

KJEMINYTT

KJEMISK INSTITUTT
Universitetet i Bergen

Nr. 3
2009

Personale



Nye ansatte:



Irene Skaar er tilsatt som universitetsstipendiat i kjemi for fire år med virkning fra 17. august. Veileder er professor Øyvind M. Andersen.

Fredrik Rosberg Hansen er tilsatt som universitetsstipendiat i kjemi for fire år med virkning fra 24. august. Veileder er professor Vidar R. Jensen.



Dr. Nicolas Merle er tilsatt som NFR postdoktor for 2 år med virkning fra 16. juli. Stillingen er knyttet til et GASSMAKS-støttet prosjekt rettet mot polymerisasjon av funksjonaliserte olefiner - prosjektleder professor Vidar R. Jensen.

Gregory Johnson begynte i stilling som universitetsstipendiat for fire år med oppstart den 22. september. Veileder er professor Hans-René Bjørsvik.



Slutter:

Toril Haugland slutter i sin stilling som universitetsstipendiat med virkning fra 01.01.10.

Forskning



Master of Science **Shiva Talatori** disputerte onsdag 7. oktober for PhD-graden ved Universitetet i Bergen med avhandlingen: *Kinetics of gas hydrate formation in the presence of crude oil*



Veiledere var: professor Tanja Barth og dr. philos Per Fotland Statoil/Hydro.



Professor **Karl W. Törnroos** er innvilget forskningstermin høsten 2010.

Professor Olav M. Kvalheim er innvilget forskningstermin for perioden høst 2010 og vår 2011.



Professor Leiv K. Sydnes vil 1. november 2009 tiltre en 20% bistilling som seniorforsker ved NORUT i Tromsø. Stillingen er knyttet opp mot marin bioprospektering og vil være for en treårs-periode.

Hovedoppgavene vil være fokusert om nyetabling av virksomhet rettet mot organisk kjemi/bioteknologi.

Publikasjoner

Le Roux, E.; Anwander, R. *Surface Organolanthanide and – Actinide Chemistry*, in *Modern Surface Organometallic Chemistry* (Eds.: Basset, J.-M.; Psaro, R.; Roberto, D.; Ugo, R.), VCH Verlagsgesellschaft mbH, Weinheim, 2009, pp. 455–512.

Michel, O.; Meermann, C. ; Törnroos, K. W.; Anwander, R. *Alkaline-Earth Metal Alkylaluminum Chemistry Revisited. Organometallics* **2009**, *28*, 4783–4790.

Chau F.-T.; Chan H.-Y.; Cheung C.-Y.; Xu C.-J.; Liang Y.; Kvalheim O.M. *Recipe for Uncovering the Bioactive Components in Herbal Medicine Analytical Chemistry*, **2009**, *81*, 7217-7225.

Stensen, W.; Haug, B.E.; Rekdal, Ø.; Svendsen, J.S. *Preparation of tripeptide amides as antimicrobial agents*. Patent WO2009081152.

Kleinert, M.; Gasson, J. R. ; Barth, T. *Optimizing solvolysis conditions for integrated depolymerisation and hydrodeoxygenation of lignin to produce liquid biofuel*. *J. Anal. Appl. Pyrol.* **2009**, *85*, 108-117.

Occhipinti, G., Jensen, V. R.; Törnroos, K. W.; Frøystein, N. Å.; Bjørsvik, H.-R. *Synthesis of a new bidentate nhc–ag(i) complex and its unanticipated reaction with the hoveyda-grubbs 1st generation catalyst*. *Tetrahedron* **2009**, *65*, 7186–7194.

Minenkov, Y.; Occhipinti, G.; Jensen, V. R. *Metal–ligand bond strengths of the transition metals. A challenge for DFT*. *J. Phys. Chem. A*. ASAP 10.1021/jp902940c.

Presentasjoner – konferanser

Foredrag

Manne, R. *PLS - a personal view*. SSC 11 - *Scandinavian Symposium on Chemometrics*, Hotell Alexandra, Loen, June 10, 2009.

Barth, T.; Kleinert, M.; Gasson, J. R.; Hilmen, A.-M. *Developing solvolytic conversion of lignin to liquid (LiL) fuel components: Optimisation of quality and process economical factors*. *17th European Biomass Conference*, Hamburg, June 29 - July 3, **2009**.

Kleinert, M.; Wittmann, T. *Carbonisation of biomass using a hydrothermal approach: State-of-the-art and recent developments*. *17th European Biomass Conference*, Hamburg, June 29 - July 3, **2009**.

Bjørsvik, H.-R.*; Liguori, L. *Olefin Metathesis in Continuous Flow using the Novel MJOD milli-reactor Technology*. The 18th International Symposium on Olefin Metathesis and Related Chemistry. ISOM XVIII. August 2-7, 2009, Leipzig, Germany.

Occhipinti, G; Jensen, V. R.*. *The nature of the metal-alkylidene bond in Grubbs catalysts for olefin metathesis*. The 18th International Symposium on Olefin Metathesis and Related Chemistry. ISOM XVIII. August 2-7, 2009, Leipzig, Germany.

Kvalheim O.M., *Revealing the crucial information in instrumental profiles acquired on complex multicomponent systems*, *Conferentia Chemometrica* 2009, Siofok, Ungarn, September 27-30, 2009.

Occhipinti, G; Jensen, V. R.*. *The nature of the transition metal-alkylidene bond in Grubbs catalysts for olefin metathesis.* Computational Chemistry Autumn Meeting 2009, Bergen, Norway. October 12-13, 2009.

Holme, A.; Børve, K. J.; Sæthre, L. J.; Darrah Thomas, T. *Accurate Calculation of Chemical Shifts in Carbon 1s Ionization Energies.* Computational Chemistry Autumn Meeting 2009. Bergen, Norway. October 12-13, 2009.

Minenkov, Y.; Occhipinti, G.; Jensen, V. R.*. *Accurate Enthalpies and Free Energies of Activation for Phosphine Dissociation in Grubbs' Olefin Metathesis Catalysts.* Computational chemistry autumn meeting 2009. Bergen, Norway. October 12 - 13, 2009.

Olsson, E.; Martínez, A; Teigen, K; Jensen, V. R.*. *Dioxygen in aromatic amino acid hydroxylases.* Computational Chemistry Autumn Meeting 2009. Bergen, Norway. October 12-13, 2009.

Heyndrickx, W.; Occhipinti, G; Jensen, V. R.*. *The polar functional group tolerance of transition metal catalysts for olefin polymerization.* Computational Chemistry Autumn Meeting 2009. Bergen, Norway. October 12-13, 2009.

Poster

Olsson, E.; Martínez, A; Teigen, K; Jensen, V. R.*. *Catalytic cycle of phenylalanine hydroxylase.* International congress of quantum chemistry 2009. Helsinki, Finland. June 22-27, 2009.

Tsoukala, A.; Liguori, L.; Occhipinti, G.; Bjørsvik, H.-R.* *A Green and Efficient Bromination Process.* 10th Tetrahedron Symposium Challenges in Organic and Bioorganic Chemistry June 23-26, 2009, Paris, France.

Spaccini, R.; Liguori, L.; Punta, C.; Bjørsvik, H.-R.* *Selective epoxidation of alkenes in continuous flow using the novel multi-jet oscillating disk milli-reactor system.* ACS Hungary 2nd short course on

the frontiers in organic synthesis (FROST2) "Progress in Flow Chemistry". October 14-15, 2009, Budapest, Hungary.

Presentasjoner på andre møter

Manne, R. *Atomene på 1800-tallet.* Norsk kjemisk selskap, Bergen avdeling. 26. mai 2009.

Kvalheim O.M., *Global temperatur i et totusensårs perspektiv – Hvorfor feiler IPCCs klimamodeller,* Universitetet på Karl Johan (urbygningen), Oslo, 10. oktober 2009.

Manne, R. *Success and failure. On the history of the Norwegian Electrochemical Industry.* 14th International Congress of The International Committee for the Conservation of Industrial Heritage (TICCIH), Freiberg, Germany. August 31 2009.

Aktuelt



Yaras Birkeland Pris

Dr. Melanie Zimmermann er tildelt Yaras Birkeland Pris for sitt doktorgrads-arbeid som er gjennomført ved Kjemisk institutt. Ytterligere informasjon kan finnes på [www](http://www.dnva.no) lenker:

<http://www.dnva.no/>

<http://www.dnva.no/nyheter/vis.html?tid=41441>



Juryen sin begrunning for tildelingen:

"This year, the Birkeland prize will be awarded to an outstanding PhD dissertation in chemistry, subject to the constraint that it was presented and evaluated at a Norwegian university in 2007 or 2008. Six PhD theses were nominated for the award, all of which combine high scientific quality with an unquestionable potential for technological applications. This has presented an interesting and complicated task to the evaluation committee.

The nominees were: Øyvind Borg, with the thesis "Role of alumina support in Cobalt Fischer-Tropsch Synthesis", Jasmina Hafizovic with "Synthesis and characterization of metal-organic frameworks with potential applications in gas adsorption and catalysis", Isabella Inzoli with "Coupled transport of heat and mass at the surface of and inside silicalite", Giovanni Occhipinti "Theory-assisted prediction and synthesis of Ru-alkylidene complexes for olefin metathesis", Tina Puntervold on "Waterflooding of carbonate reservoirs – EOR by wettability alteration", and Melanie Zimmermann with "Rare-Earth Metal Alkyls."

The central selection criterion is to what extent a PhD dissertation is conducted in the spirit of Kristian Birkeland. Birkeland was first and foremost an enthusiastic and very accomplished scientist. His research was of world-class as evident from his seven nominations for the Nobel prize. Birkeland was concerned with fundamental issues in contemporary physics, most notably Aurora borealis, which in turn led to studies of strong electric currents under controlled conditions. The need to fund expensive experiments led him to look for technological applications for his insight of basic phenomena. History shows how difficult it is to guess where the technological potential of fundamental research lies – his electrical cannon was rather unsuccessful, and Birkeland were looking for ways to avoid electrical discharge. His fortunate meeting with Sam

Eyde revealed a huge technological potential in actually creating and controlling the very phenomenon he had been trying to get rid of, now as a mean for fixating nitrogen from air!

The winner of Yara's Birkeland award in physics and chemistry for 2009 has composed a thesis that is outstanding both in terms of quality and volume. The thesis comprises 8 research papers which are all published in leading scientific journals – what in the Norwegian system is referred to as 'level-2' journals. The prize winner is the first author of all eight papers and has on the average three co-authors. The thesis also comprises an extensive summary of this particular field of chemistry, soon to appear in Chemical Reviews.

The PhD project entails a fundamental study of synthesis routes, stability and chemical properties of alkyl complexes of the lanthanides – a class of compounds which hitherto have had status as model systems in olefin polymerization but which also catalyze various industrially important reactions such as hydroamination, hydrosilylation and activation of C-H bonds. The thesis work has provided new fundamental insight to the structure-reactivity relationship for these compounds, which in turn has led to new and very active catalysts for polymerization. A particular highlight is isolation and structural characterization of a cationic complex that constitutes a single-site catalyst for making synthetic rubber.

The prize winner received her basic training in chemistry at TU Munich, while the PhD project was carried out at the Department of Chemistry, at the University of Bergen, and under the tutelage of Prof. Reiner Anwander. As a cursory remark, it may be mentioned that the prize winner spent 3 months with Norsk Hydro at Porsgrunn as part of her diploma work – in this particular sense this award constitutes closure of her formal training as a scientist. The Yara Birkeland prize in chemistry and physics

for 2009 is hereby awarded to Dr. Melanie Zimmermann!"

*Acceptance Speech for the "Birkelandpris"
by Melanie Zimmermann
Oslo, 24. September 2009*

God kveld, mine damer og herrer, Ladies and gentlemen, distinguished guests,

It is a great honor to have been selected to receive the first "Birkeland award" in chemistry and to be part of tonight's Birkeland lecture.

For a young scientist - still at the very beginning of a scientific career- this is a meaningful moment.

Realizing that one's contribution to the field of chemistry -as little as it may be- has been recognized and honored with an award is deeply touching.

The first time Kristian Birkeland crossed my path was during my time at the Norsk Hydro research center in Porsgrunn. All summer students were invited to attend a most interesting lecture on the history of the company and later on had a guided tour through the fertilizer production plants.

The Birkeland-Eyde method for nitrogen fixation and the production of potassium nitrate clearly is one of Kristian Birkeland's main discoveries with a tremendous impact on society.

Having a closer look into Birkeland's career it however turns out, that he has not always been as successful. Thinking of the failed demonstration of his electromagnetic gun illustrates Birkeland's most distinctive characteristics.

Failure would not leave him frustrated and devastated but his creative imagination immediately saw the meaning of the unexpected result of this experiment.

This attitude might be one of the most important ingredients to successfully performing research.

During the 3 years working on my PhD thesis I experienced many phases affected by negative results and I was very often

struggling to keep my spirit up. But after all, combining the pieces of information obtained from those seemingly negative experiences made me see the overall picture more clearly and resulted in the discovery of unexpected, novel and exciting things. Exactly this is the fascination of science and it is an experience that is truly rewarding.

A PhD thesis is not the result of a single EUREKA event but put together by bits and pieces. Many people contributed in various manners.

It would be evening filling to mention each single person. But there is some few I owe special thanks.

First of all my thanks go to my parents. Both scientists themselves they introduced me to the fascinating world of chemistry and physics at a very early stage. Until today, they are my most important mentors not only professionally.

Special thanks go to Christian who contributed with many fruitful discussions and commemorative talks.

I was lucky enough to have extraordinary teachers and supervisors who would encourage me throughout the years. Many names should be mentioned at this point but I want to especially name my PhD advisor Prof. Reiner Anwander and thank him for his never ending patience, support and inspiration.

I would like to thank all my colleagues and friends at the University of Bergen and the Department of Chemistry in specific for providing a great scientific environment.

Birkeland was very effective in funding his research projects. There is definitely still a lot we could learn here. The successful completion of my thesis was however very much dependent on external funding. Here I am deeply indebted to the Department of Chemistry at UiB, the NRF, the German Science foundation, and the Bayerische Forschungstiftung.

Finally, my deepest and sincere thanks go to the Birkeland committee who selected my thesis and found it in line with the spirit of Kristian Birkelands work. Moreover my sincere thanks go to Yara who generously funded this award.

While feeding the growing world population was an important issue at Birkelands lifetime, we are currently facing severe issues like global warming and the shortage of fossil energy resources.

May this award encourage many young scientists here in Norway and all over the world to use their creativity and ideas to contribute to technical innovations that help to preserve this planet for future generations.

May this award further increase the public awareness and so the public support of science.”

Årets foreleser ved Det matematisk - naturvitenskapelige fakultet



Professor Knut Børve er tildelt årets foreleserpris ved Det matematisk -naturvitenskapelige fakultet. Prisen deles ut av Realistutvalget ved universitetet. De

nominerer og kårer vinneren etter forslag fra de ulike fagutvalgene på instituttene.

Ytterligere informasjon kan finnes på www følgende lenker:

http://nyheter.uib.no/?modus=vis_nyhet&id=44660

<http://www.nrk.no/nyheter/distrikt/hordaland/1.6806415>

Gjesteforelesning

Professor Troels Skrydstrup, The Center for Insoluble Protein Structures (inSPIN), Department of Chemistry and the Interdisciplinary Nanoscience Center, University of Aarhus,



Denmark besøkte Kjemisk institutt og gav i to forelesninger i SEMINAR IN ORGANIC CHEMISTRY / SYNTHESIS den 1. og 2. oktober. Forelesningene *New Developments in C–C and C–Si Bond Forming Reactions* og *Recent Applications of Radical Chemistry to Peptide Analogue Synthesis*

UTLYSNING AV FAKULTETETS LEGATER OG FOND FOR 2010

Fristen for å søke om midler fra de fakultetsspesifikke legater og fond er 1. desember 2009 for tildeling av midler for 2010. Beløpene som stilles til rådighet for de forskjellige legater og fond blir ikke vedtatt av universitetsstyret før i februar 2010, og det kan derfor bli justeringer i forhold til beløpene som er anslått nedenfor, som er tildelingene for 2009.

- Felleslegat for geofysisk forskn. **58 100,-**
 - Overlege Klaus Hanssens legat **5 100,-**
 - Bergen Myrdrkningsfor. fond **74 700,-**
 - Hans B. Fasmers fond **88 800,-**
 - Joachim Frieles legat nr. 1 **14 000,-**
 - Heiberg og H.B.Fasmers fond **29 000,-**
 - Det alm. naturvit. forskn.fond. **110 400,-**
 - Johan Lothe og hustrus legat **8 300,-**
 - Felles legat til fordel for biologisk forskning **110 400,-**
- Sum: 499 500,-**

[Søknadsskjema](http://www.uib.no/filearchive/soknadsskjema)

http://www.uib.no/filearchive/soknadsskjema_12.pdf

Haustmøte i NKS's faggruppe for beregningskjemi

Det årvisse nasjonale møtet i reknekjemi vart arrangert i Bergen 12. og 13. oktober, nærare bestemt på ærverdige Grand Hotel Terminus. Møtet er hovudaktiviteten i den nystarta *Faggruppa for beregningskjemi* innan Norsk Kjemisk Selskap og inneheld også årsmøtet i faggruppa. Etter solid administrativt forarbeid av Hege kunne professor Knut Børve ynskje dei 51 deltakarane hjarteleg velkomne til eit spennande program med fire spesielt inviterte føredragshaldarar frå det store utland og 16 bidrag frå kongeriket.

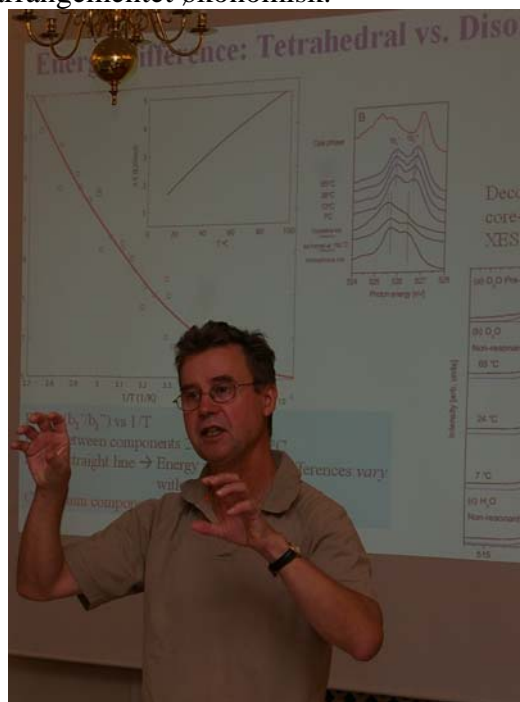
Første dag innleia professor David Tozer frå Durham og Dr. Johannes Neugebauer frå Leiden kvar sin sesjon om nyvinningar i tettleiksfunksjonalteori ved å diskutere høvesvis elektroniske overgangar med ladningsoverføring og modellering av store molekyl gjennom ved å sjå dei som ei samling av vekselverkande delsystem. Førsteamanuensis Roar Olsen, som er nyttilsett ved Høgskolen i Akershus, gav ein løfterik rapport frå nøyaktig kvantedynamisk modellering av kinetiske storleikar for overflatereaksjonar. Etter ein lang dag i føredragssalen fekk forsamlinga omvisning på Bryggen og ein interessant presentasjon av Rosenkrantzårnets varierte historie.

Dagen etter opna professor Lars Pettersson frå Stockholms universitet det faglege programmet med ein oversikt over elektronspektroskopiske studiar som har gitt ny forståing av vatnet sin struktur, dvs korleis molekyla er organisert i flytande fase. Pettersson og medarbeidarar hevdar at



Professor Knut Børve ynskje deltakarane velkomne

vatn består av ei dynamisk jamvekt mellom to typar domene, kor det eine er is-liknande og har molekyla ordna i eit optimalt hydrogenbindingsnettverk, medan det andre domenet er karakterisert av høgare tettleik, fleire men svakare hydrogenbindingar og høgare entropi. Deretter fylgde professor Walter Thiel frå Max-Planck instituttet i Mülheim opp med ein imponerande oversikt over modellering av enzymatiske reaksjonar, kor han typisk tek eksplisitt inn bidraget frå 20-40 000 atom! Møtet omfatta elles sju sesjonar, og frå vårt institutt bidrog Giovanni, Alf, Elaine, Wouter og Yura med gode føredrag som vart mottekne med stor interesse. Alf (web), Elaine, Maria (turansv.), Mathias (foto) og Vidar bidrog dessutan på ulike måtar til gjennomføring av arrangementet. Møtet vart avrunda av avtroppande leiar i faggruppa, professor Einar Uggerud frå Kjemisk institutt ved UiO, som hadde mange gode ord om gjennomføringa av arrangementet og, enda viktigare, det faglege og pedagogiske nivået på presentasjonane. Nyvald leiar i faggruppa er førsteamanuensis Luca Frediani frå Universitetet i Tromsø og *Center for Theoretical and Computational Chemistry* (CTCC). CTCC støtta arrangementet økonomisk.



Prof. Pettersson kjempar med nebb og klør for den nye modellen for vatnstruktur. Foto: Mathias Winkler

Studiesaker



Opptak til kjemisk institutt høsten 2009.

Bachelor studiet ved KI

Totalt 20 studenter hadde kjemi som førsteprioritet ved opptak til bachelorprogrammet i kjemi høsten 2009.

Per oktober er det totalt 27 aktive bachelorstudenter i første årskullet. Dette innbefatter studenter som hadde kjemi på 2. og 3. prioritet og noen som er kommet fra andre studieprogram.

Master studiet ved KI

Totalt var det 19 søkere til masterprogrammet i kjemi, hvorav 12 ble tilbudt plass og tatt opp. I tillegg er det åtte studenter som er tatt opp på andre studieprogram, disse har veiledere (vitenskaplige ansatte) fra Kjemisk institutt.

Avdelingsvis fordeling ble:

- Avdeling for Organisk, biofysikalsk og legemiddelkjemi: 7
- Avdeling for Fysikalsk, petroleum og prosess kjemi: 11
- Avdeling for Uorganisk, nanostrukturer og modellering: 2

Erasmus Mundus

7 studenter på ASK - Masterprogram i Avansert spektroskopi

4 studenter på EMQAL - Maserprogram i Kvalitet og analytisk laboratorium

Avlagte mastereksamener

Karina Hestad Olsen avsluttet sitt master studie i legemiddel kjemi (farmasi) ved kjemisk institutt/senter for farmasi den 8. juni. Tittel på master thesis: *Synthetic studies towards tripeptidomimetic CXCR4 antagonists*. Veileder var førsteamanuensis Bengt Erik Haug (senter for farmasi, UiB), ekstern sensor: førsteamanuensis Morten Bøhmer Strøm (Avd. for legemiddelkjemi,

Universitetet i Tromsø) og medlem av intern eksamenskomité var professor George Francis.

Mats Sunde avsluttet sitt master studie i organisk kjemi ved kjemisk institutt den 2. oktober. Tittel på master thesis: *Synthesis of palladium N-heterocyclic carbene complexes*. Veileder var professor Hans-René Bjørsvik, ekstern sensor professor Troels Skrydstup (Århus Universitet, Danmark) og medlem fra intern eksamenskomité var førsteamanuensis Tore Skodvin.

Erik Aske Berg avsluttet sitt master studie i organisk kjemi/ legemiddel kjemi ved kjemisk institutt / senter for farmasi den 12. oktober. Tittel på master thesis: *Synthetic studies towards bicyclic CXCR4 antagonists*. Veileder var førsteamanuensis Bengt Erik Haug (senter for farmasi, UiB), ekstern sensor: professor Kristina Luthman (Göteborgs Universitet) og medlem av intern eksamenskomité var professor George Francis.

Endringer i forskerutdanningsutvalget, programstyret og eksamenskommisjonen.

Det har vært gjennomført endringer i sammensetning av forskerutdanningsutvalget, programstyret (for master og bachelor) og i eksamenskommisjon for avsluttende master eksamen. Utvalgene følger valgperioden for instituttrådet, dvs. august 2009-august 2013. Dette gjelder for fast ansatte, studenter og stipendiater er valgt for et år.

Forskerutdanningsutvalget

Medlem

prof. George Francis (leder)
prof. Karl W. Törnroos
førsteaman. Bjørn Grung
stip. Espen Vaular

Varamedlem

prof. Øyvind M. Andersen
prof. Knut Børve
prof. Olav M. Kvalheim
stip. Elaine Olsson

Prof. George Francis fortsetter som leder ut 2011, deretter overtar førsteamanuensis Bjørn Grung ledervervet i forskerutdanningsutvalget. Prof. Øyvind M. Andersen går da inn som ordinært medlem i forskerutdanningsutvalget.

PROGRAMSTYRET (BSc & MSc)

Medlem

prof. Tanja Barth (leder)
førsteaman. Tore Skodvin,
førsteaman. John G.Seland
overing. Anne G. Frøystein
stip. Hjørdis Skår
stud. Liza M. H. Silden

Varamedlem

prof. Hans-Rene Bjørsvik
førsteaman. Willy Nerdal
prof. Vidar R. Jensen
avding.Unni Hauge
stip. Maria G. Zahl
stud. Torstein F. Habiger

Prof. Tanja Barth fortsetter som leder i ett år til og går deretter ut av programstyret. Førsteaman. John Georg overtar da som leder og prof. Hans-René Bjørsvik går inn som ordinært medlem.

Eksamenskommisjon for avsluttende master eksamen

Medlem

Prof. Olav M. Kvalheim
Førsteaman. Willy Nerdal
Prof. Leif Sæthre

Varamedlem

prof. Harald Høiland,
prof. Nils-Åge Frøystein
prof. Vidar R. Jensen

Nyt Høsten!

