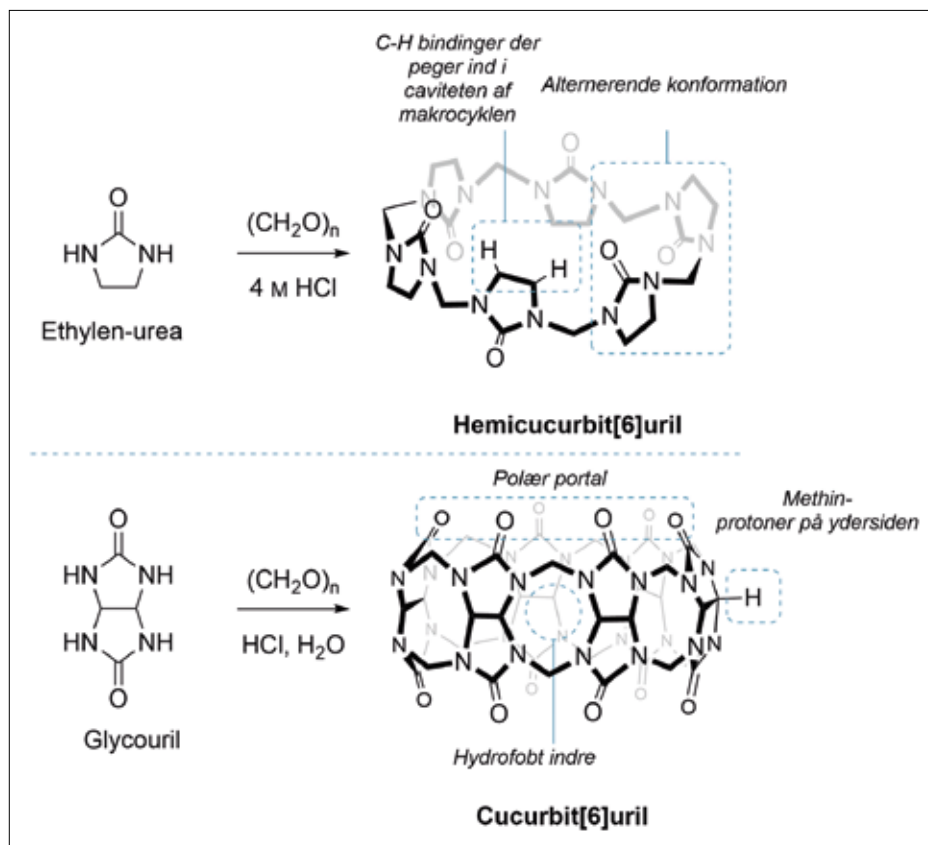
I vores forskningsgruppe på Kemisk Institut på KU beskrev vi for nogle år siden den første vandopløselige makrocykel af *N,N'*-ethylenurea-familien [4]. Med udgangspunkt i D-biotin lykkedes det os at syntetisere biotin[6]uril ved brug af betingelser, der minder om dem, der blev brugt i den oprindelige hemicucurbit[6]uril-syntese (figur 3 på side 20).

Biotin[6]uril kan syntetiseres under en række forskellige betingelser, men det højeste udbytte opnåede vi ved at reagere D-biotin og paraformaldehyd i 3,5 M H_2SO_4 med NaBr som additiv. Makrocyklen blev isoleret som en enkelt isomer med et udbytte på 63 procent (figur 3). Vi har sidenhen succesfuldt syntetiseret mere end et kilo af Biotin[6]uril.

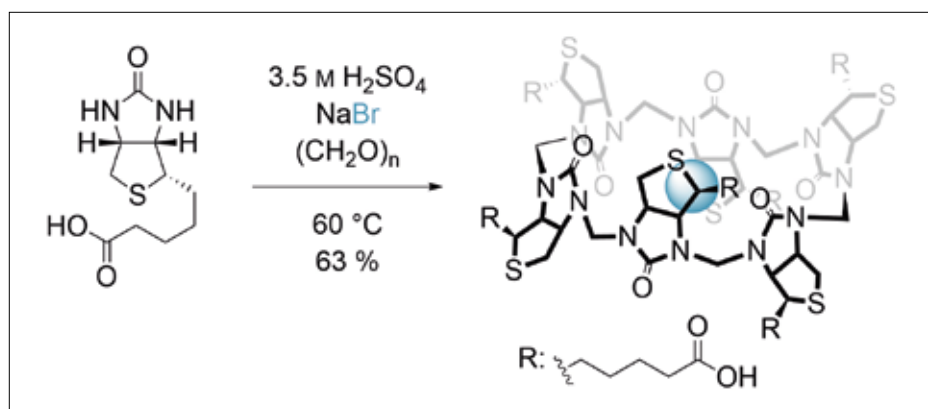
Makrocyklen består af seks D-biotin-



Figur 1. Reaktionen mellem formaldehyd og urinstof er reversibel og danner en thermosæt polymer under sure vandfri betingelser. Under sure vandige betingelser opløses polymeren på grund af den reversible aminor-dannelse.



Figur 2. Syntese og strukturer af hemicucurbit[6]uril og cucurbit[6]uril.



Figur 3. Syntese af biotin[6]uril.

monomerer og den alternerende rumlige orientering af carbonylgrupperne, der er forbundet via methylenbroer ved urea-kvælstofatomerne. Dette skaber en hydrofob indre af makrocyclen med tolv C-H-grupper, der peger ind i kaviteten. Det er de H'er, der sidder i brohovederne på den konvekse del af D-biotin-enhederne. Kaviteten i biotin[6]uril kan inkludere (binde) en række småmolekyler (ethanol, vand) samt anioner så som iodid.

Røntgenstrukturen af biotin[6]uril-iodid-bindingskomplekset med iodid bundet er vist i figur 4 [4].

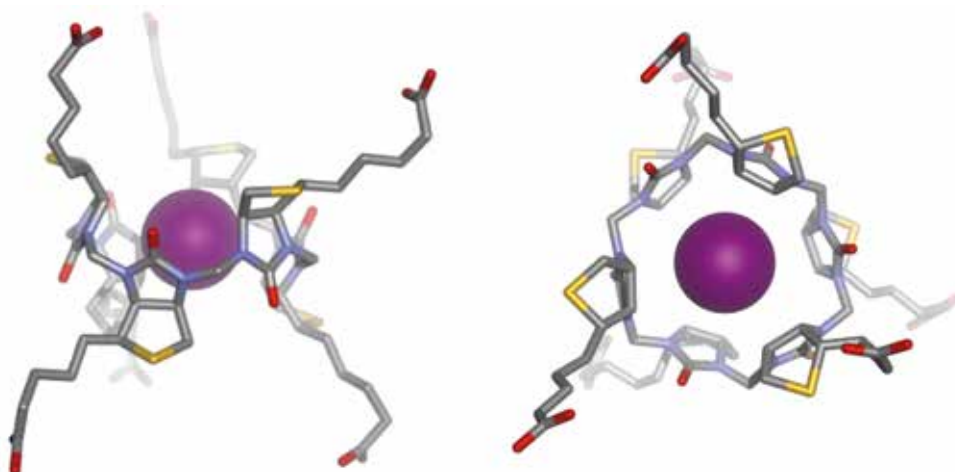
Vi udførte syntesen af biotin[6]uril ved forskellige koncentrationer af HCl og fandt, at 7 M HCl gav den reneste

reaktion. Det var bemærkelsesværdigt, at et reaktionsmedium med samme H^+ -koncentration (3,5 M H_2SO_4) og en halidskabelon (chlorid eller bromid) resulterede i det samme produkt, hvilket beviser, at syntesen bliver guidet af binding til anionen. Dette kaldes en "termodynamisk templateeffekt" [5].

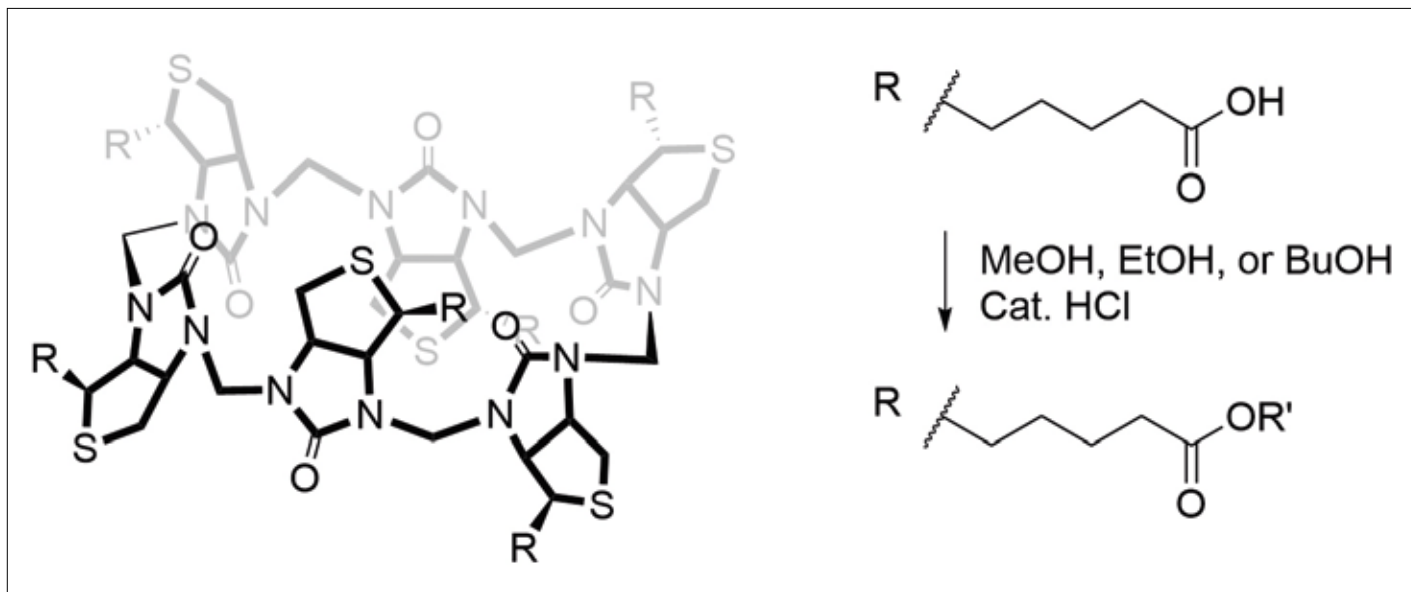
Monovalente anioner bindes af biotin[6]uril i vand ved pH 7,5 med præference for blødere anioner, hvilket ses af præferencerækkefølgen $\text{SCN}^- > \text{I}^- > \text{Br}^- > \text{Cl}^-$ [6]. 1:1-Støkiometri blev observeret for alle undersøgte anioner ved hjælp af Jobs metode og massespektrometri-analyse. Biotin[6]uril vekselvirker ikke væsentligt med kationer som Na^+ , K^+ og Cs^+ , og ændring af pH fra 10,8 til 7,5 påvirkede ikke bindingsisotermier (ITC). Ved anvendelse af ITC til undersøgelser i vand fandt vi, at det enthalpiske bidrag er væsentligt og stort, mens det entropiske bidrag er lille. Biotin[6]uril binder anioner via C-H...anion-vekselvirkninger fra de tolv hydrogenatomer, der peger ind i kaviteten.

Biotin[6]uril blev gjort opløselig i organiske opløsningsmidler ved at omdanne carboxylsyernerne til estere – henholdsvis methyl- (bio[6]me), ethyl- (bio[6]et) og butylestere (bio[6]bu). Dette blev gjort ved hjælp af en Fischers estersyntesestrategi direkte på biotin[6]uril (figur 5) [7].

^1H -NMR- og ITC-titreringer blev brugt til at undersøge bindingsvekselvirkningerne i hexaestrene. Anioner som Cl^- , NO_3^- , HCO_3^- og SO_4^{2-} blev undersøgt i acetonitril, og biotin[6]uril-hexaestrene havde sammenlignelige bin-



Figur 4. Røntgenkrystalstruktur af biotin[6]uril-iodid-bindingskomplekset (venstre: sidevisning, højre: topvisning).



Figur 5. Syntese af biotin[6]uril-hexaestere.

dingsaffiniteter, uanset om undersøgelserne blev udført med bio[6]me, bio[6]et eller bio[6]bu for både chlorid og nitrat. Igen blev der observeret 1:1-støkiometri for alle anioner. Bindingsvekselvirkningen for chlorid blev bestemt ved ITC og var både enthalpisk og entropisk favorabel i modsætning til, hvad der blev fundet for bio[6] i vand, hvor entropien var ufavorabel.

I det organiske opløsningsmiddel binder chlorid-ioner cirka to størrelsesordener stærkere end NO_3^- og HCO_3^- , mens der ikke blev observeret binding for SO_4^{2-} -anionen. HCO_3^- er mere basisk end de øvrige anioner og er derfor normalt den bedre acceptør for konventionelle hydrogenbindinger (HNO_3 $\text{pK}_a = -1,3$; H_2CO_3 $\text{pK}_a = 3,6$ og $10,3$), så de lignende K_a -værdier for NO_3^- og HCO_3^- indikerer forskellen mellem konventionelle hydrogenbindinger og C-H...anion-vekselvirkninger.

Vi testede anion-transport for biotin[6]uril-hexaestrene ved brug af unilamellære vesikler bestående af POPC, kolesterol (70/30) og bio[6]-hexaester ved hjælp af lucigenin-assayet, der er blevet udviklet af Davis-gruppen i Bristol. Chlorid-ion transport blev fulgt ved brug af emissionen fra lucigenin på grund af quenching af lucigenin ved den stigende chloridkoncentration inde i vesiklen (figur 6).

Ved tilsætning af chlorid blev der observeret et fald i emissionen ved 535 nm, hvilket viste, at bio[6]-estrene transporterede chlorid ind i vesiklerne. Alle tre bio[6]-estere viste transport, hvor butylesteret var den hurtigste transporter.

Interessant nok medførte en ændring fra NO_3^- til SO_4^{2-} i lucigenin-assayet, at transporten stoppede fuldstændigt, hvilket indikerer, at biotin[6]uril-hexaestrene ikke kan transportere intravesikulært SO_4^{2-} ud af vesiklerne, når Cl^- transporteres ind. Dette er forventeligt, da det divalente sulfation ikke bindes af bio[6]-strukturen. NO_3^- er i stand til at transporteres ud af vesiklerne for at opretholde elektroneutralitet. Denne ændring fra nitrat til sulfat viser også, at bio[6]-estrene ikke transporterer Na^+ -ioner, da indstrømning af Na^+ ligeledes ville opretholde elektroneutralitet.

Dette eksperiment viser høj selektivitet for chloridtransport frem for bicarbonat- og sulfattransport. Den bemærkelsesværdige selektivitet af bio[6]-estere i både aniontransport og anionbinding kan muligvis skyldes den relativt "bløde" karakter af C-H-hydrogenbindingen sammenlignet med andre hydrogenbindingsdonorer, hvilket favoriserer blødere

anioner frem for hårde anioner (Cl^- frem for eksempelvis HCO_3^-).

Konklusioner og fremtidig forskning

I min gruppe arbejder vi på nye aspekter af kemien af biotin[6]uril – især hvordan vi kan funktionalisere makrocyclen på nye måder til for eksempel at binde anioner stærkere, og til selektivt at kunne binde både anioner og kationer samtidigt.

Tak

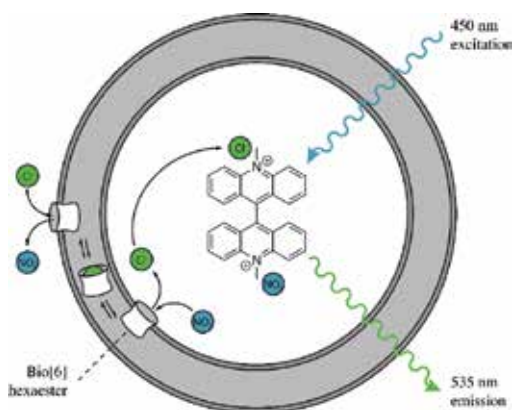
Tak til nuværende og tidligere gruppe-medlemmer, mine skønne kollegaer på KU, samt samarbejdspartnere.

E-mail:

Michael Pittelkow: pittel@chem.ku.dk

Referencer

1. B. Tollens, *Chem. Ber.*, **1884**, 17, 653-659.
2. N.N. Andersen, M. Lisbjerg, K. Eriksen, M. Pittelkow, *Isr. J. Chem.*, 2018, 3-4 (58), 435-448.
3. L. Isaccs, *Chem. Commun.*, **2009**, 619-629.
4. M. Lisbjerg, B.M. Jessen, B. Rasmussen, B.E. Nielsen, A.Ø. Madsen, M. Pittelkow, *Chem. Sci.*, **2014**, 5(7), 2647-2650.
5. P.T. Corbett, J. Leclair, L. Vial, K.R. West, J.-L. Wietor, J.K.M. Sanders, S. Otto, *Chem. Rev.*, 106(9), 3652-3711.
6. a) N.N. Andersen, K. Eriksen, M. Lisbjerg, M.E. Ottesen, B.O. Milhøj, S.P.A. Sauer, M. Pittelkow, *J. Org. Chem.*, **2019**, 84, 5, 2577-2584. b) M. Lisbjerg, B.E. Nielsen, B.O. Milhøj, S.A.P. Sauer, M. Pittelkow, *Org. Biomol. Chem.*, **2015**, 13, 369-373.
7. M. Lisbjerg, H. Valkenier, B.M. Jessen, H. Al-Kerdi, A.P. Davis, M. Pittelkow, *J. Am. Chem. Soc.*, **2015**, 137(15), 4948-4951.



Figur 6. Lucigenin-assayet anvendt i undersøgelsen af aniontransport ved biotin[6]uril-hexaestere.

Hvad skal kalken bruges til?

Fra en brønd på en jysk mark til borekerner i kælderens under Aarhus Universitet: 55 millioner år gammel vulkansk aske kan måske hjælpe med at gøre CO₂ til sten. Samtidig forsøger dansk industri at vende kalkens gamle kulstofkredsløb på hovedet.

Tekst: Isaac Appelquist Løge^{1,2},
Anna Buhl Pedersen³,
Emil Rynkeby Kristensen³
og David Lundbek Egholm⁴
Fotos: David Bering/Montgomery

¹ Department of Chemical Engineering,
Norwegian University of Science and
Technology (NTNU) og DTU Kemiteknik

² Department of Chemical Engineering,
Technical University of Denmark

³ Department of Geoscience,
Aarhus University

⁴ Sunstones ApS

Grusvejen ender ude på en mark, og der er ikke meget at se. Et plastikrør, der stikker op af jorden, og et låg. David Lundbek Egholm, direktør i Sunstones, tager låget af, og røret forsvinder ned i mørket.

Det er en brønd. Uanselig fra overfladen, men en forbindelse til fortiden. Et par hundrede meter nede i den jyske undergrund ligger lag af vulkansk aske, aflejret dengang Danmark lå under havet, og vulkaner omkring det nyåbnede Nordatlanten sendte enorme askeskyer ud over Nordeuropa. I dag arbejder Egholm og virksomheden Sunstones på at bruge netop de lag til at fjerne CO₂ fra atmosfærens kulstofkredsløb og binde det som faste mineraler under jorden. Blandt andet som kalk.

I den første artikel i denne serie stod vi ved molerklinterne på Fur og så de mørke askelag som en geologisk stregkode. Dengang sluttede historien med en bemærkning om, at calciumholdige mineraler i asken en dag kunne vise sig at blive vigtige. Nu er vi nået til den dag.

En brønd ned til en gammel askesky

Det, David viser os på marken, er en idé, der begyndte som et forskningsprojekt på Institut for Geoscience ved Aarhus Universitet. C₂ASH – Carbon-fixing



Figur 1. Jord- og sedimentprøver fra den danske undergrund. De forskellige lag kan aflæses som en geologisk tidslinje, hvor skift i farve, kornstørrelse og sammensætning viser, hvordan undergrunden er bygget op. Anna Buhl Pedersen bruger prøverne til at identificere de vulkanske askelag og undersøge, hvilke lag der kan være egnede til CO₂-mineralisering.

by Volcanic Ash – undersøger, om de vulkanske askelag under det vestlige Danmark kan bruges til såkaldt karbonatmineralisering: en proces, hvor CO₂ reagerer med mineraler og ender som

faste karbonater. Sunstones er siden vokset ud af forskningsmiljøet som en virksomhed, der forsøger at bringe processen fra laboratoriet til praktisk anvendelse.

Under Danmark ligger mange forholdsvis tynde lag af vulkansk aske, som blev spredt over havet under den intense vulkanske aktivitet, der fulgte åbningen af Nordatlanten. I Nordvestjylland kan lagene blandt andet ses ved Fur (husker du dem fra artikel 1? Ellers er den værd at læse). Længere mod syd ligger de typisk et par hundrede meter under jordoverfladen. Lagde man dem oven på hinanden, ville de tilsammen kun måle 2 til 4 meter.

Det lyder ikke af meget. Men askens styrke er ikke tykkelsen. Det er overfladen. Kornene er så små og så uregelmæssige, at et enkelt gram aske kan have en overflade på i størrelsesordenen 86 kvadratmeter, og det er dér, kemien skal foregå.

Regnestykket bliver derfor hurtigt stort. Forskerne bag C-ASH har anslået, at askelagene alene i Skive, Morsø og Thisted kommuner i princippet kan binde omkring 2 gigaton CO_2 . Det svarer til Danmarks samlede udledninger over 40 til 50 år.

Og det er netop askens vulkanske oprindelse, der gør den interessant. Asken indeholder silikatminerale med blandt andet calcium, magnesium og jern. Når CO_2 opløses i vand, bliver vandet svagt surt. Det kan reagere med silikatminerale og frigive de positivt ladede metalioner. Senere kan de reagere med det opløste kulstof og danne karbonatminerale. Hvis calcium er involveret, kan slutproduktet være calciumcarbonat. Altså kalk.

Sunstones' koncept er at opløse CO_2 i salt grundvand og føre det CO_2 -rige vand ned til askelagene. Her skal vandet bevæge sig gennem porerne, mens mineralerne langsomt opløses og nye karbonatminerale dannes. Virksomheden beskriver det som en slags underjordisk dansk vand: CO_2 'en er allerede opløst, før vandet sendes ned.

Idéen er afprøvet før. Ved Hellisheiði syd for Reykjavík har det islandske projekt Carbfix siden 2012 pumpet CO_2 -mættet vand ned i basalt, og målinger viste, at omkring 95 procent af kulstoffet var blevet til calcit inden for to år. Den danske aske er finkornet og mere reaktiv end islandsk basalt, og forventningen er derfor, at reaktionen her kan gå hurtigere: måske måneder frem for år.

Brønden på marken er forbindelsen mellem en proces, som forskerne kan beskrive på papir, og den virkelige undergrund, hvor vand, mineraler, sprækker og askelag ikke nødvendigvis opfører sig så pænt som i en laboratoriebeholder.

Men før man kan pumpe vand med

CO_2 ned i undergrunden, skal man vide præcis, hvad der er dernede.

Kælderen under Geoscience

David tager os med til Institut for Geoscience, hvor vi møder Anna Buhl Pedersen og Emil Rynkeby Kristensen.

Kaffe. Introduktion. Og ned i kælderen. Her ligger undergrunden som geologisk historie på hylderne i form af borekerner. Anna og Emil hiver nogle stykker undergrund ned.

En borekerne er en søjle af undergrund, hentet op fra dybet og bevaret i præcis den orden, den lå i. Og den gør noget meget abstrakt meget konkret, fordi en boring gennem undergrunden i princippet er en lodret tidslinje: Hver prøve har en bestemt dybde og dermed en bestemt placering i lagserien. Farve, kornstørrelse, mineralindhold og overgangen fra ét materiale til et andet fortæller, hvad der blev aflejret, og hvad der siden er sket med sedimentet. Man står altså med et stykke materiale i hånden, der er skåret ud af et ganske bestemt niveau flere hundrede meter under jorden. Og i vores tilfælde den jyske mark historien startede ved.

Anna Buhl Pedersen fortæller, hvordan asken er sammensat, og om den overhovedet er den rigtige at lagre CO_2 i. Hun arbejder med karbonatmineralisering, borekerner, petrografi og geokemiske analyser og undersøger sammen med kolleger, hvordan askens sammensætning, tekstur og senere omdannelse påvirker dens evne til at reagere med CO_2 .

For ikke alle askelag er ens. Nogle er blevet omdannet så meget siden aflejringsen, at de reaktive mineraler reelt er brugt op. Skal processen virke, skal asken stadig indeholde tilstrækkeligt mange mineraler, der kan frigive calcium, magnesium eller jern. Samtidig skal forskerne kunne genkende lagene i nye boringer, og derfor bruges blandt andet røntgenfluorescens, XRF, og elektronmikroskopiske analyser til at kortlægge deres kemiske fingeraftryk.

Når man ser prøverne ligge ved siden af hinanden i kælderen, bliver det tydeligt, hvorfor denne del af arbejdet er nødvendig. En mark ved overfladen fortæller næsten ingenting om, hvad der ligger 200 meter længere nede. Før en lagringsteknologi kan skaleres op, skal undergrunden læses lag for lag.

Når undergrunden flyttes ind i laboratoriet

Hvis borekernerne skal fortælle Anna hvor, stiller Emils laboratorieopstilling et andet spørgsmål: nemlig hvordan? Og hvor hurtigt?

Han viser os en opstilling, hvor processen kan studeres under kontrollerede forhold. Her kan vulkansk aske, vand og CO_2 bringes sammen i miniature, så forskerne kan undersøge den kemi, der i den virkelige verden skal foregå dybt under en mark.

Det afgørende sker i flere trin, og hvert trin kan svigte. Først skal CO_2 'en over i vandet. Så skal det svagt sure vand angribe askens silikatminerale. Så skal mineralerne frigive calcium, magnesium eller jern hurtigt nok. Og til sidst skal kulstoffet udfældes igen som et fast karbonat frem for at blive siddende opløst eller blive ført videre med strømmen. Emils opstilling gør det muligt at forstå processen og undersøge, hvad der sker under hvilke betingelser.

Det er en proces, naturen allerede kender. Regnvand optager CO_2 fra luften og jorden, reagerer med bjergarter og fører opløste stoffer mod floder og hav. Over geologiske tidsrum er sådanne forvittringsprocesser en del af Jordens naturlige regulering af atmosfærens CO_2 . Det nye består derfor ikke så meget i selve kemien som i at forsøge at gøre den hurtigere, mere målrettet og mere målbar.

På den måde bliver opstillingen i kælderen en miniatureudgave af marken. Fra bord til mark. På bordet kan man kontrollere materialerne og følge reaktionerne. Ude i marken skal samme

■ Artikelserie om kalk

I løbet af 2026 bringer Dansk Kemi en artikelserie om mineralet kalk. Artiklerne er skrevet af postdoc Isaac Appelquist Løge fra Kemiteknik, DTU, på baggrund af en bevilling fra Carlsbergfondet. Artiklerne vil have følgende temaer:

- Artikel 1: Hvorfor har vi så meget kalk i Danmark: Danmarks undergrund og fortid (bragt i Dansk Kemi nr. 3, 2026)
- Artikel 2: Hvordan har danskere tidligere brugt kalk som et mineral? (bragt i Dansk Kemi nr. 4, 2026)
- Artikel 3: Hvad er kalks potentiale i klimakampen?
- Artikel 4: En forskers råd til at blive fri for kalk.



Figur 2. Et stykke vulkansk aske udsættes for vand mættet med CO₂. Når det svagt sure vand reagerer med mineralerne i asken, frigives blandt andet calcium, der bindes sammen sidenhen med kulstoffet i nye karbonatminerale. På den måde kan CO₂ i princippet gå fra at være opløst i vand til at blive bundet som fast kalksten.

kemi en dag fungerer i en undergrund, som er flere millioner gange større og langt mindre velordnet.

Kan CO₂ blive til nyt kalkpulver?

En anden dansk idé arbejder videre med kalkens kredsløb. Projektet IKKA-TECH arbejder på at tage CO₂ fra industriel røggas og omdanne den til kalk.

Processen er inspireret af mineralet ikait, som blandt andet danner de karakteristiske undersøiske søjler i Ikkafjorden i Grønland: et calciumcarbonat med vand bundet i krystalgitteret, som kun er stabilt ved lave temperaturer. I den udviklede proces optages CO₂ fra røggassen og udfældes først som ikait under kontrollerede forhold. Derefter omdannes mineralet til stabilt calciumcarbonat.

Det interessante er, at slutproduktet ikke bare skal gemmes væk. Det calciumcarbonat, der produceres, skal kunne bruges som råmateriale og fyldstof i blandt andet maling, plast, papir og byggematerialer.

Dermed vender vi tilbage til endnu en

rolle fra den forrige artikel. Der beskrev vi, hvordan fint formalet kridt bruges som fyldstof, fordi det kan give produkter volumen, hvidhed og bestemte materialegenskaber. I fremtiden kan en del af sådanne karbonatmaterialer måske i stedet fremstilles med CO₂ som en af råvarerne.

Sunstones og Ikkaton forsøger altså grundlæggende noget beslægtet på to helt forskellige måder. Det ene projekt vil lade geologien gøre arbejdet under en mark og acceptere, at det tager tid. Det andet vil kontrollere udfældningen i et industrielt anlæg, hvor alt kan måles, og betaler til gengæld med energi og udstyr. Fælles for dem er, at CO₂'en bliver fjernet. Med hjælp fra kalk.

Fra kalkens fortid til dens fremtid

I den første artikel fulgte vi kalken baglæns i tid. Vi rejste millioner af år tilbage og så, hvordan mikroskopiske organismer, havvand og geologisk tid byggede den danske undergrund.

I den anden fulgte vi kalken ud af jorden, ind i samfundet og nutiden. Den

er blevet til cement, mørtel, jordforbedring, industrimateriale og kalkmaleri.

Denne gang peger tidens pil fremad.

Hos Ikkaton forsøger man at omdanne industriens CO₂ til nyt calciumcarbonat. Og under de jyske marker håber Sunstones og forskerne fra Aarhus Universitet, at 55 millioner år gammel vulkansk aske kan hjælpe med at føre CO₂ hele vejen tilbage til undergrunden.

Det betyder ikke, at kalk pludselig løser klimakrisen. Begge teknologier skal fungere i stor skala, bruge rimelige mængder energi og vand og kunne dokumentere, at det lagrede kulstof faktisk bliver, hvor det skal.

Men kalken viser noget interessant om den opgave, vi står med. Kulstof bevæger sig hele tiden mellem luft, vand, levende organismer og sten. Det har det gjort gennem hele Jordens historie. Vores problem er, at vi på få hundrede år har flyttet enorme mængder kulstof den ene vej: fra undergrunden og ud i atmosfæren. Teknologier som dem, der udvikles i Danmark nu, er forsøg på at få en del af bevægelsen til at gå den anden vej.

Og nu er vi tilbage på marken. Et rør der kigger op på os på en solrig dag. CO₂ skal ned. CO₂'en skal blive til kalk.

Taksigelser

Projektet KALK: En fortælling om et misforstået mineral er gjort muligt gennem støtte fra Carlsbergfondets Mindelegat. Billederne er taget af David Bering fra Montgomery.

E-mail:

Isaac Appelquist Løge: isacl@kt.dtu.dk

Kilder og videre læsning

Pedersen, A.B., Schovsbo, N.H., Bodin, S. et al. (2025): Geochemical characterisation of the Danish subsurface ash series for carbon mineralisation potential. Bulletin of the Geological Society of Denmark, 74, 227–250.

DOI: 10.37570/bgscd-2025-74-13.

Egholm, D.L. et al. (2024): Vulkansk aske kan binde enorme mængder CO₂. Aktuell Naturvidenskab, nr. 2.

Aarhus Universitet, Institut for Geoscience: CO₂ kan omdannes til kalksten – om C-ASH-projektet. Aarhus Universitet, CAPS: CO₂ removal by carbonate mineralisation: Can we use the volcanic ash in Denmark?

Klimafonden Skive: C-ASH – CO₂-fiksering med naturens teknologi i ny sammenhæng. Sunstones: How CO₂ mineralization works og virksomhedsbeskrivelse.

Energistyrelsen (2025): Godkendelse af efterforskningsboring, Sunstones A/S, Salling.

TechSavvy (2026): Bevilling på 25 millioner skal få ny CO₂-teknologi ud i fuld skala.

Carbfix: Projektbeskrivelse og resultater fra Hellisheiði, Island.

Innovationsfonden (2026): Danish Technology Converts Industrial CO₂ into Calcium Carbonate – IKKA-TECH.

Hvordan får vi saftige plantebøffer?

Rehydrering af tekstureret vegetabilsk protein

Tekstureret vegetabilsk protein bruges til at fremstille plantebaserede kødanaloger. pH og ionstyrke påvirker proteiners konformation og interaktion med vandmolekyler, så vi satte os for at undersøge, hvordan pH og ionstyrke påvirker rehydrering af tekstureret vegetabilsk protein.

Af Hanne Christine Bertram og Louise M.A. Jakobsen, Institut for Fødevarer, Aarhus Universitet

I de senere år er teksturerede vegetabilske proteiner (TVP'er) blevet en hovedingrediens i fremstillingen af plantebaserede kødanaloger. TVP'er fremstilles ved hjælp af en ekstruderingsproces, og de kan skabe en fiberagtig struktur, som minder om den, vi finder i kød. Vandindholdet kan variere og er afgørende for TVP'ens egenskaber. TVP'er med et lavt vandindhold har en lang holdbarhed og kan nemt opbevares. Før videre brug, hydreres TVP'er og kombineres efterfølgende med andre ingredienser for at opnå produkter såsom plantebaserede burgere. De mest almindelige kilder, der anvendes til TVP-fremstilling, er soja og ærter.

Med udgangspunkt i viden om kødproteiner

De fysisk-kemiske og funktionelle egenskaber ved TVP'er har indflydelse på deres egenskaber som ingredienser og slutproduktets kvalitet. Hydreringskapacitet, dvs. evnen til at absorbere og binde vand, er en af de vigtige funktionelle egenskaber. Hydreringskapaciteten har således betydning for både tekstur og saftighed – jo mere vand der kan bindes, jo mere vand kan også frigives under tyggeprocessen og dermed give oplevelsen af et saftigt produkt. Mens vi ved, at råmaterialernes egenskaber og de betingelser, der anvendes under ekstruderingsprocessen (vandindhold, temperatur) påvirker TVP'ernes funktionelle egenskaber, har vi kun begrænset viden om, hvordan TVP'er-



Foto: Colourbox.

nes evne til at absorbere og binde vand kan påvirkes af forholdene under selve rehydreringsprocessen.

Kan vi for eksempel forvente, at pH og ionstyrke har indflydelse på rehydreringskapaciteten hos TVP'er? Vi har tidligere vist, at ved "kødproteiner", dvs. myofibrillære proteiner isoleret fra traditionelt kød, påvirker pH- og ionstyrkeforhold proteinernes evne til at svulme op og binde vand [1]. Dette har helt afgørende betydning for de funktionelle egenskaber af det endelige kødprodukt. De myofibrillære proteiner består især af myosin, og under pH-forhold tæt på myosins isoelektriske punkt (pI) (~5) er de netto elektrostatiske ladninger lave, og frastødningen derfor også lav med ledsagende lille intermolekylær afstand for vandmolekyler.

Derimod, når pH enten sænkes el-

ler øges sammenlignet med pI, stiger de netto elektrostatiske ladninger, og dermed også den elektrostatiske frastødning [2], som skaber plads til vandmolekylerne i de intermolekylære rum. Derudover ændres ladningen af de myofibrillære proteiner af ionstyrke, da bindingen af negativt ladede ioner fører til et skift i pI [2].

pH- og ionstyrke-effekt på rehydrering af tekstureret sojaprotein

Inspireret af kødvidenskaben satte vi os for at undersøge, om lignende pH- og ionstyrke-effekter som beskrevet ovenfor gør sig gældende i TVP fremstillet af sojaprotein [3]. Til dette formål blev ni forskellige bufferopløsninger fremstillet ud fra citronsyre ($C_6H_8O_7$) og dens natriumsalt ($Na_3C_6H_5O_7$). De ni buffere be-

Kilde: Wikimedia.



Figur 1. Tekstureret sojaprotein.

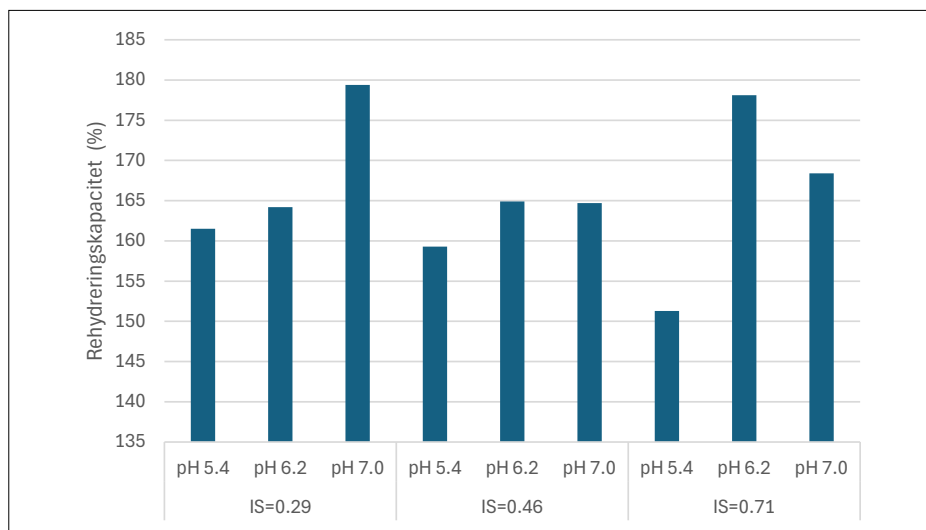
stod af kombinationer af tre pH-niveauer (pH 5,4, 6,2 og 7,0) og tre ionstyrker (0,29, 0,46 og 0,71 M). pH blev justeret med 1 M natriumhydroxid (NaOH) eller saltsyre (HCl) og ionstyrken blev indstillet med natriumklorid (NaCl). Herefter blev cirka 1 gram tørt TVP-materiale vejat og rehydreret i 50 ml buffer. Prøverne blev placeret ved 4°C og efter 24 timer blev prøverne centrifugeret for at bestemme rehydreringskapacitet, hvor følgende beregning blev anvendt:

$$\text{Rehydreringskapacitet} \left(\frac{g \text{ H}_2\text{O}}{g \text{ prøve}} \right) = \frac{Vægt_{\text{efter centrifugering}}(g) - W_{\text{inden rehydrering}}(g)}{W_{\text{inden rehydrering}}(g)} * 100$$

Vi fandt en signifikant effekt af pH på rehydreringskapaciteten, der steg ved et højere pH ($p=0,012$) (figur 3). Derimod fandt vi ikke nogen statistisk signifikant effekt af ionstyrke på rehydreringskapaciteten af det teksturerede sojaprotein ($p=0,47$).

Ved pH 6,2 og 7,0 steg rehydreringskapaciteten således, hvilket svarer til en højere grad af vandabsorption. Resultaterne tyder således på, at størrelserne af iboende porer i TVP'er kan moduleres gennem pH-værdiens virkning på elektrostatisk frastødning. Der kan spekuleres i, om rehydreringsadfærden af TVP'er reelt ligner analogien med en svamp, der absorberer vand. TVP'er har således et netværk af porer og kanaler i deres struktur. I nærvær af vand trænger væsken ind i disse porer og holdes der. Den svampelignende struktur skaber også en kapillærvirkning, som hjælper med at trække væsken længere.

Vores studie viste altså lignende pH-effekter i TVP'er som i kødproteiner. En proteinoverflade bliver negativt ladet ved pH-niveauer over det isoelektriske



Figur 3. Rehydreringskapacitet af tekstureret sojaprotein som funktion af pH og ionstyrke.

punkt (pI). Sojaproteinisolater har en pI omkring pH 4,5 [4]. Derfor kunne det i nærværende studie forventes, at proteinernes laveste overfladeladning ville være ved pH 5,4, og proteinernes højeste

overfladeladning ville være ved pH 7,0. Resultaterne viste, at disse ændringer i proteinernes overfladeladning og elektrostatisk frastødning påvirkede TVP'ernes iboende strukturer og omfanget af rehydreringskapaciteten. Ved at modificere pH-værdien af den væske, der anvendes til rehydrering af TVP'er, kan der således opnås en højere rehydrering med en forventet effekt på den oplevede saftighed.

Sojaprotein består hovedsageligt af globulinerne β -conglycinin (7S) og glycinin (11S). Under ekstruderingsprocessen udfoldes proteinerne, og glycinin (11S), der indeholder det højeste antal sulfidgrupper, bidrager til tekstureringen gennem kovalent tværbinding af sulfidgrupperne, hvilket reducerer proteinets opløselighed ved proteinaggregering [5]. Det aggregerede protein har muligvis stadig ladede proteiner på overfladen, der bidrager til en elektrostatisk frastødning [6]. Den kovalente tværbinding fra teksturering vil dog skabe strukturelle begrænsninger for hævelse gennem elektrostatisk frastødning. Det er også muligt, at

β -conglycinin (7S), som forbliver opløselig, bidrager til ikke-kovalent binding.

I vores studie fandt vi ingen effekt af ionstyrke på rehydreringskapaciteten. Vi spekulerer i, om dette kan skyldes, at de testede ionstyrkeniveauer var for høje for sojaproteiner, og at overfladeladningen allerede er neutraliseret ved 0,29 M.

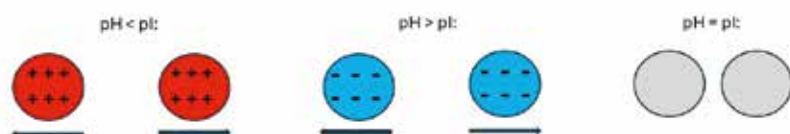
NMR-relaksometri

Lavfelts NMR-relaksometri, også kendt som time domain NMR, er en metode, der har vist sig særdeles velegnet til at undersøge vands egenskaber i fødevarer. I en artikel tidligere bragt i Dansk Kemi blev metoden beskrevet samt dens anvendelser til kvalitetskontrol af fødevarer, undersøgelser af teksturelle ændringer under frys-lagring af fisk, hurtigbestemmelse af fedt- og proteinindhold i kødprodukter m.m. [7]. Vi har tidligere vist, at transversal relaksation (T_2) kan give nyttig information om strukturelle forhold hos kødproteiner [8]. Vi målte derfor også T_2 relaksation på de rehydrerede TVP-prøver af sojaprotein.

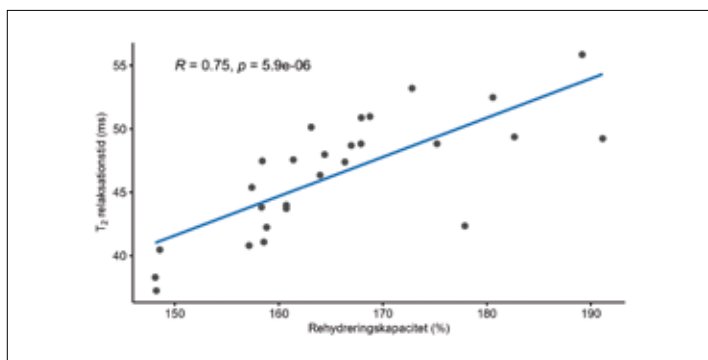
Vi fandt, at T_2 relaksationstiden var stærkt korreleret med rehydreringskapaciteten (figur 4). Ifølge Brownstein-Tarr-modellen for porøse medier afspejler længere T_2 relaksationstider større porestørrelser [9]. Vi formoder således, at sammenhængen mellem T_2 relaksationstiden og rehydreringskapaciteten i vores studie kan tilskrives, at T_2 relaksationstiden afspejler porestørrelser i TVP-strukturen svarende til, at porestørrelserne vil øges med større elektrostatisk frastødning induceret ved, at pH øges i forhold til proteinernes isoelektriske punkt.

Konklusion

Vores studie har vist, at rehydreringskapaciteten af tekstureret sojaprotein



Figur 2. Illustration af, hvordan pH påvirker proteiners nettoladning og elektrostatisk frastødning. Ved pH under det isoelektriske punkt (pI) vil nettoladningen være positiv; ved pH over det isoelektriske punkt (pI) vil nettoladningen være negativ og ved pH omkring det isoelektriske punkt (pI) vil nettoladningen være lav.



Figur 4. Korrelation mellem T_2 relaxationsstid målt i tekstureret sojaprotein og rehydreringskapacitet (%).

kan moduleres gennem pH-værdien af den væske, der bruges til rehydrering. NMR relaxationsstudier indikerer, at effekterne kan tilskrives, at øget elektrostatiske frastødning, induceret af pH, påvirker den intermolekylære struktur af det teksturerede sojaprotein.

Studiet er en del af projektet CHEWNMR, der er finansieret af Aarhus Universitets Forskningsfond (Bevillingsnr. AUFF-E-2023-9-58). NMR-data i studiet blev genereret ved brug af forskningsinfrastruktur ved AU, herunder FOODHAY (Food and Health Open Innovation Laboratory, den danske roadmap for forskningsinfrastruktur).

E-mail:

Hanne Christine Bertram: hannec.bertram@food.au.dk

Referencer

- Bertram, H.C., Kristensen, M. & Andersen, H.J. (2004). Functionality of myofibrillar proteins as affected by pH, ionic strength and heat treatment – a low-field NMR study. *Meat Science*, 68(2), 249–56. doi:10.1016/j.meatsci.2004.03.004.
- Hamm, R. (1986). Functional properties of the myofibrillar system and their measurements. *Muscle as Food*, 135–199. doi:10.1016/b978-0-12-084190-5.50009-6.
- Jakobsen, L.M.A., Fathali, N., Najbjerg, H., Bertram, H.C. (2026). Low-Field NMR Relaxometry for Elucidating the Effect of Temperature on the Rehydration Kinetics and pH and Ionic Strength on Rehydration Capacity of Texturized Soy Protein. *Magnetic Resonance in Chemistry*. 0: 1–8, doi.org/10.1002/mrc.70137.
- Lee, K., Ryu, H. & Rhee, K. (2003). Protein solubility characteristics of commercial soy protein products. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, 80(1), 85–90.
- Webb, D., Li, Y. & Alavi, S. (2023). Chemical and physicochemical features of common plant proteins and their extrudates for use in plant-based meat. *Trends in Food Science & Technology*, 131, 129–138. doi:10.1016/j.tifs.2022.11.006.
- Samard, S. & Ryu, G.-H. (2019). Physicochemical and functional characteristics of plant protein-based meat analogs. *Journal of Food Processing and Preservation*, 43(10), e14123. doi:10.1111/jfpp.14123.
- Veliyulin, E. (2021). Time Domain NMR – en fortræffelig metode til at bestemme fedt- og vandindhold i fødevarer. *Dansk Kemi*, 102, nr. 3, 12–14.
- Bertram, H.C., Purslow, P.P., Andersen, H.J. (2002). Relationship between Meat Structure, Water Mobility, and Distribution: A Low-Field Nuclear Magnetic Resonance Study. *Journal of Agricultural & Food Chemistry*, 50, 824–829.
- Brownstein, K.R., Tarr, C. (1979). Importance of classical diffusion in NMR studies of water in biological cells. *Physical review A*, 19, 2446.



SKRIV TIL DANSK KEMI

Stofområder

Vi er interesserede i spændende artikler inden for alle områder af kemi.

Vi formidler viden om for eksempel:

Materialekemi • Analytisk kemi • Kemiteknik • Bioteknologi
Fødevarer kemi • Klima og miljø • Fundamental kemi

Din viden er vigtig - del den!

Dansk Kemi er til for at oplyse og begejstre om alle emner inden for kemi.

Det trykte magasin kommer ud på alle landets biblioteker og bliver sendt til 3600 abonnenter.

Indholdet bliver flittigt brugt på ungdomsuddannelser, bliver læst af industrien og udbreder viden om kemi bredt til samfundet.

Dansk Kemi er medlemsblad for Kemisk Forening og Kemiingeniørgruppen.

Dansk Kemi har eksisteret i mere end 100 år.

Kontakt redaktør Katja Salomon Johansen
på katja@techmedia.dk

Vi GLÆDER os
til DIT bidrag

Max. 8000 anslag inkl. mellemrum i Word.

Brug overskrifter og underoverskrifter.

Medsend illustrationer og billeder i 300 dpi. Brug gerne faktabokse.

Husk billedtekster og fotokreditering. Husk også e-mail-adresse til forfatter.

Evaluering af rustbeskyttende maling under barske maritime forhold

Ny viden og avanceret testning skal sikre mere holdbare og bæredygtige beskyttelsessystemer til fremtidens infrastruktur.

Af Ziyu Li, Joshua Onyango, Claus Erik Weinell og Kim Dam-Johansen, CoaST, DTU Kemiteknik

Korrosion er en af de største udfordringer for levetiden af kritisk infrastruktur og medfører hvert år betydelige økonomiske og klimamæssige omkostninger. For at udvikle mere holdbare rustbeskyttende malingsystemer har en forskningsgruppe på DTU udvidet sit feltlaboratorium ved Hundested Havn, hvor antikorrosive coatings nu kan testes i endnu større skala under nogle af Danmarks mest barske marine forhold. Ved at kombinere langvarig felteksponering med avanceret overvågning og digital dataanalyse arbejder DTU's CoaST Maritime Test Centre (CMTC) på at skabe mere præcise levetidsforudsigelser og fremtidens korrosionstestning.

Korrosion – en usynlig fjende

Den 14. august 2018 kollapsede en 210 meter lang sektion af Morandi-broen i

den italienske havneby Genova under et kraftigt regnvejr og kostede 43 mennesker livet. Broen, der var åbnet i 1967, udgjorde en central strækning af motorvejen A10 mellem Italien og Frankrig. Inde i en af pylonernes skråstag var de bærende stålkabler indstøbt i beton – en konstruktion, der skulle beskytte dem, men i stedet gjorde det umuligt at inspicere dem visuelt. Over årtier havde fugt og klorider trængt ind gennem revner i betonen og gradvist tæret kablerne op, indtil de brast, og pylon 9 styrtede sammen.

Ulykken er et af historiens tydeligste eksempler på, at korrosion er vanskelig at opdage, før det er for sent. Korrosion angriber stort set alt, vi bygger – broer, rørledninger, havvindmøller, atomkraftværker og de utallige metalliske forbindelser i datacentre, som enhver onlinesøgning eller AI-forespørgsel i sidste ende afhænger af.

Ifølge Association for Materials Protection and Performance, AMPP koster korrosion verden omkring 2500 milliarder



Figur 2. Katastrofen ved Morandi-broen, 2018.

der USD årligt, svarende til 3,4 procent af det globale BNP [1]. Application, and Economics of Corrosion Technologies (IMPACT i reparation, produktionstab og sikkerhedsudgifter. Hertil kommer et betydeligt klimaaftryk fra udskiftning af korroderede materialer, som ifølge nyere studier kan sammenlignes med de samlede udledninger fra international luftfart og skibsfart [2]. Bedre korrosionsbeskyttelse har derfor stor sikkerheds-, økonomi- og klimamæssig betydning.

Beskyttende coatings er den første forsvarslinje: nogle virker som en regnfrakke, der holder vand og salt ude; andre, som zinkrige coatings, ofrer sig selv og korroderer i stedet for stålet; en tredje type frigiver korrosionsinhibitorer, når fugt trænger ind. I praksis kombineres principperne i et lagdelt system – primer, mellemlag og topcoat – der samlet er blot en kvart til en halv millimeter tykt, men skal holde stålkonstruktioner intakte i 15-25 år eller mere.

Det rejser et oplagt spørgsmål: Hvordan ved vi, om en coating kan holde i årtier uden faktisk at teste i årtier? Det spørgsmål driver meget af nutidens forskning i accelererede holdbarhedstest.

CoaST

På DTU Kemiteknik har forskere i flere



Figur 1. CoaST Maritime Test Centre (CMTC) på Hundested Havn. Forrest i billedet ses den flydende platform, som især anvendes til test af antibegroningsmaling, midt i billedet ses den nyetablerede platform med skrå stativer til test af rustbeskyttende malinger og bagest i billedet ses tre sorte småhuse fungerende som værksteder og kontor.

Day 1	Day 2	Day 3	Day 4	Day 5	Day 6	Day 7
UV/condensation — ISO 16474-3			Neutral salt spray — ISO 9227			Low-temp. exposure at $(-20 \pm 2) ^\circ\text{C}$
						

Figur 3. Cyklisk ældningstest i henhold til ISO 12944-9. Testpaneler eksponeres i 25 cyklusser eller 4200 timer [3].

år arbejdet med netop dette, primært i regi af Hempel Foundation Coating Science and Technology Centre (CoaST), et tværvideenskabeligt center etableret i 2017. Siden 2020 har flere ph.d.-projekter under CoaST beskæftiget sig med antikorrosive coatings, og centret arbejder fortsat på at styrke Danmarks position inden for coatingvidenskab og korrosionsbeskyttelse.

Udfordringen ved at vurdere rustbeskyttende malings ydeevne

En coatings ydeevne afhænger af et komplekst samspil mellem materiale, miljø og eksponeringstid. Et system, der fungerer upåklageligt ét sted, kan svigte for tidligt et andet sted på grund af forskelle i fugtighed, temperatur, salt og mekanisk belastning.

ISO 12944-2 klassificerer korrosive miljøer i atmosfæriske kategorier (C1-CX) og nedsænkings-/jordkategorier (Im1-Im4) [4], mens ISO 12944-5 angiver, hvilke coatingsystemer der bør bruges for at opnå holdbarhed fra lav (op til syv år) til meget høj (over 25 år) [5]. Men hvordan vurderer man et nyt systems langsigtede holdbarhed, før data fra årtiers felttest er tilgængelige? Det spørgsmål har drevet udviklingen af accelererede ældningstest (ALT), som forsøger at genskabe centrale nedbrydningsmekanismer – via saltaflejring, kondens, temperatursving og UV-stråling – inden for en kortere tidsramme.

ALT giver dog ikke holdbarhed direkte, men specifikke indikatorer som rustunderkryb, blæredannelse og tab af vedhæftning. Fordi nedbrydning i praksis skyldes samspillet mellem mange miljøfaktorer på én gang, er der ingen universel sammenhæng mellem testvarighed og reel levetid. Selv de mest udbredte standarder som ISO 9227 (saltspray) og ISO 12944-9 anerkender, at deres resultater ikke direkte kan bruges til at forudsige den praktiske holdbarhed i felten. ALT bruges derfor primært til at sammenligne systemer og identificere nedbrydningsmekanismer – ikke til at forudsige levetid.

I nogle tilfælde kan ALT ligefrem fremkalde nedbrydning, der adskiller sig fra det, der sker i praktisk drift. I et CoaST-ledet studie [6] af termisk sprøjtede metalliske (TSM) duplex-coatings – som ellers har vist fremragende langtidsholdbarhed på for eksempel Vilsundbroen og Vindeby havvindmøllepark – skallede belægningen fuldstændig af under en cyklisk ISO 12944-9-test, mens de samme formuleringer kun viste begrænset skade efter reel offshore-eksponering (figur 4). Det rejser en vigtig bekymring: Hvis laboratorietest ikke afspejler virkeligheden, risikerer man at kassere holdbare systemer og vælge dårligere i stedet. Der er derfor brug for en dybere forståelse af, hvordan coatings reagerer på klima for at kunne udvikle testmetoder, der nedbryder coatings på samme måde, som naturen gør.

CoaST Maritime Test Centre (CMTC) i Hundested

Naturlig marin korrosionstest går helt tilbage til 1930'erne, hvor metallurgen Francis L. LaQue startede langtidstudier ved Kure Beach, North Carolina, USA på grund af stedets barske miljø [7] – et sted, der senere blev brugt til at teste rustfri stål til reparation af "Friedsgudinden", New York City, USA. I

dag katalogiserer European Federation of Corrosion 44 tilsvarende eksponeringsstationer i 11 europæiske lande.

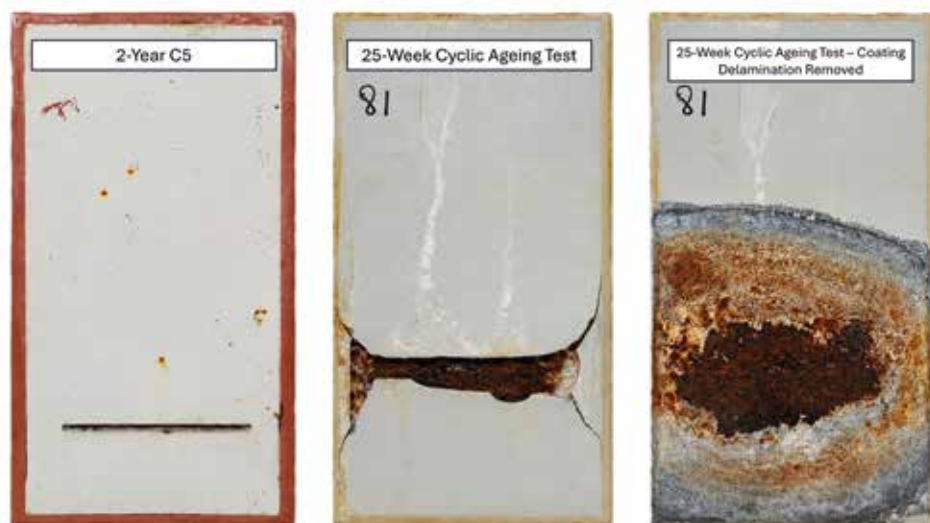
CMTC blev etableret i 2020 på Hundested Havn og bestod oprindeligt af en flydende testplatform primært til undersøgelse af begroingshindrende malinger. For at imødekomme den stigende efterspørgsel omkring korrosionsbeskyttende malinger blev en ny, cirka 120 kvadratmeter stor atmosfærisk eksponeringsplatform sat i drift i november 2025 med plads til nær 2000 testpaneler (150 × 75 mm) til korrosionstests.

Placeringen ved Isefjordens munding gør CMTC til et aggressivt testmiljø: vestlige og sydvestlige vinde fører marine aerosoler ind over stedet efter at have bevæget sig uhindret over Kattegat. Kombineret med en relativ luftfugtighed, der ofte overstiger 80 procent ved temperaturer over 0°C, giver det en forlænget "fugttid" (Time of Wetness) som defineret i ISO 9223 [8]. Det sikrer, at en koncentreret saltelektrolyt bliver liggende på overfladen i stedet for at fordampe, hvilket samtidigt driver vand og ilt ind gennem coatingen og accelererer nedbrydning ved enhver defekt.

Fra felttest til højopløselige data

Traditionelle eksponeringsstationer viser den langsigtede ydeevne, men fortæller lidt om, hvordan og hvornår nedbrydningen sker undervejs. CMTC lukker det hul ved at kombinere langtidseksponering med kontinuerlig miljøovervågning, ikke-destruktiv karakterisering og digital datastyring.

Hos CoaST samles al information om hver prøve i det egenudviklede system Coast-lab, hvor en unik QR-kode giver ▶



Figur 4. TSM-duplex-coatingsystemer efter to års eksponering i Hundested (C5) (venstre billede) sammenlignet med 25 uger i cyklisk ældningstest i henhold til ISO 12944-9 (billeder i midten og til højre).

forskerne adgang til prøvens historik direkte fra felten. Samtidig registrerer stationen temperatur, luftfugtighed, nedbør, vind og solstråling hvert 15. minut, samt klorid- og SO₂-aflejring i henhold til ISO 9225 [9] – data, der lægger grunden til at koble klima og nedbrydning statistisk sammen.

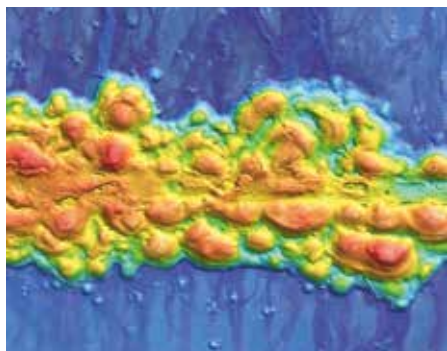
Et andet fokusområde er elektrokemisk impedansspektroskopi (EIS); et helbredstjek af coatingen, hvor en lille vekselspænding afslører nedbrydning, længe før skader bliver synlige. Traditionel EIS kræver dog, at panelet tages ind i et laboratorium og monteres i en væskefyldt testcelle – upraktisk for langtidsforsøg udendørs. I samarbejde med Zagrebs Universitet og ReCorrTech har CoaST derfor taget et overflademonteret EIS-system i brug, hvor sensoren sidder direkte på panelet i felten og løbende afslører begyndende nedbrydning måneder eller år, før den bliver synlig.

Rustunderkryb – hvor langt korrosion breder sig under coatingen fra en ridse i malingen ned til stålet (en kunstig skade) – måles traditionelt ved at skrabe coatingen af og aflæse rustens udbredelse med en lineal (ISO 4628-8 [10]). En destruktiv metode, der kun giver ét datapunkt per prøve. CoaST erstatter den med ikke-destruktive teknikker som 3D-profilometri og infrarød termografi samt en maskinlæringsbaseret billedanalyse, der automatisk måler korrosionen – og giver objektive, reproducerbare data på tværs af mange prøver uden manuelt arbejde.

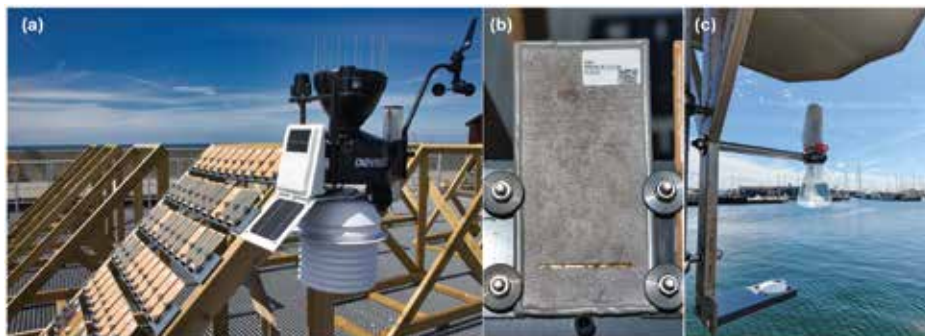
Fremtiden for korrosionstestning ved CMTC

Krav til korrosionsbeskyttelse skærpes: infrastruktur skal holde længere under hårdere forhold, samtidig med at vedligeholdelsesudgifter og miljøpåvirkning skal ned. Det kræver ikke kun nye coatings, men mere pålidelige metoder til at vurdere deres langsigtede holdbarhed.

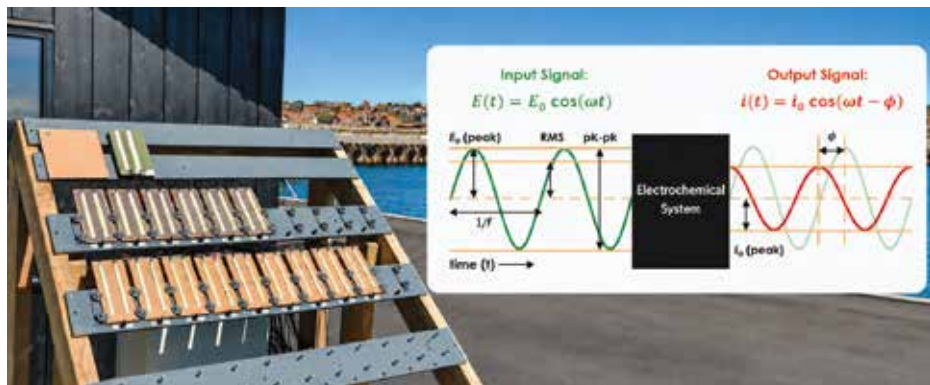
Ved at koble langtidseksponering med kontinuerlig overvågning og digital



Figur 7. 3D-profilometri af rustunderkryb omkring en ridse (kunstig skade).



Figur 5. (a) Vejrstation ved eksponeringsstativ. (b) Coatingprøve med QR-kodemærkat. (c) "Våd væge" og sulfateringsplade til måling af klorid- og SO₂-aflejring.



Figur 6. Overflademonteret EIS-måling på CMTC med den grundlæggende virkemåde.

datastyring gør CMTC hvert coating-panel til en del af et voksende datasæt, der forbinder klima, nedbrydning og ydeevne – og skaber grundlag for bedre præstationsforudsigelser og mere retvisende accelererede testmetoder. Betydningen rækker ud over forskningen: faciliteten uddanner fremtidens korrosionsingeniører, giver industrien en uafhængig testplatform, og styrker Danmarks internationale position inden for marin eksponeringstestning.

Kampen mod korrosion stopper aldrig, men med CMTC er ambitionen at gøre korrosionstestning til en prædiktiv videnskab frem for en bagudskuende vurdering – og dermed bane vejen for mere holdbare og bæredygtige beskyttelsessystemer til fremtidens infrastruktur.

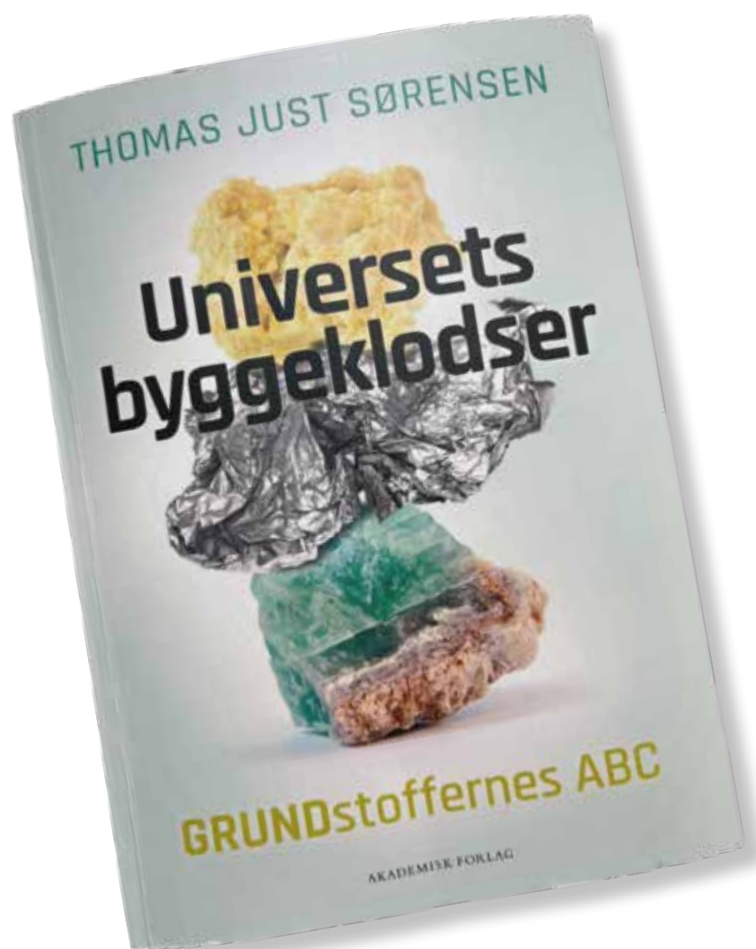
E-mail:

Ziyou Li: ziyulia@kt.dtu.dk

Claus Weinell: cwei@kt.dtu.dk

Referencer

1. E. Bowman, G. Koch, J. Varney, N. Thompson, O. Moghissi, M. Gould, J. Payer, International Measures of Prevention, Application, and Economics of Corrosion Technologies Study, NACE Int. (2016) 1–216. <http://impact.nace.org/documents/Nace-International-Report.pdf?0Apapers3://publication/uuid/9784056A-47E3-4988-8D70-B6763CF35EBF>.
2. M. Iannuzzi, G.S. Frankel, The carbon footprint of steel corrosion, *Npj Mater. Degrad.* 6 (2022) 1–4. <https://doi.org/10.1038/s41529-022-00318-1>.
3. ISO 12944-9:2018 Paints and varnishes –
- Corrosion protection of steel structures by protective paint systems – Part 9: Protective paint systems and laboratory performance test methods for offshore and related structures, in: International Organization for Standardization, Geneva, Switzerland, 2018.
4. ISO 12944-2:2017 Paints and varnishes – Corrosion protection of steel structures by protective paint systems Part 2: Classification of environments, in: International Organization for Standardization, Geneva, Switzerland, 2017.
5. ISO 12944-5:2018 Paints and varnishes – Corrosion protection of steel structures by protective paint systems – Part 5: Protective paint systems, in: International Organization for Standardization, Geneva, Switzerland, 2018.
6. Z. Li, H. Bi, S. Gunnarsson, C.E. Weinell, K. Dam-Johansen, Delamination of thermally sprayed ZnAl15/organic duplex coating systems on structural steel for offshore wind applications, *Surf. Coatings Technol.* 485 (2024) 130796. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2024.130796>.
7. F.L. LaQue, *Marine Corrosion: Causes and Prevention*, John Wiley & Sons Inc, 1975.
8. ISO 9223: 2012 Corrosion of metals and alloys – Corrosivity of atmospheres – Classification, determination and estimation, in: International Organization for Standardization, Geneva, Switzerland, 2012.
9. ISO 9225:2012 Corrosion of metals and alloys – Corrosivity of atmospheres – Measurement of environmental parameters affecting corrosivity of atmospheres, in: International Organization for Standardization, Geneva, Switzerland, 2012.
10. ISO 4628-8:2012 Paints and varnishes – Evaluation of degradation of coatings – Designation of quantity and size of defects, and of intensity of uniform changes in appearance – Part 8: Assessment of degree of delamination and corrosion around a scribe or o, in: International Organization for Standardization, 2012.



Grundstoffer med kant

Thomas Just Sørensen: *Universets byggeklodser*. 283 sider.

Anmeldt af Søren Kiil,
professor, DTU Kemiteknik

Det periodiske system er kemiens rygrad, men for elever og studerende fremstår grundstofferne ofte som en række symboler og tal, der skal læres udenad. Med bogen *Universets byggeklodser* forsøger kemiprofessor ved Københavns Universitet, Thomas Just Sørensen, at gøre det periodiske system levende, forståeligt og relevant, og det lykkes i høj grad.

Bogen er opdelt i tre dele. Første del handler om grundstoffernes historie: Hvor kommer de fra, hvordan er de blevet dannet i universet, og hvordan blev de opdaget? Anden del introducerer det periodiske system og de sammenhænge, der ligger bag dets opbygning. Tredje del gennemgår samtlige 118 grundstoffer ét efter ét. Hvert opslag fungerer som en selvstændig historie med en krog, et

blikfang og en pointe, hvilket gør det let at læse bogen både fra ende til anden (måske med ét grundstof om dagen) og som opslagsværk.

Forfatterens ambition er tydelig: Kemi, kvantekemi og beslægtede emner skal gøres mindre mystiske og mere tilgængelige. Bogen henvender sig umiddelbart til studerende og den nysgerrige læser, men den vil efter min vurdering også fungere fint som supplerende opslagsværk i gymnasiet. De mange farveillustrationer, som findes på stort set alle sider, bidrager til en flot og indbydende læseoplevelse.

En af bogens styrker er fokus på grundstoffernes praktiske betydning, både historisk og i vores moderne samfund. Er man interesseret i naturvidenskab, er de mange små historier særdeles underholdende. Man kan for eksempel læse om bor som en nødvendig "forurening" i computerchips eller

om tins afgørende rolle i fremstillingen af vinduesglas, hvor glasset produceres oven på et bad af flydende tin!

Jeg ser især bogens værdi som et supplement til mere traditionel kemiundervisning, hvor fokus ofte er på teorier, strukturer og reaktioner, mens grundstoffernes historiske og samfundsmæssige betydning fylder mindre. Thomas Just Sørensen formår først og fremmest at vække læserens nysgerrighed. Samtidig minder bogen os om, hvor bemærkelsesværdigt heldige vi er, at de grundstoffer, som vores teknologiske samfund er afhængigt af, i store træk er tilgængelige på vores planet.

Afslutningsvis er det værd at nævne, at Thomas Just Sørensen også står bag *Det Periodiske System-spil*. Er du klar til at dyste?

E-mail:
Søren Kiil: sk@kt.dtu.dk

NYHED HAIER CENTRIFUGER



Kontakt
Produktspecialist
Brian Slovic-Petersen
Tlf. 4326 9407
bsp@holm-halby.dk

Holm & Halby tilbyder nu Haier centrifuger, et af markedets
nyeste og mest komplette centrifugeprogrammer.

Serien omfatter centrifuger i topklasse til alt
fra rutineanalyser til avanceret brug.

– alle i High og Low speed, og med et stort udvalg af tilbehør.

- Gulvcentrifuger
- Generelle og kompakte bordcentrifuger
- Blodbankcentrifuger
- Mikro- og minicentrifuger

Læs mere om
Haier centrifuger her



Haier

