

DEN DANSKE NATIONALKOMITÉ FOR KEMI

The Danish National Committee for Chemistry

23. marts 2018

Det Kgl. Danske Videnskabernes Selskab
ICSU Danmark
H.C. Andersens Boulevard 35
1553 København V

Nationalkomitéens beretning for 2017

Nationalkomitéen formidler Danmarks kontakt til IUPAC – Union of Pure and Applied Chemistry. Der er hvert andet år møde i IUPAC's *Council* (=generalforsamling), hvor Nationalkomitéen er Danmarks stemme. Der har i 2017 været et sådant Council møde i São Paulo, hvor et af vores medlemmer repræsenterede Danmark. I mangel af dedikerede rejsemidler til IUPAC-formål, var rejsens primære formål dog deltagelse i den samtidige, videnskabelige, IUPAC-arrangerede konference *46th World Chemistry Congress*. Council valgte Christopher M.A. Brett (Portugal) som IUPAC præsident 2020-22. I perioden 2018-20 vil han, som President-Elect, fungere som Vice President, og i perioden 2022-24 som Past President; denne sekvens i bemandingen af nøgleposter sikrer kontinuitet i IUPAC's ledelse, som altså til enhver tid inkluderer både den kommende, den nuværende og den netop afdøde præsident. Næste konference og Council er fastlagt til Paris, sommeren 2019; her vil Unionens 100 års jubilæum blive markeret.

Ud over den nævnte, emnemæssigt generelle, *World Chemistry Congress* arrangerer IUPAC også en række specialiserede konferencer. I perioden 2017-18 kan fx nævnes 7th IUPAC International Conference on Green Chemistry (Moscow), IUPAC-FARS 2017 Polymer Congress on Smart Materials for Emerging Technology (Jeju Island, Korea), XVI International IUPAC Conference on High Temperature Materials Chemistry (Ekaterinburg), 27th IUPAC International Symposium on Photochemistry (Dublin) og 14th IUPAC International Congress on Crop Protection Chemistry (Ghent, Belgium)

FN's generalforsamling har i December 2017 erklæret 2019 som *International Year of the Periodic Table of Chemical Elements* (IYPT 2019). Dette sker på initiativ af især IUPAC, men IUPAP (Fysik), EuChemMS (de Europæiske kemiske selskabers forening), ICSU, IAU (Astronomi) og IUHPS (Videnskabshistorie/filosofi) er alle involveret. IUPAC's præsident i perioden 2018-19 er sat i spidsen for styringsgruppen for IYPT 2019, som også tæller Sir Martyn Poliakoff, lead presenter of Periodic Table of Videos, University of Nottingham, UK. Ligesom ved *International Year of Chemistry* i 2011, så sigter Nationalkomitéen mod at påtage sig en koordinerende rolle i forbindelse med IYPT-aktiviteter i Danmark.

Meget af det løbende arbejde i IUPAC's divisioner og komiteer foregår i regi af såkaldte projekter, der typisk munder ud i publikation af en teknisk rapport, en anbefaling, en tabelsamling med kritisk evaluerede data eller lignende. IUPAC's eget tidsskrift *Pure and Applied Chemistry* bruges ofte som kanal for offentliggørelsen. Langt de fleste projekter etableres på eget initiativ af forskere inden for et specifikt område af kemien, hvor de ser behov for en form for standardisering. Projekterne er bemandet internationalt på frivillig basis og udføres nu om dage primært ved elektronisk kommunikation suppleret med face-to-face møder med rejseudgifter betalt af IUPAC efter ansøgning. Mange anbefalinger ender med at blive cementeret ved en

formel godkendelse på IUPAC's Council. Projekter startet i 2017 omfatter bl.a. følgende: International Year of the Periodic Table of Chemical Elements (IYPT) in 2019: planning, coordination and implementation; Glossary of terms used in biochar research; Collection, compilation and evaluation of elemental and isotopic data of calcium carbonate and hydroxyapatite materials and the assessment of their usability to act as reference materials; Alignment of principles for specifying ligands and substituent groups across various areas of nomenclature; Critically evaluated rate coefficients for backbiting in acrylate radical polymerization; ThermoML-2017 Revision of an XML based IUPAC Standard for Thermodynamic Property Data; Metrics for Green Syntheses; Evaluated Kinetic Data for Atmospheric Chemistry; Spectroscopy - Revision of the Orange Book chapter 5; Digital Dissemination of Data Standards: Planning for a new Cheminformatics Color Book; Human Health Risk Consideration of Nano-enabled Pesticides for Industry and Regulators; Graphical Representation of Polymer Structures; Chemical and Biochemical Thermodynamics Reunification; IUPAC/IUPAP Joint Working Group to Examine the 1991 Criteria used to Verify Claims for the Discovery of New Elements; Evaluated Published Isotope Ratio Data; Analytical chemistry of nanomaterials - critical evaluation; Glossary of Terms in Molecular Toxicology; Water and Environmental Analysis - a Symposium part of HPLC 2017; Safety of Engineered Nanomaterials; Structure and Properties of Transparent Polypropylene with Very Low Solubility; Notations and Conventions in Molecular Spectroscopy: Rotation-Vibration Spectroscopy. Som det ses, så dækker projekterne et stort antal helt forskellige områder inden for de kemiske videnskaber. Typisk varighed af et projekt er 3 år. Nogle er dog af kortere varighed og andre er i praksis nærmest stående arbejdsgrupper.



Michael Brorson
Formand, Den Danske Nationalkomité for Kemi