

Ionisk selvsamling med ponceau 4R og benzyldimethylhexadecylammonium chlorid. Syntese, struktur og tyndfilm.

Andy Sode Anker, Burak Özdemir, Rasmus Dalsgaard Schlosser og Stephanie Sandager

Modtaget (i København, Danmark) 7. oktober 2015, Accepteret 3. november 2015

Artiklen undersøger ionisk selvsamling (ISA), struktur og tyndfilm af et azofarvestof-tensid kompleks. Syntesen anvender azofarvestoffet Ponceau 4R og tensidet benzyldimethylhexadecylammonium chlorid. Den supramolekylære struktur af det dannede materiale er blevet forsøgt estimeret og derefter undersøgt via eksperimentel analyse. Tyndfilm er blevet dannet ved spincasting og strukturen analyseret via optisk mikroskop, Atomic Force mikroskop (AFM) og absorptionspektroskopi. Materialets strukturelle egenskaber er yderligere blevet undersøgt via røntgen pulverspredning (XRD) og faseovergange er blevet bestemt ved digital scannings kalorimetri (DSC). Resultaterne viser, at der via ISA skabes et materiale der danner en lamellar struktur med en høj grad af orden, og at materialet kan bearbejdes til tyndfilm der bibeholder den ordnede, lagdelte struktur. Det ses også, at materialet gennemgår én tydelig faseovergang.

Introduktion

Anvendelse og syntese af nanostrukturer danner rammen for en voksende del af den moderne forskning.^[1] Ionisk selvsamling er i dag en teknik der på baggrund af ladningsforskelle i særligt udvalgte materialer tillader dem, at fungere som byggeklodser for et nyt materiale med strukturel høj orden.^[2-4]

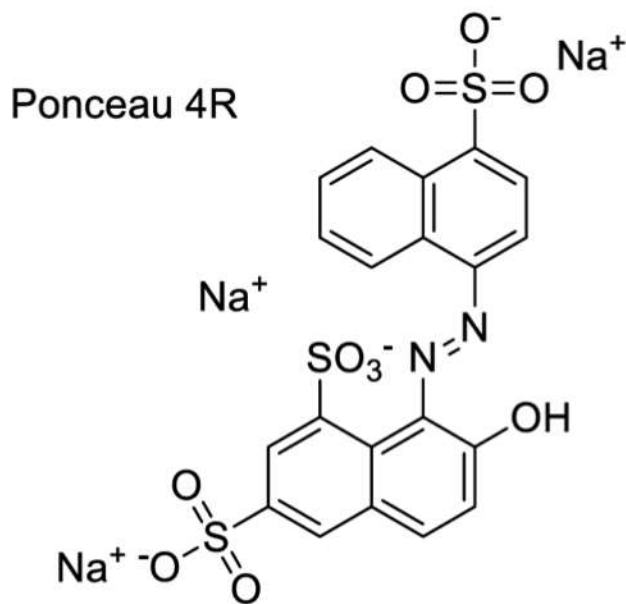
En væsentlig del af vores makroskopiske omgivelser er et resultat af selvsamling i naturen, og ligeledes er dette også gældende for de mindste af naturens biologiske systemer.^[3, 5] Ionisk selvsamling, ISA (Ionic Self-Assembly), udnytter vekselvirkninger mellem elektrisk ladede molekyler og overfladeaktive stoffer til, at danne supramolekylærer, lagdelte strukturer med høj orden.^[3] Ved syntese mellem disse stoffer udvindes et vand uopløseligt, nanostruktureret produkt, der på baggrund af de valgte overfladeaktive stoffer kan tildeles nye, særegne egenskaber efter design.^[1, 3, 5] Selvsamlede nanostrukturerede materialer har et omfattende potentiale indenfor både samfundsmæssige og industrielle områder, eksempelvis miljø-klima forskning (bl.a. biokemiske detektorer, katalysatorer og rensning af vand), IT industri (bl.a. organiske elektriske komponenter^[4]) og biomedicinske områder (bl.a. diagnostiske redskaber, målrettet levering af lægemidler samt og konstruktion af biomaterialer med vævslignende egenskaber).^[6] Det er tidligere, ved Faul et al. vist, at azofarvestof-tensid komplekser kan danne lagdelte strukturer,^[7] men ved Thomas Just Sørensen et al. er det vist at anvendelsen af benzyllammonium tensider resulterer i ordnede, lamellare strukturer hvis orientering bibeholdes når disse spincastes til tyndfilm.^[3] Ionisk selvsamling, særligt med azofarvestof-tensid komplekser, er nemt og billigt.^[5] Azofarvestof-tensid komplekser har vist sig, at danne komplekse, ordnede strukturer med en evne til, at ødelægge og gendanne bindinger som resultat af ioniske vekselvirkninger.^[5] Til denne artikel er et enkelt azofarvestof-tensid kompleks blevet syntetiseret og anvendt til tyndfilm via spincasting. Både azofarvestof-tensid komplekset i sin pulverform og som

tyndfilm er blevet undersøgt og strukturerne diskuteres.

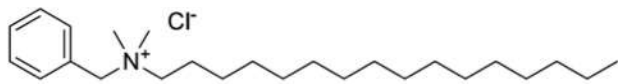
Resultater og diskussion

Syntese

ISA blev anvendt til syntesen med azo-farvestof Ponceau 4R (figur 1), forkortet Po4R og tensidet benzyldimethylhexadecylammonium chlorid (forkortes som BC16, figur 2). Po4R består af et disubstitueret β -naphthol som ved en azoforbindelse er sat sammen med et monosubstitueret naphthalen. Molekylet har tre negative ladninger fordelt over de tre sulfonat substitutter, og tilhørende natrium ioner. BC16 tensidet består af en benzyl gruppe bundet til et nitrogen, som videre er bundet til to methyl grupper og en 16 carbon atomer lang carbonkæde. Tensidet har en enkelt positiv ladning ved nitrogen, og en tilhørende chlorid ion. Resultatet var et orange pulver der bundfældes i vandig opløsning. Stoffet er blevet analyseret ved EA og MS.



Figur 1: Molekylær struktur af det anvendte azo-farvestof Ponceau 4R. Stoffet har tre sulfonat grupper med tilhørende natriumioner.



Figur 2: Molekylær struktur af det anvendte tensid Benzyltrimethylhexadecylammoniumchlorid. Stoffet har en enkelt ladning, og der anvendes derfor tre tensid molekyler til hvert Po4R azo-farvestof molekyle.

Elementar Analyse

Elementar Analyse viste, at pulverkomplekset indeholdt carbon, hydrogen og nitrogen i mængder der svarer godt til de forventede, teoretiske værdier (tabel 1)^[8], hvor hydrogen dog har en smule større afvigelse lige omkring måleusikkerheden. Muligheden for, at et vandmolekyle optrådte i komplekset blev overvejet, men ved tilføjelse af et vandmolekyle, til de teoretiske værdier, steg den generelle afvigelse for alle de målte indholdsstoffer. Det må konkluderes, at der ikke optræder vand i prøven. Generelt set kan ved EA konkluderes, at prøven er ren.

Massespektrometri

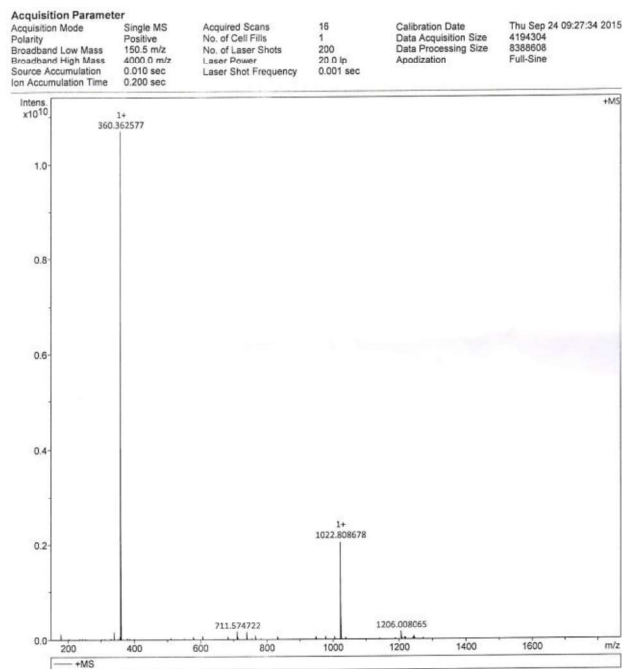
Ved massespektrometri er både farvestof og tensidet forsøgt bestemt i prøven. De forventede værdier er indført i tabel 2. Resultaterne (figur 3) viste, at det forventede BC16 tensid var tilstede i prøven, men farvestoffet kunne ikke findes.

Tabel 1: EA resultater. Pulverets sammensætning svarer godt til det forventede. Stofprøven konkluderes som ren.

	Carbon (%)	Hydrogen (%)	Nitrogen (%)
Teoretiske værdier	70,55	9,29	4,33
Fundne værdier	70,43	9,86	4,76

Tabel 2: De forventede værdier. BC16 blev fundet, men Po4R kunne ikke findes.

	Målemetode	Molarmasse (g/mol)	Molarmasse pr. ladning (g/(mol*q))
BC16	ESP+	360,65	360,65
Po4R	ESP-	535,49	178,49



Figur 3: Nogle af de positive ladninger fundet ved MS. Øverst til højre ses en måling for m/z værdien 360,36 g/mol*q.

Processing til tyndfilm

Der blev forberedt tre tyndfilm ved spincasting. Til spincasting blev der anvendt tre forskellige opløsninger af pulver, med dichlormethan som solvent, på henholdsvis 10 mg/mL, 5 mg/mL og 1 mg/mL.

Absorptionsspektroskopi

Komplekset blev undersøgt med absorptionsspektroskopi, hvor man ud fra rådataene (figur 4) kunne ses at absorbansen stiger i takt med gradforøgelsen af indsendelsen af lyset. For at bestemme kompleksets transitions dipol, anvendes en faktor $K_f(\lambda)$ bestemt ud fra a, b og c.

$$K_f = \frac{a + b}{2 + \frac{a + b}{b - c}}$$

Vinklen af transitions dipol beregnes med formlen: $\alpha = \cos^{-1}(\sqrt{K_f(\lambda)})$

Man kan finde $c(\lambda)$ direkte ud fra dataene af baggrundsspektret, imens $a(\lambda)$ og $b(\lambda)$ beregnes lineær regression af en $(\cos^2(90-\theta), A')$ -graf, som vist på figur 5. Der var en fejl på målingen ved 60°, denne er derfor fjernet for på regressionsgrafen.

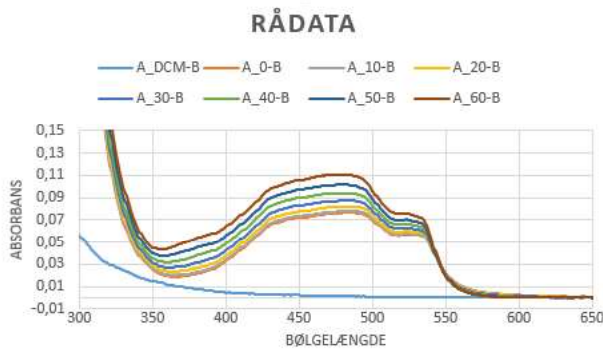
Derudover er R2 (hvor godt punkterne ligger til et lineært fit) et udtryk for, hvor høj orden vores struktur besidder. Værdierne og de fundne vinkler er indført i tabel 3. Den gennemsnitlige vinkel af stoffet i forhold til substratet er bestemt til 48,16°. Desuden ses det, at R er meget langt fra 1, hvilket betyder at der er høj uorden.

Molekylær struktur og størrelse

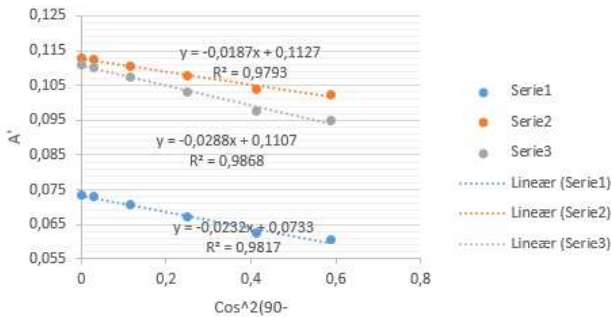
For at få en forståelse for kompleksets størrelse og struktur, er volumen forsøgt bestemt. De estimerede dimensioner, baseret på bindingslængder^[9] og van der Waals radier^[10], er indført i tabel 4.

Pulver Røntgenspredning (XRD)

Plottes XRD data gives tre toppunkter (figur 6), ud fra disse kan dimensionerne af enhedscellen bestemmes, [11] værdierne er indført i tabel 5. Plottes en graf med intensiteten som funktion af afstanden (figur 7), ses tre toppunkter med værdier der stemmer overens med ovenstående størrelser.



Figur 4: Rådata fra absorptionsspektroskopi, UV/vis.



Figur 5: Regression for af data punkterne hvor målingen ved 60° er fjernet.

Tabel 3: Værdier og den fundne vinkel af materialet på glaspladen

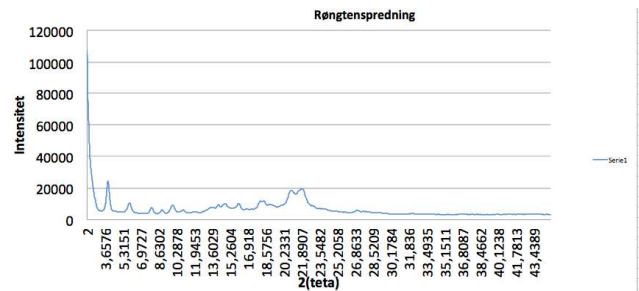
λ (nm)	A	B	C ^l	α
400	-0,0232	0,0733	0,03905	46,9879 °
450	-0,00288	0,1107	0,038512	49,1672 °
500	-0,0187	0,1127	0,037444	51,6816 °

Tabel 4: Tabel over dimensioner af tensidet BC16 samt farvestoffet Po4R

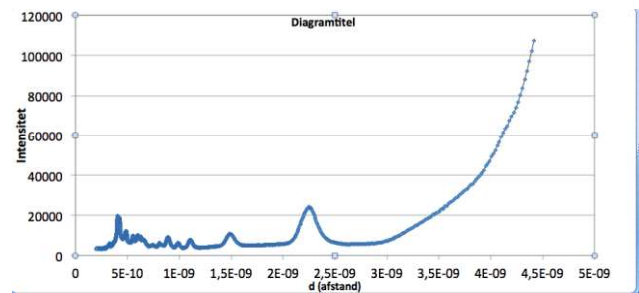
	Længde	Bredde	Dybde	Areal	Volumen
Po4R	10 Å	22 Å	1,7 Å	220 Å ²	374 Å ³
BC16	28 Å	6,5 Å	1,7 Å	182 Å ²	309,4 Å ³

Tabel 5: De ved XRD bestemte dimensioner af enhedscellen.

Længde (Å)	Bredde (Å)	Dybde (Å)
44,17	22,52	4,18



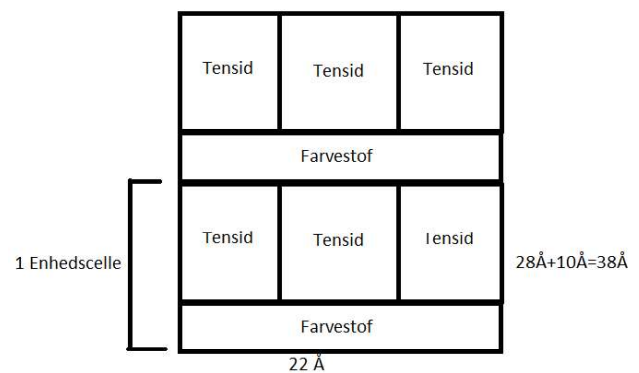
Figur 6: XRD resultater – kurve med intensitet som funktion af 2x vinklen.



Figur 7: Plot med intensitet som funktion af afstand.

Pakning

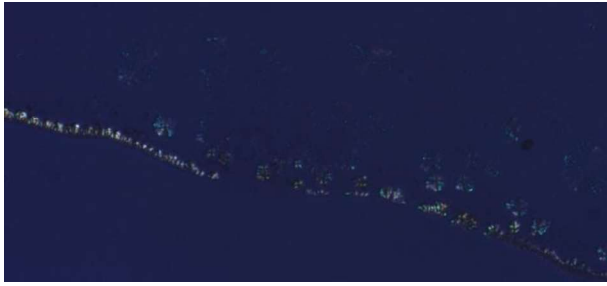
Da farvestoffet har tre negative ladninger, og tensidet har en positiv ladning forestiller vi os, at de pakker som vist på figur 8. Dette stemmer godt overens med XRD data. Hvert farvestof, i kombination med tre tensider, danner lag med en højde på 38 Å, samt en bredde på 22 Å.



Figur 8: Estimeret pakningsmodel.

Mikroskopi

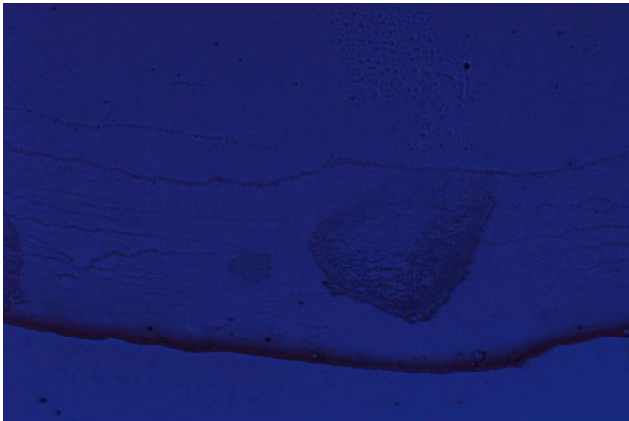
5 mg/mL tyndfilmen blev undersøgt via optisk mikroskop. På figur 9 ses kanten af tyndfilmen. På figur 10 og 11 ses en terrassehøjde. På begge er der nogle urenheder der kan skyldes diffusion.



Figur 9: Kant af tyndfilm I mikroskop forstørret x200 med polariseret lys nedefra vinkelret på.



Figur 10: midt terrasse I mikroskop forstørret x100 med polariseret lys nedefra.



Figur 11: midt terrasse, mikroskop forstørret x100 med polariseretlys nedefra med vinkelret polariseringsfilter

overfladestruktur består af lag med relativt ensartede højdeforskelle. Der forekommer en tæt sammensætning af individuelle plateauer, hvor nogle danner fundament for yderligere, fortsat relativt ensartede lag. Taffelbjerge foreslår, at filmen danner en lamellar struktur og en fordeling af disse terrasser samt højder kan ses ud fra billederne alene.

Måling af lokal højdefordeling over udvalgte områder, hvor lagdeling er tydelig, er indført i tabel 6. Der ses en gennemsnitlig højdeforskel på 37,9 Å hvilket er i overensstemmelse med den estimerede pakningsmodel.

Målingerne af højdeforskelle mellem dale og plateauer, foretaget ved linje sektion og afbilledet på figur 15 og indført i tabel 7, viser variationer mellem 36 Å for de laveste og helt op til 58 Å for de absolut højeste. Måles der kun mellem plateauer der tydeligt danner terrasser, som det ses hvis man følger profil 1 på figur 15 fra højre mod venstre ses det, at højdeforskellene varierer mindre, fra mellem 38 Å til 43 Å.

For sektions profil 1 bemærkes det, at der mellem det målte plateau nr. 2 og den tilstødende terrasse er en højdeforskel på 82 Å, dette er dobbelt så stort som det forventede, og det antages, at AFM apparatet ikke har kunnet se den mellemliggende terrasse eller, at det øverste lag simpelthen ophører her. Ser man bort fra denne del af profilen, eller følger man grafen fra højre mod venstre, så får man en gennemsnitlig laghøjde på omtrent 40 Å.

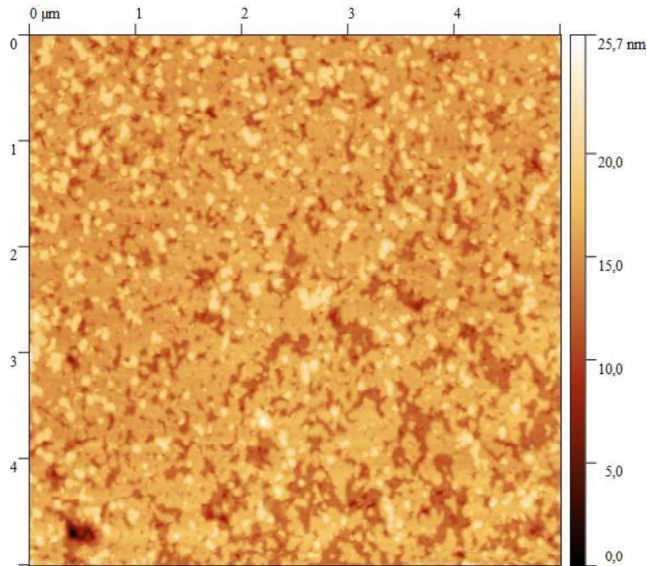
For sektions profil 2 bemærkes det, at dalen ikke har et entydigt fladt område, der er derfor også målt på områder nær det laveste punkt så et gennemsnit taget. Dale i overfladen viser sig generelt, at have højdeforskelle der afviger fra det forventede gennemsnit. Sektions profil 3 måler kun to plateauer og en dal imellem dem og giver en gennemsnitlig højdeforskel på 58 Å. Terrasserne er ikke så veldefinerede, at total højdefordeling tydeligt kan differentiere imellem lagene. Total højdefordeling over tyndfilmens målte område viser ikke klare forskelle mellem plateauer. Total højdefordeling over nærbilledet giver en gennemsnitlig laghøjde på 7,55 nm.

Den estimerede lag højde på omkring 38-40 Å er i nogenlunde overensstemmelse med den teoretiske pakningsmodel og den, ved XRD analyse, bestemte længde af enhedscellen på 44,17 Å. Dette understøtter, at hver enhedscelle er i stand til, at danne et lag, der kan fungere som fundament for en fortsat lagdelt struktur.

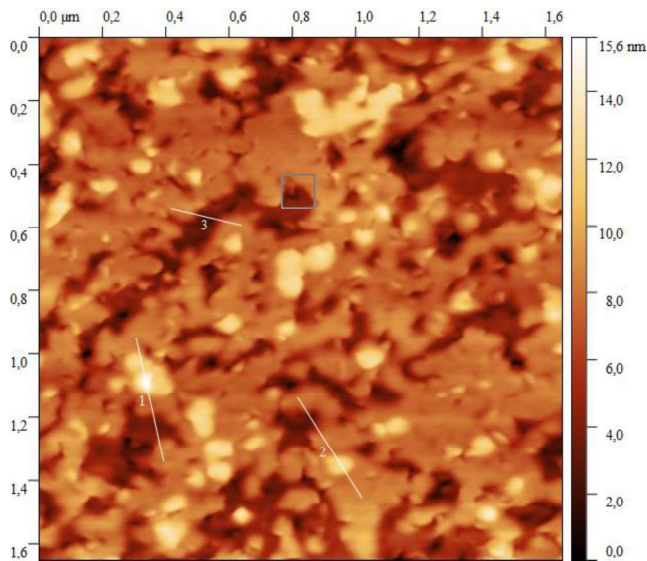
Overfladeruheden af 25,1 μm^2 området er målt til $2,02 \pm 0,2931$ nm. Nærbilledets overfladeruhed er målt til $2,022 \pm 0,8056$ nm.

AFM

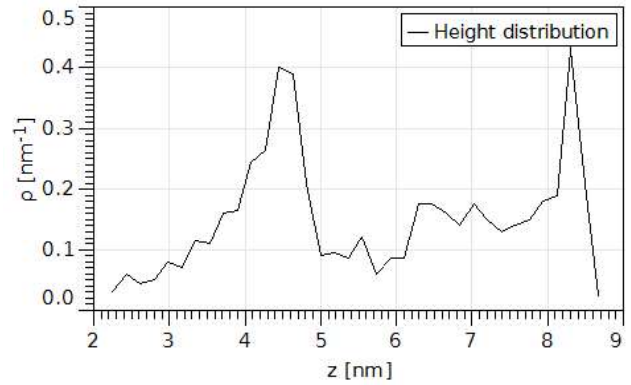
AFM billederne, som ses på figur 12 og figur 13, viser, at filmens



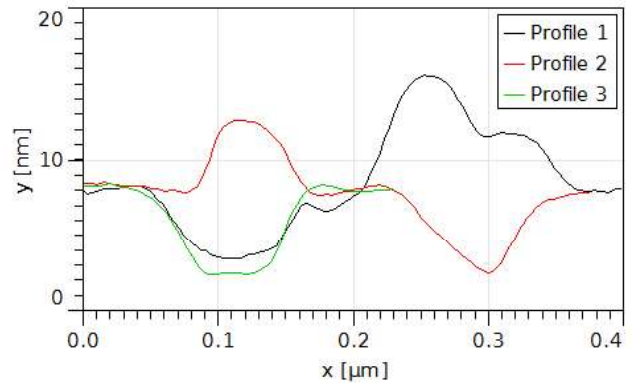
Figur 12: AFM rendering af et 5,01x5,01 μm område på 10 mg/mL tyndfilmen. Der ses individuelle plateauer med relativt ensartede højdeforskelle. Et nærbillede af filmen, målt over et andet område ses på figur 13.



Figur 13: AFM rendering af 1,65x1,65 μm² nærbillede med tydelige terrasser. Lyse områder er højere end standardniveauet, mørke områder er lavere end standardniveauet. Her ses terrasser med relativt ensartede højder. Optrukne linjer markerer en sektioners profiler set på figur 15. Området indkranset af en firkant er der hvor lokal højdefordeling er blevet målt, se figur 14. Lokal højdefordeling og sektioners profilering taler for en laghøjde på 37-40 Å.



Figur 14: Graf over udvalgt lokal højdefordeling målt ved tydelig terrasse, markeret på figur 13. Grafen viser en højdeforskel mellem de to lag. Afstanden er målt til 3,84 nm.



Figur 15: Graf over sektioners profilerne markeret på figur 13. Sektioners profilering viser højdeforskelle og dybdeforskelle mellem plateauer og dale over en bestemt strækning. Det ses, at lagdeling forekommer, særligt er det tydeligt når man følger niveauerne på profil 1 fra højre mod venstre.

Tabel 6: Højdefordeling mellem to lag, målt over tre forskellige områder på nærbilledet.

Højde på første lag (nm)	Højde på andet lag (nm)	Højdeforskel (nm)
4,46	8,30	3,84
4,496	8,147	3,651
4,37	8,27	3,89
		Gennemsnit: 3,79

Tabel 7: Højden af målte niveauer for sektioner profilerne 1, 2 og 3, som afbilledet på figur 15 gående fra venstre mod højre.

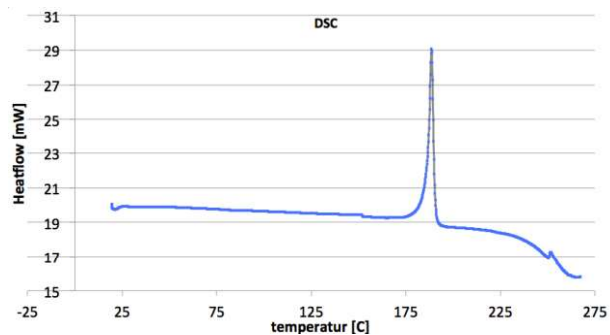
Beskrivelse	Niveau 1 (nm)	Niveau 2 (nm)	Højdeforskel (nm)
Profil 1 A	8,08	3,57	4,51
Profil 1 B	3,57	7,33	3,76
Profil 1 C	7,33	15,5	8,17
Profil 1 D	15,5	11,7	3,8
Profil 1 E	11,7	7,87	3,83
Profil 1 F	7,87		
Gennemsnit af højdeforskelle			4,81
Gennemsnit hvis man ser bort fra C-D			3,98
Profil 2 A	8,26	12,44	4,18
Profil 2 B	12,44	8,15	4,29
Profil 2 C – dal	8,15	2,42	5,73
Profil 2 C – gns. dal	8,15	3,8	4,35
Profil 2 D	2,42	7,45	5,03
Profil 2 E	3,8	7,45	3,65
Fra gns. dal			
Profil 2 F	7,45		
Gennemsnit af højdeforskelle			4,8
Gennemsnit af højdeforskelle med gns. dal.			4,1
Profil 3 A	8,22	2,35	5,87
Profil 3 B	2,35	8,15	5,8
Profil 3 C	8,15		
Gennemsnit af højdeforskelle			5,835

DSC

Grafen for DSC (figur 16), har et peak som danner en trekant. Dette fortæller os at stoffet er krystalinsk fordi det betyder at hele stoffet smelter på same tid og ikke i forskellige stadier

På denne graf kan der kun ses 1 peak hvor vores farvestof og tensid smelter på samme tid.

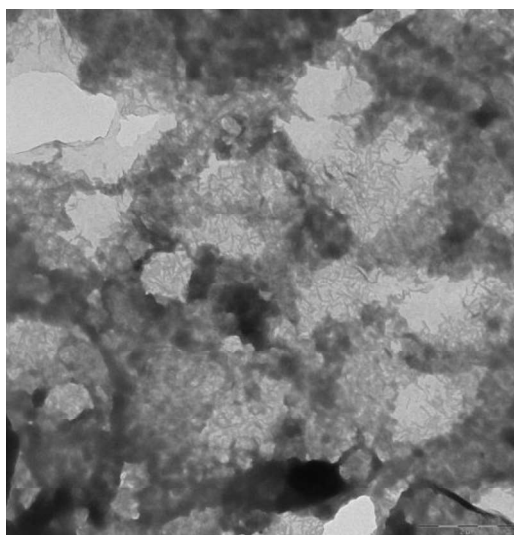
Smelteenergien er bestemt som arealet under det peak hvor hele stoffet er smeltet, dette areal er 114,61 KJ/mol og derfor er dette smelteenergien for prøven og smelte punktet er 192 °C.



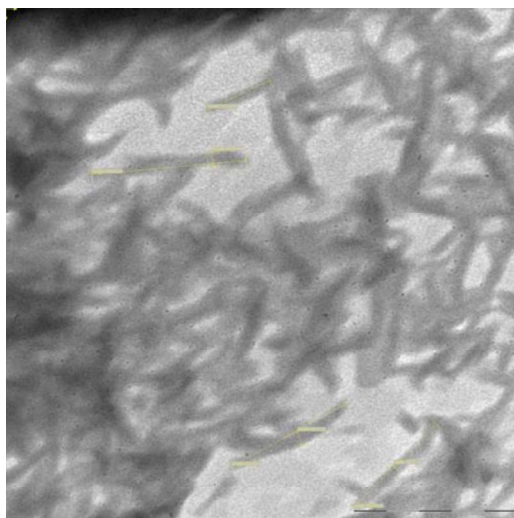
Figur 16: Billede af DSC graf der former en trekant, arealet under dette område beskriver enthalpien.

TEM

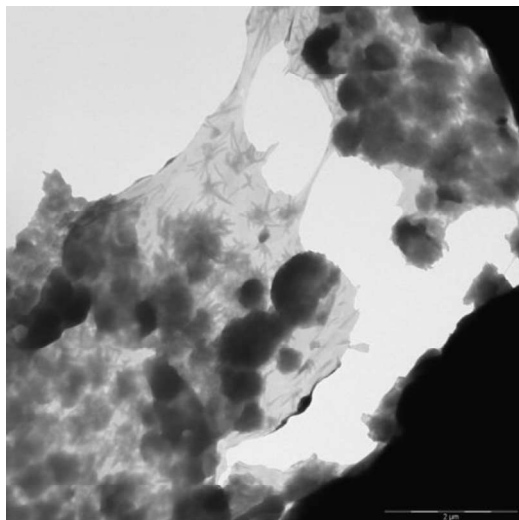
TEM billederne (figur 17, 18 og 19) viser, at prøven danner film. Denne film fremstår med varierende opacitet og sammenfoldning. En mulig indikation for, at filmen danner lagdelte strukturer. Materialet fremstår krystalinsk, primært som isotropisk, stavformede strukturer (figur 17 og 18). Ved filmens ydre kanter ses enkelte klumper af krystal med nogen gennemsigthed (figur 19). Mange steder fremstår filmen foldet, og det sås under optagelserne, hvordan materialet gennemgik en aktiv sammenfoldning under påvirkning af TEM apparatet. Som man bevæger sig væk fra filmens kant, ses der en større grad af lagdeling, både i form af større plateauer men også i mængden af lag. Der ses også her en større mængde af stavformede krystaller. Umiddelbart ses det, at længden af disse stave varierer med op til 250 nm, mens breddens varians er mindre (figur 18). Sammenholdt med XRD data er det ikke overraskende, at materialet er krystalinsk.



Figur 17: TEM billede hvor filmens kant er tydelig. Farveforskelle indikerer lagdeling. Materialet er i høj grad krystalinsk. Målerreference på 2 µm.



Figur 18 Nærbillede af krystalinske stavformede strukturer af varierende længder. Målerreference på 500 nm.



Figur 19: Billede af filmens kant samt terrasser. Farveforskelle indikerer differencer i materialets højde, altså lagdelte terrasser. Målereference på 2 μm .

Eksperimentelt

Materialer og syntese

Det anvendte azo-farvestof, Ponceau 4R, blev opgivet til, at have en renhed på 60%. Der er anvendt det overfladeaktive stof, Benzyltrimethylhexadecylammoniumchlorid.

Generelt tager syntesen udgangspunkt i metoden fremlagt ved Faul et al.⁴ og TJS et al.². Her følger en kort gennemgang.

Syntesen foregår ved sammenblanding af en Po4R farvestof opløsning og en BC16 tensid opløsning. Det dannede kompleks forventes, at nedfælde i vandig opløsning. Po4R molekylet har tre ladninger, og opløsningen indeholder tre natriumioner, hvor BC16 molekylet har en enkelt ladning, med et tilhørende enkelt chloridion. Der må kræves tre mol BC16 tensid til hvert mol Po4R farvestof.

Til forberedelse af tensid-opløsningen, blev tensidet tilsat deioniseret vand under omrøring og opvarmning. Der blev til 1,48 g tensid anvendt 200 mL deioniseret vand. Ved fuldstændig opløsning af tensidet blev temperaturen målt til 39 °C.

1 g azo-farvestof blev opløst i 200 mL deioniseret vand under omrøring.

Til Po4R opløsningen blev der løbende tilført små mængder af BC16 opløsningen under omrøring, det resulterende kompleks nedfældede som pulver i væsken.

Syntesen kan opsummeres i et reaktionsskema: $\text{F}^{3-}(\text{aq}) + 3\text{T}^{+}(\text{aq}) + 3\text{Na}^{+}(\text{aq}) + 3\text{Cl}^{-}(\text{aq}) \rightarrow \text{FT}_3(\text{S}) + 3\text{Na}^{+}(\text{aq}) + 3\text{Cl}^{-}(\text{aq})$ ^[12]

Pulveret blev udvundet ved filtrering. For at fjerne de eventuelt resterende natrium- og chloridioner, blev pulveret skyllet tre gange med 30 mL deioniseret vand. Herefter blev det udvundne pulver kompleks tørret ved 40 °C. Massen af det tørrede stof blev bestemt til, at være 1,74 g.

De spincastede tyndfilm blev analyseret med lysmikroskop, AFM og absorptionsspektroskopi. Yderligere blev pulverprøver analyseret ved Digital Scanning Calorimetri og XRD (røntgen pulverspredning).

AFM blev udført via en Asylum Research MFP 3D maskine. Et 25,1 μm^2 område af tyndfilmen, samt et nærbillede på 2,7 μm^2 , er blevet undersøgt ved AFM. Områderne af tyndfilmen er blevet undersøgt ved, at forsøge en bestemmelse af højdefordeling over hele det målte område samt, for nærbilledet, bestemmelse af udvalgte lokal højdefordelinger over repræsentative terrasser og tre linje sektioner

lavet over områder der tydeligt varierer i højde.

Digital Scanning Calorimetri (DSC) blev udført via en Perkin Elmer DSC6 maskine.

Absorptionsspektroskopi (UV/vis) blev foretaget med en stofprøve i væske, forberedt ved 50 μL af 1 mg/mL opløsningen opløst i 3 mL dichlormethan, samt en spincastet tyndfilm, undersøgt ved seks vinkler, fra 0° - 60°, gjort i skridt af 10°, dette blev gjort via en Perkins Elmer Lambda 1050.

TEM blev udført via en Philips CM-100 maskine, ved 1 mg/mL stofopløsningen dryppet over et kobbergitter.

Konklusion

Ved syntese mellem to let tilgængelige materialer, er der opnået et nanostruktureret materiale, med høj orden. Absorptionsspektroskopi og TEM billeder viser, at materialets film består af isotropiske krystaller, yderligere bekræfter absorptionsspektroskopi den foreslåede pakningsmodel, hvilket, sammen med EA taler for, at den valgte metode giver hensigtsmæssige resultater. Tensidet kunne bestemmes, men azofarvestoffet kunne ikke findes i prøven, dette kan der ikke konkluderes noget endeligt om. AFM, lysmikroskopi og pulverrøntgen analyser har vist, at materialet, der i sin pulverform optræder krystallinsk, kan danne film med en lagdelt, relativt ensartet struktur. DSC har vist, at materialet i sin pulverform kun gennemgår en enkelt faseovergang.

Tak til

Tak til Cecilie Lindholm Andersen, Freja Eilsø Storm, Marco Santanella og Miguel Carro for deres hjælp til udførsel af eksperimentelt arbejde samt data analyse. Tak skal også lyde til Tue Hassenkam for AFM data samt Tobias Sejersens og CFIM for TEM billeder. Til sidst siger vi tak til Thomas Just Sørensen for tålmodighed og opmuntrende ord.

Noter og referencer

- Address: Nano-Science Center, University of Copenhagen, Universitetsparken 5, 2100 København Ø, Denmark.; E-mail: dxj847@alumni.ku.dk
- [1] T. Zhang, J. Brown, R. J. Oakley, C.F.J. Faul, *Current Opinion in Colloid & Interface Science*, 2009, **14**, 62-70
 - [2] C. F. J. Faul, *Acc. Chem. Res.*, 2014, **47**, 3428-3438
 - [3] M. Santella, T. J. Sørensen et al., *ChemNanoMat*, 2015, **1**, 253-258
 - [4] T. J. Sørensen, B. W. Laursen, *dansk kemi*, 2011, **5**, 10-12
 - [5] C. F. J. Faul, M. Antonietti, *Adv. Mater.*, 2003, **15**, 673-683
 - [6] E. Busseron, Y. Ruff, E. Moulin, N. Giuseppone, *Nanoscale*, 2013, **5**, 7098-7140
 - [7] C.F.J. Faul, M. Antonietti, Y. Guan, *Langmuir*, 2000, **18** 5939-5945
 - [8] Afvigelsen mellem Carbon indholdet og de teoretiske værdier er 0,12, for Hydrogen: 0,57, for Nitrogen: 0,43
 - [9] Bindingslængder og bindingsvinkler fra ChemDraw
 - [10] Wolfram|Alpha Knowledgebase, 2015
 - [11] Anvendt Braggs lov: $n\lambda = 2d\sin(\theta)$
 - [12] F betegner farvestoffet Po4R, T betegner tensidet BC16, FT betegner farvestof-tensid komplekset