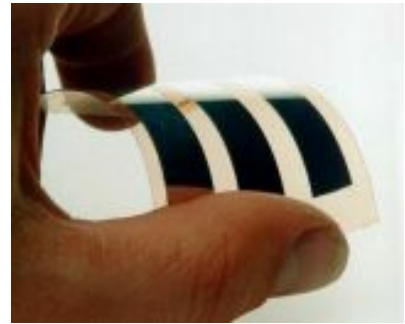
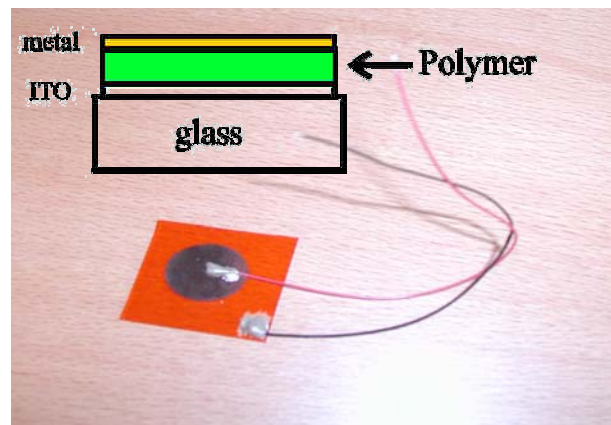


## Projekt: Organiske solceller

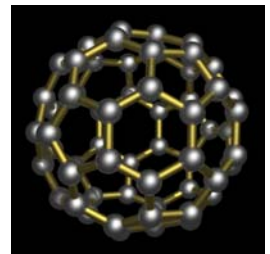
**Ide:** Solceller leverer ”gratis”, forureningsfri energi. Derfor produceres de allerede i dag i store mængder, specielt de velkendte silicium-baserede typer. Hvis energiproduktionen fra en solcelle kunne gøres billigere end produktion vha. fossilt brændsel eller vindmøller ville det selvfølgelig få enorm betydning for solcellens udbredelse. Et alternativ til traditionelle solceller er organiske solceller, hvor en halvledende polymer udgør det aktive medium. Fremstilling af polymer-celler er baseret på simpel spin-coating og kan derfor blive langt billigere end Si-krystaldyrkning med efterfølgende dotering osv. Målene i projektet er flg: (1) Fremstilling og karakterisering af organiske solceller, og (2) opstilling af en kvantemekanisk model til beskrivelse af cellerne.



**Fremstilling og karakterisering:** Polymer-cellerne opbygges som vist på figuren, hvor plastlaget placeres mellem en metalelektrode og en ITO (Indium-Tin-Oxid) elektrode. Elektroderne tjener til at skabe det elektriske kredsløb. Selve polymerlaget skal være ca. 100 nm tykt og helst være godt til at absorbere sollys. Når en foton fra solen absorberes, skabes et såkaldt elektron-hul par, hvor et ”hul” betegner den manglende elektron i halvlederens valensbånd. Solcellen fungerer ved, at elektroner i elektron-hul parret (1) opsamles af metalelektroden, (2) løber gennem det ydre kredsløb, og (3) genforenes med ”hullet”, der i mellemtiden er blevet opsamlet af ITO-elektroden. Et problem er her, at det er svært at skille et elektron-hul par ad. Til det formål tilsættes  $C_{60}$  molekyler, der ”suger” elektroner til sig, således at hullet kan slippe væk. Efter en vis tid undslipper elektronen igen fra  $C_{60}$  molekylet, og den kan derfor vandre gennem materialet. Udover måling af virkningsgraden i solcellen, vil det være målet at opstille forsøg, der kan forklare virkemåden i cellen. Desuden vil vi prøve at optimere de forskellige parametre (tykkelse,  $C_{60}$  koncentration osv.) i solcellen.



**Modellering:** Beskrivelsen af en solcelle foregår på to niveauer: Dels kan en klassisk model forklare de elektriske egenskaber såsom strøm og spænding i forskellige situationer, og dels kan en kvantemekanisk model forklare, hvad der sker i dannelsen af elektron-hul parret og i opsplitningen vha.  $C_{60}$ . I kvantemekanik-kurset for I nogle værktøjer til at regne på molekyler, og det er tanken i projektet, at I skal bruge dem på  $C_{60}$  molekylet, og måske lave et program, der kan beregne kvanteniveauerne i alverdens organiske molekyler.



**Litteratur:** I kan låne ”The Physics of Solar Cells”, J. Nelson (Imperial College Press). Kig desuden på <http://www.ipc.uni-linz.ac.at/os/plastic/page2.html>

**Forslagsstiller:** Thomas G. Pedersen

## Projekt: Superhydrofobe overflader

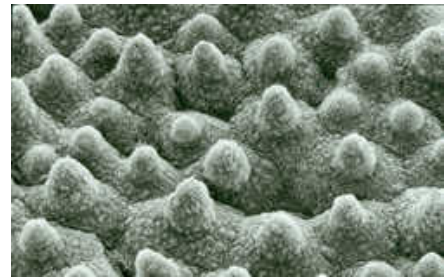
**Ide:** Betegnelsen ”superhydrofob” dækker over overflader, der fuldstændig afviser vand. Vanddråber forbliver derfor kugleformede, som vist på figuren. Det betyder, at vandet ikke bliver hængende på en bil, et slips eller et vindue, hvis det er præpareret med et superhydrofobt overfladelag. Når dråberne ruller af overfladen har de ydermere tendens til at samle støv osv., sådan at overfladen bliver selvrensende. Det grundlæggende princip bag superhydrofobe overflader er dannelsen af en passende nanostruktur. Hvis overfladen er nanostruktureret, som vist herunder, vil vanddråben kun røre underlaget på toppen af ”bjergene”. Faktisk kan det areal, hvor vandet har kontakt til underlaget, være nogle få procent af hele det areal, som dråben dækker. Målene i projektet er at skabe superhydrofobe overflader på forskellige måder, samt at måle deres egenskaber. Projektet vil desuden involvere firmaet ”Fibertex”, der ønsker at producere superhydrofobe plastfibre.



**Fremstilling og karakterisering:** I projektet vil vi frembringe superhydrofobe overflader med to metoder: Dels vil vi prøve at eftergøre resultaterne fra en artikel, der kan findes på <http://www.physics.aau.dk/~tgp/superhydrophobic.pdf>.

Desuden vil vi forsøge med BASF's kommercielle ”Lotus-effect®” spray, som efterligner lotus-plantens superhydrofobe blade. I den første metode er udgangspunktet dråber af opløst plast, der kan danne en nanostruktur, hvis fjernelsen af opløsningsmidlet sker kontrolleret i en vakuumovn.

I den anden metode dannes nanostrukturen af den suspension af voks og opløst plastik, som (vist nok, det er hemmeligt) findes i BASF's produkt. Til karakterisering af overfladerne skal bygges en opstilling med kamera og computer til måling af dråbernes kontaktvinkel med underlaget. Desuden kan vi bruge AFM og SEM til at studere nanostrukturen.



**Litteratur:** udover artiklen <http://www.physics.aau.dk/~tgp/superhydrophobic.pdf> findes mange gode forklarende websites, bla. [http://www.botanik.uni-bonn.de/system/bionik\\_flash\\_en.html](http://www.botanik.uni-bonn.de/system/bionik_flash_en.html). Desuden er de fysiske principper og de forskellige teknikker godt forklaret i <http://home.wanadoo.nl/scslai/lotus.docT>.

**Forslagsstiller:** Thomas G. Pedersen

## Katalytisk dyrkning af nanowires i UHV

En-dimensionale nanostrukturer har en lang række potentielle anvendelser som byggesten for fremtidens nanoskala elektroniske og optiske komponenter. Den cylindriske geometri og stærke begrænsning i elektroner, hullers og fononers bevægelse på tværs af trådene åbner muligheder for at skrædersy egenskaber på en måde, som ikke kendes fra makroskopiske materialer. Nanotråde undersøges derfor med henblik på at bygge transistorer med et aktivt tværsnitsareal på nogle få  $\text{nm}^2$ , ultra-følsomme sensorer, aktive optiske komponenter (lasere, detektorer) mm.

En meget effektiv metode til dyrkning af tråde er at benytte nanometer metalpartikler til at katalysere væksten. I dette projekt skal der opbygges et såkaldt UHV (ultra-højt vakkum) vækstkammer, hvor både metalpartiklerne, fx Au, og trådene, fx Si, dyrkes under velkontrollerede forhold. Materialerne tilføres en prøve fra fordampere (PVD) eller ved hjælp af laser sputtering af materialet fra et bulk materiale med den ønskede sammensætning.

Projektet kan indeholde følgende faser:

### Opbygning af UHV system

- Der skal opbygges et UHV kammer med tilhørende pumper, trykmåling, temperaturstyring, fordampere mm.

### Fremstilling af metalpartikler på overfladen

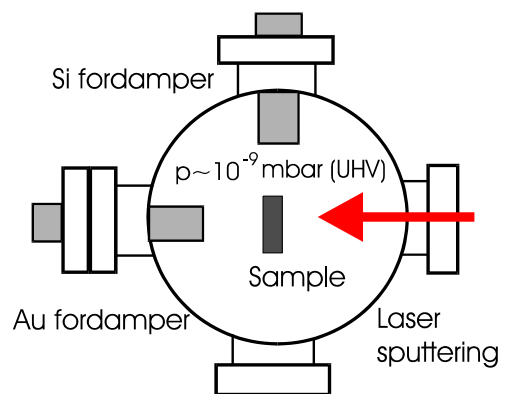
- Optimering af størrelser (fx temperatur)
- Karakterisering med AFM, SEM

### Dyrkning af tråde

- Procesparametre
- Karakterisering med SEM

På den teoretiske side kan der fx arbejdes med vækst af nanopartikler på overflader samt elektroniske egenskaber i lavdimensionale strukturer.

**Forslagsstiller:** Kjeld Pedersen



## Nanoporøse Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> templates til dyrkning af nanostrukturer

Porøse oxider har en lang række anvendelser til fremstilling af elektroniske, optiske og magnetiske nanostrukturer, samt som filtre til sortering af nanopartikler. Sådant anodisk oxidering af aluminium fører til porer med høj grad af homogenitet i diameter og form. Gennem styring af procesparametrene kan porøsiteten og pore diameteren styres inden for vide rammer (se figuren). Under passende betingelser vil processen endda være selvorganiserende, så hullerne danner et velordnet, typisk hexagonalt, mønster.

Arbejdet med projektet kan indeholde 3 elementer.

Fremstilling af nanoporer

- Optimering af procesbetingelser
- Kontrolleret variation af pore størrelser
- Frigørelse af porøst lag

Karakterisering

- AFM
- SEM
- Optisk (mikroskopi og spektroskopi)

Nanoporer som templates

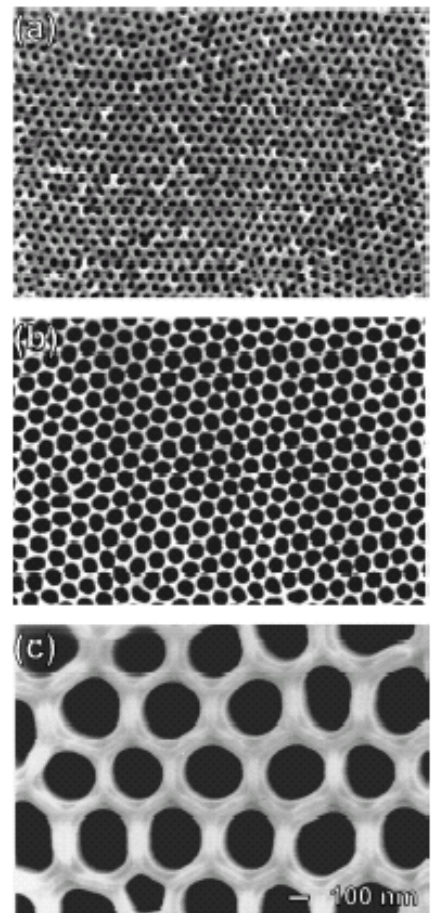
- Dyrkning af nanowires (fx Au eller Ag)
- Fluorescens på molekyler i porer

På den teoretiske eller forståelsesmæssige side kan man fx arbejde med selvorganiserende strukturer, optiske egenskaber af periodiske strukturer, fluorescens fra molekyler i små kaviteter mm.

Litteratur:

Applied Physics Letters, vol 72, side 1173  
Journal of Applied Physics vol. 84, side 6023

**Forslagsstiller:** Kjeld Pedersen



*Hexagonale strukturer af huller dannet under forskellige procesbetingelser.*

# FOOD ON NANOLEVEL

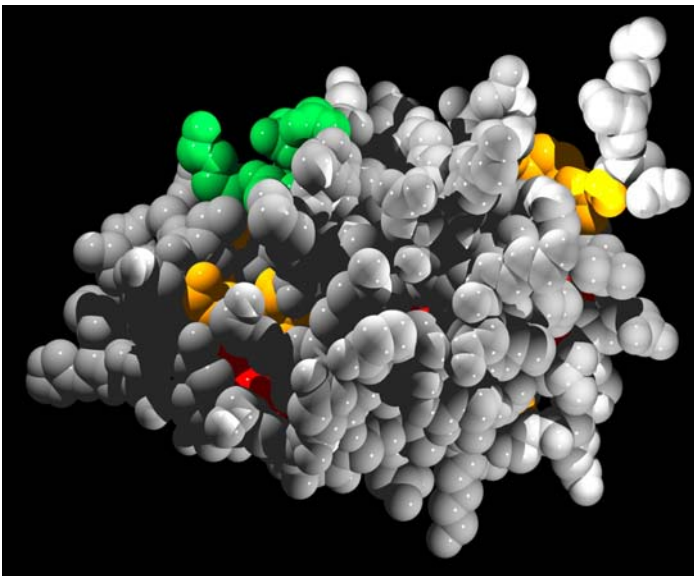
## ANALYSING CONFORMATIONAL PROPERTIES OF $\alpha$ -LACTALBUMIN IN SOLUTION AND ON 2D-SURFACES

Supervisors: Jane Bjerregaard Kristensen, Peter Fojan and Steffen B. Petersen

To accommodate for the increasing demand for food with improved nutritional, nutraceutical and functional properties, much effort has been invested in examining applicability of whey proteins in food products. Whey proteins are currently employed in several victuals, such as yoghurt, ice cream, bread, chocolate, infant formulae, protein beverages and numerous low-fat products. Evidently, each product requires specific textures, such as foam, emulsion or gels, containing nanometer to micron scale structures. This then implies different demands for aggregational properties of the nanosized building blocks, the whey proteins.

It is therefore of interest to describe the aggregation procedure in such detail that a nanosized texture may be specifically designed for a given purpose. This implies information on the influence of physical parameters on protein attraction vs. repulsion, providing further insight into the molecular communication between proteins controlled by hydrogen-bonds, long-range forces, i.e. electrostatic interactions, and short range forces, i.e. hydrophobic interactions.

$\alpha$ -La ( $M_w$  14.2 kDa) is naturally present in milk and constitutes one of the main proteins in whey. The physiological role of  $\alpha$ -La is to support the biosynthesis of lactose in milk through regulation of the lactose synthase process, which is the final step in lactose biosynthesis. Hence,  $\alpha$ -La plays an important nutritional role but is additionally widely used as a simple model for  $Ca^{2+}$  binding. At pH below pI ( $\sim 4$ )  $\alpha$ -La becomes positively charged and consequently  $Ca^{2+}$  is released from the protein. This renders  $\alpha$ -La in a molten globule state with significantly altered structural and physical properties.



The aim of this project is to investigate the effects of physical parameters on the conformational properties of  $\alpha$ -Lactalbumin at pH below and near pI.

The physical parameters investigated could be temperature, pH and addition negative ions (e.g.  $Cl^-$ ,  $SO_4^{2-}$  and  $PO_4^{3-}$ ). The conformational effects could then be investigated by fluorescence

spectroscopy, fluorescence confocal microscopy, IsoThermic Calorimetry (ITC) and/or dynamic light scattering (DLS).

Fluorescence spectroscopy provides a highly sensitive and reproducible technique to obtain information regarding tryptophan fluorescence, light scattering, quenching and binding of the hydrophobic probe ANS. In addition, conformational properties of  $\alpha$ -lactalbumin at air/water interfaces might be obtained by this technique, simply by recording spectra of proteins adhered to a quartz plate. This contributes to an understanding of protein structure in solution versus at surfaces, i.e. is the protein native folded at an interface.

Through fluorescence confocal microscopy spatial information is achieved, thereby providing a three-dimensional understanding of the nanostructured aggregates. This is accomplished by dividing the volume into smaller grids. Hence, this approach would provide knowledge of the spatial location of proteins in the aggregates under various conditions and is therefore considered a supplementary technique to the usual spectroscopy methods.

Information on the affinity of  $\text{Ca}^{2+}$  binding could be acquired through ITC. Hereby, the affinity constant is determined from heat generated upon  $\text{Ca}^{2+}$  binding to the protein.

Through DLS fluctuations in intensity of scattered light is determined, which provides information regarding diffusion coefficient and molecular movements, i.e. aggregation.

ARLA is a partner on this project

# Developing a Micrometer Sized Biosensor using Light Assisted Immobilisation of the Sensor Protein Molecules as well as lithographic methods.

## Supervisors:

Steffen B. Petersen  
Teresa Neves Petersen  
Tonni Rasmussen

## Technologies involved:

*Bioinformatics, Molecular Modelling,  
Light Assisted Immobilisation, Data Acquisition,  
Voltametric Detection, Photon Detection*

## Project Description:

In the continued quest to reduce the size of a generic biosensor a selected enzyme will be immobilized onto a silicon wafer using a tightly focussed UV beam. We anticipate that we can create micrometer sized areas with immobilized enzyme. We will use our bioinformatics tools including molecular modelling to identify an enzyme molecule that directly or indirectly will generate hydrogenperoxide ( $H_2O_2$ ) and which has the necessary amino acid configuration for light assisted immobilisation. The released  $H_2O_2$  will give rise to electron release, which can be detected voltametrically or there is a possibility that the  $H_2O_2$  can be detected using *luminol*, that is known to emit blue light in response to  $H_2O_2$  under suitable chemical conditions with very high quantum efficiency. Visual photons can be detected with light sensitive diodes. We will construct both the biosensor, detector system as well as data processing as part of the project.

Initially we will develop a proof of concept biosensor platform, and test for enzyme activity as well as amount of immobilised enzyme. After the basic functionality has been confirmed, we will downsize the platform to the micrometer range.



*The figure to the left shows the chemical Luminol emitting blue light in response to the addition of Hydrogen Peroxide*

*The figure to the right shows the inlet of fluid into the biosensor cavity (left, cyan) the two biosensor plates (green and blue), the immobilised molecules on the top plate (white) and the photon detector (pink).*

