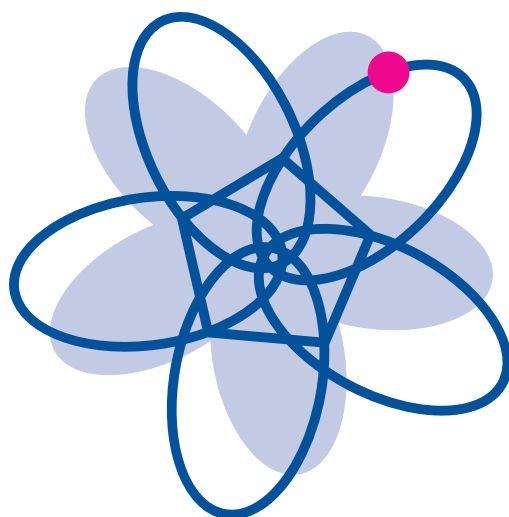


RePoSS #26:

Når discipliner mødes: Et casestudie af faglig integration i nanoforskning

Julie Nørgaard Hostrup

October 2014



Please cite this work as:

Julie Nørgaard Hostrup (2014). *Når discipliner mødes: Et casestudie af faglig integration i nanoforskning*. RePoSS: Research Publications on Science Studies 26. Aarhus: Centre for Science Studies, University of Aarhus. URL: <http://www.css.au.dk/reposs>.

Når discipliner mødes

- Et casestudie af faglig integration i nanoforskning

Kandidatspeciale

Omfang: 30 ECTS

Julie Nørgaard Hostrup, 20081877

Vejleder: Hanne Andersen, Center for Videnskabsstudier

Maj 2014

Indhold

Forord	3
Abstract in English	4
Resume	5
1. Introduktion	6
1.1 Velkommen til interdisciplinaritet	7
1.2 Velkommen til nanoforskning	9
1.3 Interdisciplinaritet i nanoforskning	11
2. Metodiske overvejelser	18
2.1 Udvælgelse af rammetheori og analysens udførelse	18
2.2 Afgrænsning af projektet	19
2.3 Udvælgelse af ph.d.-afhandlinger	20
3. Analysens teoretiske ramme	22
3.1 Integration via grænseobjekt	22
3.2 Integration qua teknovidenskabelighed	25
3.3 Integration via interfield-teori	28
3.4 Afgrænsning: Identifikation af discipliner og subdiscipliner	30
4. De udvalgte ph.d.-afhandlinger	34
4.1 Uddannelsen	34
4.2 Resume af indhold	35
5. Former for integration i afhandlingerne	38
5.1 Hvilket mønster tegner sig?	38
5.2 Integrationens bidrag	44
6. Nanoforskningens interdisciplinære natur	46
6.1 Interdisciplinaritetens tilknytning til nanoskalaen	46
6.2 Interdisciplinaritetens tilknytning til teknovidenskabelighed	49
6.3 Hvorfor ses ikke ny interfield-teoridannelse?	52
7. Integration i nanoforskning	55
7.1 Hvad har vi lært om integration?	55
7.2 Refleksioner: Videnskabsfilosofien møder naturvidenskab	60
8. Interdisciplinaritetens vilkår	63
8.1 Hvorfor ses ikke mere interdisciplinaritet?	63
9. Konklusion	67
10. Fremtidige studier	68
10.1 Øvrige interessante elementer i afhandlingerne	68
10.2 Udvidelse af dette speciale	69
Litteraturliste	71
Appendiks	74

Forord

Forud for dette speciale går fem års interdisciplinær uddannelse i nanoscience ved Aarhus Universitet. Selvom uddannelsen nu lakker mod enden, er betydningen af det interdisciplinære element i min uddannelse stadig uklar, og det foruroliger mig.

Omkring mig reciterer medstuderende insisterende slagord som ”det er godt at vide noget af det hele”, ”virkelighedens problemer kan ikke inddeles i discipliner”. De pro-interdisciplinære undervisere fortæller, at ”der er nano i alt”, i håbet om at det skaber afklaring hos den undrende studerende. Ingen af disse udsagn har dog bragt mig nærmere en forståelse af, hvad det egentlig betyder, at nanoforskningen er interdisciplinær.

Med dette speciale kaster jeg mig ud i det. Jeg stiller det spørgsmål, som jeg ville ønske var blevet diskuteret undervejs i mit studie, hvor det forventes, at vi nanostuderende lærer at integrere viden fra fysik, kemi og molekylærbiologien: Hvordan integreres forskellige discipliner egentlig i nanoforskning?

Tak til min vejleder Hanne Andersen, centerleder ved Center for Videnskabsstudier, for at omfavne min undren og hjælpe mig med at få syn for sagen.

Abstract in English

Interdisciplinary research and the scientific integration of disciplines are often looked upon with great expectations. Nanoresearch is often mentioned as an example *par excellence* of interdisciplinary research. Yet, the scientific integration in nanoresearch is poorly described.

Descriptions of interdisciplinarity in nanoresearch have primarily been based on bibliometrical studies that suffer from lack of details. Case studies have described the nanoresearch in greater detail, but they focus on Scanning Probe Microscopy and nanoscale objects and do not give a satisfying picture of contemporary nanoresearch.

In this thesis an understanding of scientific integration in nanoresearch is shaped through an analysis of the latest completed year of PhD dissertations in nanoresearch from Aarhus University. The analysis rests on three prominent analytic models of interdisciplinarity from the philosophy of science. Based on these, three forms of integration are developed and looked for within the selection of dissertations: Integration through boundary objects, integration through technoscience, and integration through the creation of interfield theories.

This thesis brings new details to the understanding of scientific integration, as it uncovers that different forms of integration occur in the analysed dissertations. Integration through boundary objects is identified where an object intersects two disciplines and thereby facilitates integration. Integration through technoscience is identified where the intention of demonstrating of practise in the laboratory requires integration of theory and methods from different disciplines. This exposes that integration in nanoresearch is multifaceted. Furthermore, the analysis reveals aspects of the scientific integration that need to be investigated in greater detail in order to deepen the understandings of scientific integration.

The thesis challenges existing descriptions of the nature of interdisciplinarity in nanoresearch as it is illustrated that interdisciplinarity in nanoresearch is neither necessitated only by the size of nanoscale objects nor the close relations between science and technology. Emphasis on the role of nanoscale objects exaggerates the importance of these, and emphasis of technoscience simplifies the relation between understanding and application in nanoresearch.

Finally, it is discussed how institutional aspects can explain why controversial and novel integrations are rare in the analysed dissertations.

This thesis demonstrates that analytical models of interdisciplinarity from the philosophy of science combined with a detailed reading of nanoresearch projects bring new insights to the understanding of integration in interdisciplinary science.

Resume

Interdisciplinaritet og den tilhørende faglige integration af discipliner hyldes flere steder, og nanoforskning bliver ofte fremhævet som et lærebogseksempel på interdisciplinær forskning. Alligevel er den faglige integration af discipliner i nanoforskning overraskende ubeskrevet.

Beskrivelserne af interdisciplinaritet i nanoforskning har primært været baseret på bibliometriske studier, men disse analyser lider under et lavt detaljeniveau. Casestudier har beskrevet feltet i større detalje, men de har stort fokus på scanningprobemikroskopian samt nanoskalaobjekter og giver ikke et fuldendt billede af aktuel nanoforskning.

I dette speciale belyses faglig integration i nanoforskning gennem en analyse af den senest færdiggjorte årgang af ph.d.-afhandlinger fra iNANO, Aarhus Universitet. Analysen har udgangspunkt i tre videnskabsfilosofiske beskrivelser af vidensdannelse på tværs af discipliner. Disse bruges som afsæt for at opstille tre forskellige former for integration, der forsøges identificeret i de udvalgte ph.d.-afhandlinger: Integration gennem grænseobjekter, integration qua teknovidenskabelighed og integration gennem interfield-teoridannelse.

Specialet bidrager med en detaljeret forståelse af faglig integration, idet det vises, at der forekommer forskellige former for integration i de udvalgte ph.d.-afhandlinger. Der identificeres integration gennem grænseobjekter, hvor en genstand på snitfladen mellem flere discipliner fungerer som fokuspunkt for integration. Ligeledes identificeres integration qua teknovidenskabelighed, hvor ønsket om at demonstrere en mulighed i laboratoriet fordrer integration af teorier og teknikker fra forskellige discipliner. Dette viser, at faglig integration i nanoforskning er forskelligartet. Yderligere afdækker analysen, aspekter ved den faglige integration som er nødvendige at undersøge nærmere for at opnå dybere indsigt i den faglige integration i nanoforskning.

Specialet nuancerer de eksisterende beskrivelser af nanoforskningens interdisciplinære natur, idet det vises, at interdisciplinaritet i nanoforskning ikke alene er nødvendiggjort af nanoskalaobjekters størrelse eller det tætte samspil mellem teknologi og videnskab. Et ensidigt fokus på nanoskalaobjekter overdriver deres rolle i nanoforskningen, mens et ensidigt fokus på teknovidenskabelighed forsimples forholdet mellem anvendelse og forståelse i nanoforskningen.

Afslutningsvist diskuteres, hvordan nanofeltets institutionelle vilkår kan forklare, hvorfor de analyserede afhandlinger ikke er fyldt med kontroversielle og nyskabende integrationer.

Specialet demonstrerer, at et samspil mellem videnskabsfilosofiske modeller for interdisciplinaritet og detaljeret læsning af vidensprodukter fra nanoforskningen bringer ny forståelse af faglig integration i interdisciplinær forskning.

1. Introduktion

Det er svært at overdrive den opmærksomhed, interdisciplinær forskning har modtaget de seneste år. Tilliden til den interdisciplinære forskningsaktivitet er ligeledes svær at overse: På internationalt niveau har EU lanceret rammeprogrammet, Horizon 2020, der med et budget på 600 mia. kr. skal løse samfundsmæssige problemer blandt andet via mere interdisciplinær forskning. I Danmark opprioriteres interdisciplinær forskning igennem Det Strategiske Forskningsråd og regeringens forskningsstrategi, FORSK2020 (Det Strategiske Forskningsråd, 2013) (Ministeriet for Forskning Innovation og Videregående Uddannelser, 2012). Ydermere har Danmarks to største universiteter satset stort på interdisciplinaritet de seneste år. På Aarhus Universitet oprettede man i 2012 fem interdisciplinære centre med ønsket om at imødekomme fremtidens udfordringer (AU Kommunikation, AU Strategi, & AU Økonomi, 2013), og på Københavns Universitet besluttede man i 2012 at oprette en pulje på 480 mio. kr. til tværfaglige projekter (ku.dk)¹.

Set i lyset af den store opbakning til interdisciplinaritet er det påfaldende, at interdisciplinaritetens natur stadig ikke er afdækket (Schummer, 2004a, s. 9). Det er efterhånden en etableret opfattelse, at interdisciplinaritetens særkende er en faglig integration, hvor viden fra de involverede discipliner sammenkobles (Klein, 2010, s. 17). Men det er kun svagt beskrevet, hvad denne sammenkobling består i, hvordan den faglige integration understøttes, og hvordan personer kan uddannes til udføre den. Hvis integration er hjertet i interdisciplinært arbejde, må en fuld forståelse af interdisciplinaritet kræve en øget forståelse af selve den faglige integration, og det er netop formålet med dette speciale.

Med udgangspunkt i en detaljeret analyse af den aktuelle nanoforskning undersøges i dette speciale, hvilke former for faglig integration der foregår i aktuel nanoforskning. Herved ønskes, at:

1. bidrage med en mere detaljeret forståelse af faglig integration i interdisciplinær forskning.
2. bidrage med en mere nuanceret forståelse af, hvordan nanoforskning kan siges at være en interdisciplinær forskningsaktivitet.

Således er specialets grundlæggende ambition at belyse faglig integration i nanoforskning. Det sker igennem en analyse af den senest afsluttede årgang af ph.d.-afhandlinger i nanoforskning, der er udgivet fra iNANO, Aarhus Universitet, mens analysens rammeteori baserer sig på tre frem-

¹ <http://www.science.ku.dk/finansiering/kalender/2016-pulje/> tilgået d. 6/3 2014

trædende videnskabsfilosofiske beskrivelser af arbejde på tværs af disciplinære grænser. Udvælgelsesprocessen af både den anvendte teori og analysens genstand beskrives i kapitel 2. De tre anvendte teorier præsenteres i kapitel 3 sammen med en motivation af, hvorfor disse er valgt. Ph.d.-afhandlingernes indhold beskrives i kapitel 4.

Kapitel 5 udgør hoveddelen af specialets analyse, hvor det undersøges, hvilke former for integration, der eksisterer i de udvalgte afhandlinger. I kapitel 6 belyses det, hvordan de identificerede integrationer supplerer de eksisterende beskrivelser af interdisciplinaritet i nanoforskning, og i kapitel 7 stilles der skarpt på, hvad analysen fortæller om den faglige integration. Afsluttende diskuteres i kapitel 8, hvordan de identificerede faglige integrationer kan forklares ud fra nanoforskningens institutionelle kontekst.

Dette kapitel fortsættes med en kort præsentation af begrebet interdisciplinaritet og den forskningsaktivitet, der kaldes nanoforskning. Der redegøres for, hvordan interdisciplinaritet i nanoforskning er blevet beskrevet indtil nu, og på baggrund heraf forklares, hvordan specialet supplerer de eksisterende beskrivelser af interdisciplinaritet i nanoforskning.

1.1 Velkommen til interdisciplinaritet

Interdisciplinaritet kort fortalt

Megen nutidig forskning foregår på tværs af traditionelle faggrænser. Der eksisterer, både blandt forskere og i det omkringliggende samfund, et ønske om at lave projekter, hvor forskellige discipliner samarbejder om at løse både faglige og samfundsmæssige udfordringer (Bechtel, 1986b; Weingart, 2000). Denne forskning, hvor disciplinerne udveksler teorier og teknikker med hinanden, og hvor viden fra forskellige discipliner sættes sammen i en fælles forståelse, beskrives som interdisciplinær (Klein, 1990b).

Fortalere for den interdisciplinære forskning har fremhævet, at interdisciplinaritet kan i) skabe innovation, ii) løse komplekse problemer, iii) løse reelle problemer i samfundet og iv) forene dele af den yderst specialiserede menneskeskabte viden (Bechtel, 1986b; Klein, 1990b). Disse forventede egenskaber taget i betragtning, er det ikke svært at forstå interdisciplinaritetens store appel. Dog betyder bredden i den interdisciplinære forskningsaktivitet også, at det er svært at indkredse, hvad fællesnævneren i den interdisciplinære forskning er (Klein, 1990b).²

Dels i ønsket om at forstå og dels i ønsket om at kunne understøtte og forbedre den aktuelle interdisciplinære forskningsaktivitet, har flere videnskabsteoretikere forsøgt at afdække det diffuse begreb. Videnskabssociologer har med interviews og feltstudier belyst interdisciplinaritet som et socialt fænomen: Hvordan grupperer forskerne sig, hvordan fordeler de arbejde, tillid og viden, og hvordan opfattes det interdisciplinære arbejde af forskerne selv (se eksempelvis Marzano,

² Der er flere grunde til, at der eksisterer denne forvirring om begrebet. Den brede appel og brede anvendelse er to af dem (Klein 1990).

Carss, & Bell, 2006)? Videnskabsfilosoffer har beskæftiget sig med den epistemologiske side af interdisciplinaritet og lavet analytiske modeller for, hvordan arbejde på tværs af discipliner foregår, mens videnskabshistorikere har undersøgt, hvordan arbejdet på tværs af discipliner og dannelse af nye discipliner er forløbet i historien. (Klein, 2000; Wagner et al., 2011). Ud fra de eksisterende analyser af interdisciplinaritet står det klart, at interdisciplinaritet er et komplekst fænomen, der stadig kun er svagt beskrevet, og hvis natur bedst kan forstås i lyset af både sociale, institutionelle, epistemologiske og historiske forhold.

Inter- og multidisciplinaritet

Megen litteratur om interdisciplinaritet starter med en indledende skelnen mellem interdisciplinaritet og multidisciplinaritet, og ofte bliver der nedfældet en begrebsforklaring med reference til den første formelle definition, der blev lavet af OECD i 1972:³

Multidisciplinarity: Juxtaposition of various disciplines, sometimes with no apparent connection between them: music + mathematics + history.

Interdisciplinarity: An adjective describing the *interaction* among two or more different disciplines. This interaction may range from simple communication of ideas to the mutual integrations of organizing *concepts, methodology, procedures, epistemology, terminology, data* and organization of research and education in a fairly large field. An interdisciplinary group consists of persons trained in different fields of knowledge (disciplines) with different concepts, method and date and terms organised into a common effort on a common problem with continuous intercommunication among the participants from the different disciplines (Apostel, Berger, Briggs, & Michaud, 1972, s. 25-26).

Som en videreudvikling af OECD's definition er det i dag en etableret sondring, at multi- og interdisciplinaritet adskiller sig ved, at sammenkoblingen af de involverede discipliner er henholdsvis additiv og integrerende (Klein, 1990a, s. 56).⁴ Mens multidisciplinaritet beskriver et parallelsamarbejde, hvor et fælles objekt eller problem ansues fra forskellige discipliner under en simpel addition af flere videnskabelige resultater, er det særegent for interdisciplinært samarbejde, at viden *integreres* i en ny samlet forståelse. Det er således integrationen, der er særlig for det interdisciplinære arbejde (Klein, 2010, s. 17). Heraf udspringer det, at en forståelse af interdisciplinær forskning også må rumme en forståelse af integrationens natur og karakteristika.

En analyse af integration i interdisciplinær forskning er dog udfordret af, at der ikke er klarhed over, hvad integration egentlig er. I dette speciale bruges integration om en *tæt sammenflet-*

³ OECD introducerede også termen transdisciplinaritet, og ofte nævnes også termen superdisciplinaritet, der begge er former for tværdisciplinære aktiviteter, der i en eller anden grad er hævet over de etablerede discipliner.

⁴ Det danske begreb tværfaglighed lader sig ikke direkte oversætte til en af de to kategorier. Tværfaglighed bruges mere bredt om samarbejde på tværs af discipliner uden skelen til, hvilken form for interaktion, der foregår mellem de involverede discipliner (Jensen et al., 2012).

ning af viden fra forskellige discipliner, og grundet ønsket om at afdække, hvordan integration i nanoforskning ser ud, specificeres eller indskrænkes integrationsbegrebet ikke yderligere. Håbet er således at kunne bruge et integrationsbegreb, der er så rummeligt som muligt, for dermed at kunne indfange de forskellige former for integration, der kan forekomme mellem discipliner (jf. Bechtel, 1986b, s. 32-33).

Disciplinaritet og interdisciplinaritet

Interdisciplinaritetsbegrebet hænger uløseligt sammen med et disciplinaritetsbegreb, der også er vanskeligt at definere. Discipliner er både institutionelle, sociale og kognitive strukturer. De bruges både til at beskrive grupperinger af viden og samtidig med reference til grupperinger af forskningsinstitutioner (Weingart, 2010). Selv hvis man kun forstår discipliner som grupperinger af viden, bruges discipliner både om brede og rummelige kategorier som fysik, kemi og biologi, men også om mindre og mere specialiserede vidensenheder som faststoffysik, syntesekemi og cellebiologi. Denne tvetydige brug af ordet dækker over, at det er yderst problematisk at nivellere forskellige vidensområder ud fra specialiseringsgrad, og derfor også yderst problematisk at inddele al viden i discipliner, subdiscipliner og eventuelt sub-subdiscipliner (Bechtel, 1986b, s. 7).

Disciplinbegrebet er blevet beskrevet af mange videnskabsfilosoffer, og det er særligt interessant, fordi de eksisterende discipliner på en gang afspejler den måde, vi mennesker strukturerer vores viden, og samtidig også er rammesættende for, hvordan vi opfatter verden (Weingart, 2010, s. 4). I dette speciale anvendes et disciplinbegreb, der er så rummeligt som muligt, for således at muliggøre en omfavnelser af flere forskellige disciplinopfattelser i beskrivelsen af den faglige integration. Jeg tager disciplinbegrebet op senere i afsnit 3.4, fordi en konkretisering af begrebet er nødvendigt for at kunne gennemføre min analyse.

Interdisciplinaritetens særkende er den faglige integration. En øget forståelse for den interdisciplinære forskning må derfor bygge på en detaljeret forståelse af den faglige integration. Interdisciplinaritetens og integrationens komplekse natur vanskeliggør dog en generel beskrivelse af den faglige integration. Derfor kan en beskrivelse af den faglige integration med fordel tage udgangspunkt i et afgrænset interdisciplinært forskningsfelt. Nanofeltet er i denne sammenhæng interessant at kaste sig over.

1.2 Velkommen til nanoforskning

Lærebogseksemplet på interdisciplinaritet

Nanoforskning⁵ er oplagt at studere, når man vil have et indblik i den aktuelle interdisciplinære forskning. Dels er nanoforskning et område, der ofte nævnes som eksempel *par excellence* på

⁵ Begreberne *nanoforskning* og *nanofeltet* bruges synonymt i dette speciale til at beskrive den samlede forskningsaktivitet, der benævnes *nanoteknologi*, *nanovidenskab* og *nanoscience*. Da

interdisciplinær forskning (se eksempelvis executive summary Roco & Bainbridge, 2002, s. ix)(se citat s. 14, Navrotsky, 2000). Dels har universiteter over hele verden oprettet undergraduate programmer i nanoscience (nanowerk.com)⁶. Dermed er nanofeltets uddannelse og oplæring af unge forskere et eksempel på en aktuell tendens; at interdisciplinære bachelor- og kandidatuddannelser skyder frem på mange universiteter.⁷ Ved at analysere forskning produceret af personer uddannet inden for nanofeltet, opnås et indblik i den viden, som kommer fra de interdisciplinære uddannelsesprogrammer.

En analyse af integration i nanoforskning kan desuden tjene til at forbedre de eksisterende uddannelsesprogrammer i nanoforskning. Det påpeges af Danmarks Akkrediteringsinstitution, at succes af den interdisciplinære uddannelse blandt andet afhænger af, hvorvidt de studerende hjælpes til at foretage en faglig integration af den viden, de præsenteres for (ACE Denmark, 2013). For at dette bliver muligt, må der udvikles metode og terminologi om emnet, så undervisere og studerende har et fælles sprog til at diskutere, hvad faglig integration er.

Derudover er en belysning af interdisciplinaritet i nanoforskning interessant, idet en afdækning af nanofeltets interdisciplinære natur er en del af en større afdækning af, hvad nanoforskning egentlig er. Nanoforskning er som videnskabeligt felt vokset frem de seneste årtier; i dag eksisterer der omkring 160 tidsskrifter, der publicerer nanoforskning (Grieneisen & Zhang, 2012), og både internationalt og her i landet har universiteter oprettet nanocentre og nanoafdelinger (nanowerk.com)⁸. Når nanofeltet præsenteres, er det ofte med reference til fysikeren Richard Feynmans oplæg i 1959 "*There's Plenty of Room at the Bottom*", hvor han beskrev det store og uudnyttede potentiale, der ligger i at kunne se og styre atomer på nanoskala (Feynman, 1960). Ofte fremhæves også udviklingen af scanningstunnelmikroskopet (STM), der affødte en nobelpris i fysik i 1986, og derudover nævnes Bill Clintons tale ved oprettelsen af National Nanotechnology Initiative i 2000, som stadfæstelsen af den store optimisme, der har omgærdet nanoforskningen (se eksempelvis C. Mody, 2011a).

Denne fortælling om nanofeltets historie omtales som "The Standard Story" (Baird & Shew, 2004). På trods af disse milepæle, er det dog ikke simpelt at indkredse, hvad nanoforskning egentlig er, og blandt videnskabsteoretikere er nanoforskning blevet beskrevet som heterogent og forskelligartet (Schmidt, 2008, s. 63). En analyse af integration i nanoforskning bidrager derfor både med nyttig viden om integration i interdisciplinær forskning, men belyser samtidig et nanofelt, som stadig kun er svagt afdækket i videnskabsfilosofien.

begreberne *nanoteknologi* og *nanovidenskab* ofte bruges synonymt, har jeg valgt ikke at skelne mellem de to begreber.

⁶ http://www.nanowerk.com/nanotechnology/bachelor_a.php tilgået d. 27/2 2014.

⁷ Danmarks Akkrediteringsinstitution, der akkrediterer nye uddannelser i Danmark, oplyser at hver femte nye uddannelse, der søger om akkreditering, er tværfaglig (ACE Denmark, 2013, s. 5).

⁸ http://www.nanowerk.com/nanotechnology/research/universities_a.php tilgået d. 7/3 2014

1.3 Interdisciplinaritet i nanoforskning

Kvantificering af interdisciplinaritet

Der eksisterer undersøgelser af interdisciplinaritet i nanoforskning, og mest fremtrædende er de kvantitative analyser, der forsøger at måle graden af interdisciplinaritet i feltet.

Ydre karakteristika

Flere studier har kvantificeret mængden af interdisciplinaritet i nanofeltet baseret på forskningens ydre karakteristika såsom medforfatterskaber, citationsmønstre og lignende (for oversigtsartikel se Wagner et al., 2011). Et eksempel herpå ses i "*Multidisciplinarity, interdisciplinarity, and patterns of research collaboration in nanoscience and nanotechnology*" af videnskabsfilosoffen Joachim Schummer (Schummer, 2004b). I denne artikel undersøges graden af interdisciplinaritet i nanofeltet ved en kortlægning af medforfatterskaber for over 600 videnskabelige artikler publiceret i kategoriserede "nanotidsskrifter" i år 2002 og 2003.

Schummer opstiller 10 disciplinkategorier, eksempelvis fysik, kemi og biomedicinsk videnskab, som forfatterne bag nanoartiklerne inddeles under. Kategoriseringen af forfatterne sker ud fra navnet på det institut, de er tilknyttet. Således bruges forfatterens institutionelle tilknytning som et mål for de discipliner, der optræder i artiklerne. Interdisciplinaritet måles ud fra, hvor mange artikler der rummer forfattere fra to eller flere discipliner. Schummer når således frem til, at 63,5 procent af artiklerne fra nanotidsskrifterne er skrevet af forfattere inden for den samme disciplin. Ved at sammenligne med *Journal of the American Chemical Society* (JACS) konkluderes det, at nanofeltet stort set udviser samme grad af interdisciplinaritet som klassisk disciplinær forskning (Schummer, 2004b, s. 446).

Schummer nuancerer beskrivelsen af interdisciplinaritet ved at undersøge, hvordan graden af interdisciplinaritet varierer mellem de forskellige discipliner. Det gøres ved at tælle, hvor hyppigt en forfatter fra eksempelvis fysik har en medforfatter fra kemi, materialevidenskab eller en af de andre discipliner. Herved opnås et tal for, hvor ofte fysik i nanoforskning indgår i interdisciplinær forskning med hver af de øvrige discipliner. Ligeledes tælles for hver af de øvrige discipliner, hvor ofte en forfatter fra den givne disciplin har medforfattere fra de andre discipliner. Tallet for, hvor ofte en disciplin indgår i interdisciplinær forskning, sættes i forhold til størrelsen af disciplinen (målt i forhold til hvor ofte nanoartikler har forfattere fra disse discipliner). På den måde opnås et tal for hver disciplin, der beskriver deres tilbøjelighed til at indgå i interdisciplinært samarbejde (Schummer, 2004b, s. 447). Ved sammenligning af en tilsvarende analyse af forfatterskaberne i JACS konkluderes det, at de interdisciplinære relationer i nanoforskning er mere spredte og mindre selektive (Schummer, 2004b, s. 448).

Schummers analyse har den klare styrke, som andre bibliometriske analyser af interdisciplinaritet i nanoforskning, at den netop er kvantitativ, og derfor kan den give et overblik over et stort og repræsentativt udvalg af nanofeltet. De kvantitative analyser kan dog ikke komme uden om, at

det lave detaljeniveau i beskrivelserne af forskning skaber en svaghed i analysen. Schummer opfatter forfatternes institutionelle tilknytning som et billede på de discipliner, der optræder i artiklerne. Dog giver navnet på det institut, en forsker er tilknyttet, kun et overfladisk billede af den forskning, som vedkommende foretager. Det er muligt, at to forskere ansat på et institut for fysik har forskellige uddannelser og laver meget forskelligartet forskning. Disse nuancer forbliver ubeskrevet i Schummers analyse, og således bliver interdisciplinær forskning, inden for de opstillede disciplinkategorier, overset. Yderligere kan de kvantitative analyser ikke komme uden om, at den valgte kategorisering kan skabe en skævhed i analysens resultater. Schummer beskriver fysik, kemi og materialevidenskab som tre forskellige discipliner, mens alle de biologiske videnskaber er lagt under samme disciplinkategori. Da mange biologiske subdiscipliner samarbejder med hinanden vil denne ene store biovidenskabelige kategori altså give det forkerte indtryk, at de biologiske fag ikke laver interdisciplinært arbejde.⁹

Allermest lider Schummers undersøgelse, ligesom andre af samme slags, under den antagelse, at interdisciplinaritet er et fænomen, der kan afsløres ud fra analyser af forskningens ydre karakteristika som medforfatterskaber. Schummer måler interdisciplinaritet i nanofeltet ud fra hyppigheden af en interaktion mellem to eller flere discipliner, men hvad denne interaktion består i, undersøges ikke (Schummer, 2004b, s. 444). Hvis integration virkelig er interdisciplinaritetens særegne karakteristika, som beskrevet ovenfor, bør en kvantificering af interdisciplinaritet tilstræbe at måle integration af discipliner, og det er tvivlsomt, om en analyse baseret på ydre karakteristika vil kunne dette. Eksempelvis kan en medforfatteranalyse ikke afsløre, om viden fra forskellige discipliner virkelig flettes tæt sammen, om den ene disciplin blot dominerer de andre, eller om den ene disciplin kun proforma bliver inddraget.

Indre karakteristika

I et forsøg på at komme et lag dybere i forståelsen af interaktionen mellem de forskellige discipliner i nanoforskning kan kvantificering baseres på indre karakteristika. Dette ses eksempelvis i "*How interdisciplinary is nanotechnology?*" af Jan L. Youtie og Alan L. Porter (Porter & Youtie, 2009), hvor integration i nanoforskning kvantificeres ud fra citationsmønstre i nanoartikler og de emnekategorier¹⁰, som er knyttet til de tidsskrifter, hvor nanoartiklerne er publiceret. For at udføre denne analyse, skaber Porter og Youtie først en database over samtlige publicerede nanoartikler ud fra et avanceret sæt af ord-kombinationer, hvor eksempelvis artikler med ordet "nano" inkluderes, mens artiklen ekskluderes, hvis "nano" kun optræder i sammenhængen "nanosekund" eller "nanometer" (Porter, Youtie, Shapira, & Schoeneck, 2008). Ud fra den næsten halve million nanoartikler, der ifølge denne algoritme er blevet skrevet fra 1991-2008, udvælges tilfældigt 900

⁹ I (Brigandt 2010) beskrives, at faglig integration af forskellige biologiske subdiscipliner er en del af den biologiske videnskab.

¹⁰ Web of science har til deres Science Citation Index udviklet emnekategorier (eng: Subject Categories) til at kategorisere det faglige indhold af samtlige videnskabelige tidsskrifter. Eksempler på emnekategorier er: "Anvendt fysik", "Analytisk kemi" og "Biofysik".

nanoartikler fra hvert af årene 1991, 1995, 2000 og 2005 (Porter & Youtie, 2009, s. 1026). For hver enkelt artikel identificeres den emnekategori, som deres respektive tidsskrifter er beskrevet med, og idet Porter og Youtie opfatter disse emnekategorier som et mål for, hvilket forskningsfelt artiklen tilhører, kan de på den måde få et billede af, hvilke forskningsfelter der producerer nanoartikler og dermed laver nanoforskning (ibid., tabel 1, s. 1027). Herefter udvælger Porter og Youtie de nanoartikler, der tilhører de forskningsfelter, der udgiver flest artikler, og måler integrationen i artiklerne ud fra, hvor meget en artikel citerer artikler, der er skrevet i tidsskrifter fra andre forskningsfelter, dvs. med andre emnekategorier. Tanken er, at de artikler, der citeres, er et billede af den viden, som den pågældende artikel bygger på. Hvis en artikel citerer artikler fra mange forskellige forskningsfelter, bygger artiklen på mange forskellige forskningsfelter, og derfor er artiklen meget integrerende. Omvendt er artiklen kun lidt integrerende, hvis den kun citerer artikler, der er skrevet i tidsskrifter fra én anden emnekategori (ibid., s. 1036). Analysen viser, at nanoforskning udviser høj grad af disciplinær diversitet, dvs. der publiceres nanoartikler i mange forskellige forskningsfelter. Analysen viser, at integrationen i nanoforskning er høj, dog er den også høj generelt i aktuel videnskab (ibid., s. 1038).

Porter og Youtie peger selv på, at deres mål for interdisciplinaritet stadig skal forbedres (ibid., s. 1036), og de foreslår, at "*[s]harpened focus could enable identification of the local areas where knowledge integration is occurring*" (ibid., s. 1039). I forlængelse af dette forslag, tager dette speciale udgangspunkt i, at hvis der skal opnås en detaljeret forståelse af faglig integration, er det nødvendigt at forholde sig til detaljerne i den viden, som rummer den faglige integration. Dette kan opnås igennem et casestudie.

Casestudier af integrationen

Der eksisterer casestudier af nanoforskning, men kun få af dem har direkte til formål at beskrive interdisciplinariteten i forskningsfeltet. De mest fremherskende beskrivelser af interdisciplinaritet i nanofeltet knytter sig til henholdsvis scanningprobemikroskopien og nanoskalaelementer.

Integration igennem nanoskalaobjekter

Når nanoforskere forklarer hinanden og lægfolk, hvad nanoforskning er, henvises ofte til, at nanoforskning beskæftiger sig med nanoskalaobjekter, der besidder særlige nanoskalaegenskaber. Et nanoskalaobjekt har en karakteristisk længde på omkring 0,1 til 100 nanometer,¹¹ og de særlige nanoskalaegenskaber er blandt andet øget reaktivitet pga. større overflade/volumen-forhold samt ændrede optiske og magnetiske egenskaber. Her ses uddrag fra to fremtrædende netportaler, der illustrerer, hvordan nanoskalaobjekter og deres egenskaber tillægges stor vigtighed:

Nanotechnology is the understanding and control of matter at dimensions between approximately 1 and 100 nanometers (nm), where unique phenomena enable novel appli-

¹¹ Grænserne for størrelsen af et nanoskalaobjekt er der ikke fuldstændig enighed omkring. Fra 0,1, eller 1nm og op til 100 eller 500 nm bruges oftest.

cations not feasible when working with bulk materials or even with single atoms or molecules (nano.gov)¹².

Og

Researchers seeking to understand the fundamentals of properties at the nanoscale call their work nanoscience.[...] The most important requirement for the nanotechnology definition is that the nano-structure has special properties that are exclusively due to its nanoscale proportions (nanowerk.com)¹³.

Når nanoforskningens interdisciplinære natur forklares af nanoforskere, bliver nanoskalaobjekter også fremhævet med en forklaring om, at nanoskalaobjekter kun kan forstås og håndteres med teori og metode fra både fysik, kemi og biologi. I en beskrivelse af nanofeltet i den landsdækkende avis Jyllands-Posten skriver den fremtrædende danske nanoforsker og grundlægger af iNANO ved Aarhus Universitet, Flemming Besenbacher:

Nanoteknologi udspiller sig i en verden, som rent størrelsesmæssigt befinder sig i grænselandet mellem atomer/molekyler og hele celler, og hvor udfordringen er at forstå og styre opbygningen af strukturer og "maskiner" med størrelser i området fra 0,1 til 500 nanometer. Et bredt tværfagligt samarbejde mellem forskerne fra de forskellige naturvidenskabelige discipliner er helt afgørende, hvis visionerne for nanoteknologien skal realiseres (Besenbacher, 2002).

Internt blandt nanoforskere forklares nanofeltets interdisciplinaritet også igennem nanoskalaobjekter med særlige nanoskalaegenskaber. Det ses eksempelvis i nedenstående udsnit af en artikel fra Journal of Nanoparticle Research:

Nanomaterials, solids having large surface areas and dimensions of ten to a few thousand atomic diameters in one or more dimensions, are important in chemistry, physics, materials science and engineering, soil science, environmental science, and geology. Their structures are complex and different from those of large-scale materials. [...] Understanding nanomaterial formation and properties requires sophisticated physics, chemistry, and materials science.[...]Understanding their biological interactions brings in fields ranging from microbiology to medicine. Probing the impact of nanoparticles on humans and of human behavior on the production and control of nanoparticles requires the behavioral and social sciences, for example in dealing with issues of automotive pollution. Nanoscience is interdisciplinary science *par excellence* (Navrotsky, 2000, s. 321).

At nanoskalaobjekter og deres nanoskalaegenskaber kan forklare nanoforskningens interdisciplinaritet er også beskrevet i videnskabsfilosofien (Schmidt, 2008). Videnskabsfilosoffen Jan C. Schmidt fremlægger en karakterisering af forskellige typer af interdisciplinaritet, og nanoforskningen nævnes som et eksempel på et felt, der besidder objekt-orienteret interdisciplinaritet. Dette

¹² <http://www.nano.gov/nanotech-101/nanotechnology-facts> tilgået d. 15/3 2014

¹³ http://www.nanowerk.com/nanotechnology/introduction/introduction_to_nanotechnology_1.php tilgået d. 15/3 2014

sker med reference til Richard Feynmans oplæg om det videnskabelige potentiale i objekter mellem fysikkens mikroskala og kemiens/biologiens mesoskala (ibid., s. 62). Ud fra Feynmans oplæg finder Schmidt belæg for at sige, at nanofeltets interdisciplinaritet knytter sig til den overbevisning, at der findes interdisciplinære objekter på grænsefladen mellem etablerede videnskaber (ibid., s. 63).

Scanningprobemikroskopien

Scanningprobemikroskopien er et andet område af nanoforskningen, der ofte fremhæves, når nanoforskere skal fortælle hinanden og lægfolk, hvad nanofeltet er (Baird & Shew, 2004). Også når nanoforskere skal forklare, hvad der gør nanofeltet interdisciplinært, bliver scanningprobemikroskopet (SPM) ofte inddraget. Nedenfor ses et eksempel fra Københavns Universitets hjemmeside, hvor udviklingen af SPM og deraf muligheden for at se og flytte rundt på atomer bliver flettet sammen med perspektiver inden for medicin og miljøvidenskab.¹⁴

Grundlaget for nanoteknologi blev skabt i 1980'erne ved opdagelsen af Scanning Probe Mikroskoperne. Det er en fælles betegnelse for Scanning Tunnel Mikroskoper (STM) og Atomic Force Mikroskoper (AFM). Mikroskoperne giver os mulighed for at 'se' og flytte rundt på atomer på nanoskalaniveau.[...]

Det er nyt, at vi med nanoteknologi kan se og flytte rundt på atomer og molekyler, og det er der store perspektiver i. Med nanoteknologien kan vi udvikle nye materialer og strukturer, bedre medicin og lynhurtige computere, bedre beskyttelse af miljøet og meget andet (nano.ku.dk)¹⁵.

Det er ikke kun i populærformidlingen af nanoforskningen, at der lægges vægt på SPM. Videnskabshistorikeren Cyrus Mody har lavet en historisk analyse af scanningprobemikroskopisternes rolle i nanofeltets udvikling, hvor han peger på, at SPM og særligt dens brugere var af stor vigtighed i dannelsen af nanofeltet (C. Mody, 2011a, s. 4). Han påpeger desuden, at feltets interdisciplinære natur kan knyttes til scanningprobemikroskopisterne.

The probe-microscopy community, with participants in many different sectors, nations industries, disciplines and organizations, offered nanotech proponents ready-made connections from which to build the bridges that they envisioned (C. Mody, 2011b, s. 165).

Mody fremhæver også, at scanningprobemikroskopisternes interdisciplinære netværk var en af grundene til, at nanoforskere var interesseret i at optage dette instrumentbaserede videnskabelige samfund (C. Mody, 2011b, s. 193).

De nævnte citater og Modys analyse af scanningprobemikroskopisternes rolle i udviklingen af nanofeltet viser, hvordan nanoforskningens interdisciplinaritet knyttes til SPM, dels fordi det har

¹⁴ Der er ikke direkte tale om, at scanningprobemikroskopien i citatet kaldes interdisciplinær, det ligger som en undertone i denne slags beskrivelser af teknikens brede anvendelse.

¹⁵ <http://nano.ku.dk/nanoteknologi/> tilgået d. 15/3 2014

anvendelsesmuligheder på tværs af discipliner, og dels fordi scanningprobemikroskopian som fagligt netværk er interdisciplinær i sin natur.

Hvad mangler der i billedet?

De videnskabsfilosofiske beskrivelser af interdisciplinaritet i nanofeltet har ind til nu haft fokus på at forstå interdisciplinariteten som en konsekvens af nanoskalaobjekter med nanoskalaegenskaber, eller som konsekvens af scanningprobemikroskopian som en tværgående teknologi. At videnskabsfilosofien har fokus på både nanoskalaobjekter og SPM er ikke underligt set i lyset af, at det er aspekter, som mange nanoforskere selv hiver frem, når de skal forklare hinanden eller andre, hvorfor nanoforskning er interdisciplinær.

Alligevel er der grund til at kritisere denne beskrivelse af interdisciplinaritet i nanofeltet. Schmidt henter belæg for at kalde nanofeltets interdisciplinaritet for objekt-orienteret i Richard Feynmans tale, men kan aktuel nanoforskning karakteriseres på baggrund af ord, som en fysiker har brugt for 50 år siden? Det er tvivlsomt. Ligeledes kan det indvendes, at selvom SPM fungerede som samlingspunkt for nanoforskningen og sidenhen har opnået ikonisk status (Baird & Shew, 2004), foregår der megen nanoforskning i dag, der ikke beskæftiger sig med SPM. Interdisciplinariteten i disse forskningsaktiviteter lader sig næppe forklare ud fra historien om SPM. Eftersom nanofeltet undergår stor forandring, er det nødvendigt at forholde sig til aktuel nanoforskning i ønsket om at forstå feltets interdisciplinære natur.

Det er yderligere bemærkelsesværdigt, at de præsenterede bibliometriske og case-baserede analyser af interdisciplinaritet alle forholder sig med en vis distance til den viden, der skabes i nanoforskningen. De bibliometriske beskrivelser af indre karakteristika via emnekategorier forholder sig ikke direkte til den viden, som nanoartiklerne rummer, men blot tidsskrifternes emnekategorier. Schmidts analyse af objektorienteret interdisciplinaritet i nanofeltet berører heller ikke den viden, som nanoforskere producerer, men er baseret på en nanoforskers udtalelser *om* nanoforskning. Også Modys analyse af SPM i nanoforskningen forholder sig mere til, hvordan forskerne har struktureret sig omkring mikroskoper og forskningsspørgsmål, end det videnskabelige indhold i disse forskningsspørgsmål.

Når de mest fremtrædende beskrivelser af interdisciplinaritet i nanoforskning ikke forholder sig indgående til den videnskabelige viden, der produceres i nanofeltet, skabes et ufuldendt billede af interdisciplinaritet i nanoforskningen. For at gøre dette billede mere helstøbt er det nødvendigt, at der udføres analyser, som detaljeret belyser den viden, nanoforskere producerer.

Dette speciale bidrager således til en mere helstøbt beskrivelse af interdisciplinariteten i nanoforskningen, idet det undersøges, hvilke former for integration der eksisterer i aktuel nanoforskning, igennem en analyse af den viden der fremlægges i et udvalg af ph.d.-afhandlinger. Projektets motiver er todelte, idet integration i aktuel nanoforskning dels belyses for at skabe en mere nuanceret forståelse af, hvad nanoforskning egentlig er, og dels belyses integration i aktuel nanoforskning for at skabe en mere detaljeret forståelse af, hvad integration er.

I dette speciale analyseres den faglige integration i et udvalg af ph.d.-afhandlinger fra iNANO ved Aarhus Universitet, der alle er blevet skrevet af personer med en bacheloruddannelse i nanoteknologi.¹⁶ Til at belyse integrationen tages der afsæt i tre beskrivelser af interdisciplinaritet, som er fremtrædende inden for videnskabsfilosofien: Teorien om grænseobjekter, teorien om teknovidenskab og teorien om interfield-teoridannelse. Disse præsenteres i kapitel 3.

Opsamling

Interdisciplinær forskning og nanoforskning er begge aktiviteter, der er svagt definerede og svagt afgrænsede. Nanofeltet beskrives ofte som et lærebogseksempel på interdisciplinær forskning, men dens interdisciplinære natur er ikke velbeskrevet. I ønsket om at styrke interdisciplinær nanoforskning er en bedre forståelse af dens natur ønskværdig.

Beskrivelserne af interdisciplinaritet i nanoforskningen har primært været baseret på bibliometriske studier, der har analyseret forskningsfeltets interdisciplinaritet ud fra ydre karakteristika, som medforfatterskaber på tværs af institutter. Der er studier, der gennem bibliometriske analyser af emnekategorier forholder sig til den producerede videns indre karakteristika, men også disse analyser lider under, at detaljeniveau og underliggende nuancer forbliver ubeskrevet.

Der eksisterer casestudier, der har set på nanoforskningen med større detalje, men de eksisterende casestudier forholder sig ikke direkte til den viden, der produceres i nanoforskningen, og de har haft stort fokus på SPM og nanoskalaobjekter. Derfor giver de ikke et fyldestgørende billede af faglig integration i aktuel nanoforskning.

I dette speciale analyseres forskellige former for faglig integration i ph.d.-afhandlinger fra nanofeltet. Herved nuanceres de eksisterende beskrivelser af faglig integration i nanoforskningen, dels fordi de præsenterede analyser baserer sig på en detaljeret læsning af den videnskabelige viden, der produceres i nanoforskningen. Dels fordi specialets analyse baseres på aktuel nanoforskning, der nyligt er produceret af nanoforskere med en interdisciplinær bacheloruddannelse i nanoteknologi.

¹⁶ Uddannelsen blev oprettet under navnet *nanoteknologi*, men har sidenhen skiftet navn til *nanoscience*. Navneforandringen skete uden nogen tilhørende forandring i uddannelsens indhold.

2. Metodiske overvejelser

I dette kapitel beskrives, hvordan analysens teoretiske ramme er blevet udarbejdet, og hvordan det empiriske grundlag for analysen er blevet udvalgt. Derudover foretages en afgrænsning af projektet, og analysens generaliserbarhed belyses.

2.1 Udvælgelse af rammeteori og analysens udførsel

Som rammeteori for analysen bruges teorierne om grænseobjekter, teknovidenskab og interfield-teorier. Udvælgelsen af den rammesættende teori er foregået ved, at de udvalgte ph.d.-afhandlinger er gennemlæst sideløbende med en litteratursøgning efter fremtrædende beskrivelser af samarbejde og vidensdannelse på tværs af discipliner. Således er der sket en bevægelse frem og tilbage imellem litteraturen og empirien. Denne arbejdsgang er valgt, fordi det både er nødvendigt i søgningen efter rammesættende teoretiske analysemodeller at have en fornemmelse af afhandlingernes indhold og integration, og samtidig er det nødvendigt at fokusere læsningen af ph.d.-afhandlingerne med en teoretisk ramme.

Midtvejs i analysen er der blevet sparret med en videnskabelig koordinator på iNANO, Aarhus Universitet, dels for at diskutere nanofaglige spørgsmål, dels for at præsentere den foreløbige analyse og få respons herpå.

Bias i læsningen

Udarbejdelsen af analysen, hvor der er sket en bevægelse frem og tilbage mellem teori og empiri, skaber den svaghed, at læsningen af ph.d.-afhandlingerne bliver teoriladet, og således er det muligt, at den måde, afhandlingerne er blevet forstået og fortolket, er præget af den teori, der er blevet læst. Det er dog ikke et alvorligt problem for analysen, idet beskrivelsen af afhandlingernes integration ikke forsøger at være teorineutral. Tværtimod er det netop ønsket at vise, hvilke former for integration der bedst beskriver afhandlingernes integration. At læsningen har været positivt stemt over for at genkende teoretiske beskrivelser tjener til at sikre, at åbenlyse bekræftelser ikke er blevet overset.

Det er en større udfordring for analysen, at læsningen er præget af den nanofaglige uddannelse, jeg har taget: Jeg har specialiseret mig inden for molekylærbiologi på min kandidatuddannelse i nanoscience, og har kun på introducerende niveau beskæftiget mig med eksempelvis syntesekemi. Derfor er jeg formentlig mere tilbøjelig til at opfatte syntesekemi og nærtliggende sub-

discipliner som en samlet subdisciplin, idet jeg ikke kan se de nanofaglige variationer. Dette kan skabe bias i de identificerede integrationer, og er forsøgt imødekommet ved at søge ekstra hjælp i nanofaglig litteratur i læsningen af de afhandlinger, der har ligget uden for molekylærbiologien.

2.2 Afgrænsning af projektet

Analyse af vidensprodukt

I dette speciale foretages en detaljeret analyse af den viden, der produceres i nanoforskningen, og hertil er ph.d.-afhandlingen valgt som genstand for analysen. Således analyseres på et færdigt vidensprodukt og ikke vidensdannelsen som proces. Heraf følger, at integrationen betragtes som produkt, og der analyseres ikke på den forudgående integrationsproces. Det betyder, at den faglige integration betragtes løsrevet fra den sociale sammenhæng, den er produceret i, og de sociale, psykologiske og kognitive processer, der er indgået i vidensproduktionen, berøres ikke.

Man kan hævde, at viden er en kulturel størrelse, som ikke kan opfattes løsrevet fra den sammenhæng, den er produceret under. Dog er det et særkende for videnskabelig viden, at den har en værdi blot som tegn på et papir, der kan overleveres mellem kulturer, århundreder og individer, og derfor kan viden forstås løsrevet fra den sammenhæng, den produceres i. Derudover er analyser af interdisciplinær viden som kognitive produkter underrepræsenteret i den eksisterende litteratur om interdisciplinaritet i nanoforskning (som beskrevet i afsnit 1.3). Netop for at give et mere helstøbt billede af den integration, der foregår i nanoforskning, betragtes vidensproduktet løsrevet fra vidensdannelsen som proces.

Afdækning af former for integration

Til at skabe en mere detaljeret forståelse af den faglige integration i nanoforskning udvælges tre rammeteorier, og på baggrund af disse opstilles tre former for integration. De tre valgte rammeteorier beskriver ikke integration i interdisciplinære ph.d.-afhandlinger, men forskellige modeller for arbejde og vidensdannelse på tværs af discipliner. Inddragelsen af teorierne skal derfor forstås som et afsæt til at opstille tre tænkelige former for integration, som forsøges identificeret i afhandlingerne. I gennemgangen af de udvalgte teorier i kapitel 3 uddybes, hvordan de kan fungere som afsæt for at se på integration, og hvordan den pågældende integration kan identificeres.

I dette speciale opstilles tre former for faglig integration og deres forekomst i de udvalgte afhandlinger undersøges. Det interessante arbejde i at afdække, hvordan de opstillede former for integration er relaterede til hinanden, ligger dog uden for rammerne af dette speciale.

Afhandlingens generaliserbarhed

Med dette casestudie ønsker jeg at skitsere forskelligartethed og fællestræk ved de former for integration, der foregår i nanoforskningen. Det begrænsede datagrundlag i casestudiet begrænser dog konklusionernes generaliserbarhed.

Yderligere skal det understreges, at analysen af ph.d.-afhandlinger i nanoforskning fra Aarhus Universitet kun beskriver en del af den forskning, der kaldes interdisciplinær, og en del af den forskning, der kaldes nanoforskning. Det er eksempelvis muligt, at integration i forskning på tværs af fakulteter eller internt på eksempelvis humaniora ser anderledes ud end integration i nanoforskning. Ph.d.-afhandlingerne udgør ligeledes kun et udsnit af den forskningsaktivitet, der kaldes nanoforskning, idet megen nanoforskning foregår i forskergrupper, hvor det enkelte gruppe-medlem er uddannet inden for en monodisciplin. Det er plausibelt, at faglige integrationer i sådanne projekter adskiller sig fra den integration, der analyseres i dette projekt. Til gengæld er ph.d.-projekterne udført af nanofeltets yngste forskere, og analyser af disse giver måske det bedste billede af, hvordan morgendagens nanoforskning ser ud.

2.3 Udvalgelse af ph.d.-afhandlinger

Derfor ph.d.-afhandlingen

Introduktionen¹⁷ af ph.d.-afhandlinger i nanoforskning er valgt som genstand for analysen pga. ønsket om at analysere viden, der er produceret af forskere med en nanofaglig bachelorgrad. I andre forskningsprodukter, som eksempelvis posters eller tidsskriftartikler, er der normalt flere medforfattere, og det er sværere at identificere hvilken viden, der egentlig er blevet produceret af den interdisciplinært uddannede nanoforsker. Det er selvfølgelig ikke sådan, at en ph.d.-afhandling udarbejdes isolation, men ph.d.-afhandlingen er alligevel en af de få typer skriftligt produkt i forskningsverdenen med kun én forfatter.

For at begrænse datamængden baseres analysen ikke på de artikler, som ligger til grund for afhandlingerne, og heller ikke den viden, der præsenteres som supplerende data i appendiks.

År for aflevering

Analysen baseres på afhandlinger, der er blevet færdiggjort i 2012, og dette selektionskriterium har tre begrundelser. For det første kan det med rimelighed antages, at brugen af årstal for aflevering som kriterium for afgrænsning skærer et bredt og tilfældigt snit igennem de afhandlinger, der bliver produceret. Det kan ikke udelukkes, at afhandlingerne fra 2012 adskiller sig markant fra afhandlingerne fra 2011, men der er ikke grund til at antage, at det er tilfældet.

¹⁷ *Introduktion* henviser ikke til det enkelte kapitel, der kaldes introduktion, men hele den tekst, der går forud for appendiks og de vedlagte tidsskriftsartikler. For de udvalgte afhandlinger er introduktionerne mellem 64 og 169 sider lange.

For det andet anvendes færdiggørelsesåret, fordi nanofeltet er så ungt, at der formodentlig stadig sker en tidlig udvikling. En analyse af afhandlinger på tværs af årgange kan skabe et rodet billede, dels fordi forfatternes uddannelsesbaggrund har ændret sig med årene, og dels fordi forskningsfeltet ændrer sig med tiden.

For det tredje er årgangen 2012 valgt, fordi det var det senest afsluttede år, da projektet blev afgrænset i efteråret 2013. På denne måde tegnes det mest aktuelle billede af faglig integration i nanoforskning.

I år 2012 blev der i alt færdiggjort 20 ph.d.-afhandlinger ved iNANO, Aarhus Universitet.¹⁸

Bacheloruddannelse i nanoteknologi

Af de 20 afhandlinger, der blev afsluttet i 2012, udvælges de ph.d.-afhandlinger, der er skrevet af personer med en bacheloruddannelse i nanoteknologi fra iNANO, Aarhus Universitet. Det er gjort af én overvejende grund: Det er meget almindeligt på iNANO, at ph.d.-studerende har forskellige faglige og nationale baggrunde, og dette medfører formentlig en vis varians i afhandlingernes form, fokus og ikke mindst deres interdisciplinære karakter. Man kan forestille sig, at integrationsprocessen er anderledes hos personer med en monodisciplinær bacheloruddannelse, der senere vælger at lave interdisciplinær forskning. Eksempelvis kan de have større tendens til at fokusere på monodisciplinen i deres interdisciplinære arbejde (jf. Evans & Randalls, 2008). Afhandlinger af personer med en bacheloruddannelse i nanoteknologi eller -videnskab fra et andet universitet er blevet fravalgt, fordi bl.a. uddannelsernes forskellige opbygning og kursusudbud også kan svække analysens resultater.

De udvalgte cases

Af de 20 afhandlinger, der blev færdiggjort i 2012, er kun ni af dem udført af ph.d.-studerende, der har en bacheloruddannelse i nanoteknologi fra Aarhus Universitet. Heraf var to afhandlinger ikke offentligt tilgængelige grundet ikke-publiceret materiale i efteråret 2013, da projektet blev afgrænset. Analysen er derfor baseret på i alt syv afhandlinger.

Selvom analysen beror på et sæt af afhandlinger inden for et kalenderår for at reducere bias i de udvalgte cases, er der blandt de udvalgte afhandlinger en overrepræsentation af afhandlinger inden for kemi. Styrken ved en detaljeret caseanalyse af ph.d.-afhandlinger er muligheden for at belyse variationer og forskelligartethed i nanoforskningens faglige integration. En overrepræsentation af kemi vil dog kunne reducere mængden af forskelle, der optræder i de udvalgte afhandlinger.

¹⁸ En samlet oversigt kan ses i årsrapporten fra iNANO 2012.

3. Analysens teoretiske ramme

I dette kapitel beskrives de tre former for faglig integration, som i analysens kapitel 5 forsøges identificeret i hver af de udvalgte ph.d.-afhandlinger: *Integration via grænseobjekter*, *integration qua teknovidenskabelighed* og *integration via interfield-teoridannelse*. Der redegøres for de tre videnskabsfilosofiske modeller af forskning på tværs af discipliner, der danner grundlag for de opstillede former for integration, og det motiveres, hvorfor netop disse modeller er valgt. Kapitlet afsluttes med en beskrivelse af, hvordan discipliner kategoriseres, og hvilke disciplinære elementer analysen beror på.

3.1 Integration via grænseobjekt

Samarbejde om et fælles objekt

Begrebet *grænseobjekt* (eng.: boundary object) blev introduceret af sociologen Susan L. Star og videnskabsfilosoffen James R. Griesemer med ønsket om at forklare, hvordan folk fra forskellige sociale verdener samarbejder (Star & Griesemer, 1989). I analysen af et projekt på et zoologisk museum, hvor flere faggrupper og amatører samarbejdede om indsamlingen af forskellige plante- og dyrearter i Californien, peger Star og Griesemer på, at særligt standardisering af metoder og udviklingen af grænseobjekter er centrale i samarbejdet (Star & Griesemer, 1989, s. 392). Grænseobjekter karakteriseres af Star og Griesemer som genstande af konkret eller abstrakt natur, der er fleksible nok til at kunne tilpasses forskellige synspunkter, men stadig robuste nok til at bevare sin identitet på tværs af disse synspunkter:

This [boundary object] is an analytic concept of those scientific objects which both inhabit several intersecting social worlds [...] and satisfy the informational requirements of each of them. [...] They [boundary objects] have different meanings in different social worlds but their structure is common enough to more than one world to make them recognizable, a means of translation (Star & Griesemer, 1989, s. 393).

Et tænkt eksempel på et forskningssamarbejde, der baseres på et grænseobjekt, kunne være en gruppe molekylærbiologer og fysikere, der arbejder sammen om at afbilde og karakterisere et DNA-konstrukt inden for DNA-teknologien. I dette samarbejde kan DNA-konstruktet fungere som grænseobjekt, fordi både fysikere og molekylærbiologer har tilstrækkelig fælles forståelse af, hvad DNA-konstruktet er, til at kunne samarbejde om det. Samtidig kan biologerne opfatte DNA-

konstruktet som et lille biologisk molekyle, der interagerer med biologiske processer, og fysikerne kan opfatte det som et stort molekyle med bestemte elektroniske egenskaber. Således kan forskellige disciplinære forståelser opretholdes sideløbende med en fælles forståelse.

Grænseobjektet er siden dets introduktion af Star og Griesemer blevet anvendt som begrebet inden for flere analytiske videnskaber. Blandt andet er grænseobjekter blevet identificeret i radiologiske billeder i samarbejdet blandt sundhedsfagligt personale (Heldal, 2010). Det er blevet vist, hvordan "genet for kræft" fungerer som grænseobjekt mellem patienter og sundhedsfagligt personale, fordi parterne kan kommunikere meningsfyldt, selvom de ikke tillægger "genet for kræft" den samme betydning (Prior, 2007). Ved at indføre grænseobjekter i form af begrebskort i en interdisciplinær forskningsgruppe, er det yderligere blevet vist, at grænseobjekter aktivt kan introduceres til at støtte interdisciplinært samarbejde (Wilson & Herndl, 2007).

Hvorfor lede efter grænseobjekter?

Grænseobjekter er relevante at identificere i de udvalgte ph.d.-afhandlinger, eftersom grænseobjekter har modtaget meget opmærksomhed i videnskabsfilosofiens beskrivelse af interdisciplinariet. I "*Trading zones and interactional expertise*" af videnskabsteoretikerne Harry Collins, Robert Evans og Michael E. Gorman inddrages grænseobjekter til at belyse, hvordan udveksling af viden foregår mellem forskellige fagligheder, der som udgangspunkt har svært ved at kommunikere (Collins, Evans, & Gorman, 2007). Det beskrives, hvordan kommunikationsproblemer kan overkommes forskelligt, afhængigt af om samarbejdet præges af samarbejde eller tvang, og ensartethed eller heterogenitet. Collins et. al peger på, at grænseobjekter kan spille en stor rolle i samarbejde, der er karakteriseret ved høj grad af heterogenitet i den videnskabelige kultur og høj grad af samarbejde. Dette samarbejde kan foregå ved udviklingen af interaktionsekspertise, hvor gruppens medlemmer bliver indført i hinandens sprog, og derved bliver i stand til at samtale om de andre gruppemedlemmers forskning uden at være i stand til egentlig at bidrage til deres forskning. Alternativt kan samarbejdet foregå ved hjælp af grænseobjekter, hvor de involverede personer ikke har et fælles videnskabeligt sprog, men til gengæld viden om en fælles genstand, der således danner et materielt udgangspunkt for deres samarbejde. Et sådan grænseobjekt kan eksempelvis være den genstand, som gruppen samarbejder om at udvikle (Collins et al., 2007, s. 663). Gorman uddyber grænseobjekternes rolle i interdisciplinært samarbejde i "*Levels of Expertise and Trading Zones: Combining Cognitive and Social Approaches to Technology Studies*" (Gorman, 2005). Her peger han på, at grænseobjekter fungerer som fokuspunkter for samarbejde, der er karakteriseret ved ligeværdighed (Gorman, 2005, s. 292).

Der eksisterer desuden flere caseanalyser, der demonstrerer, hvordan grænseobjekter kan genfindes i interdisciplinær forskning. Eksempelvis er det blevet beskrevet, at siliciumoverfladen Si(III)7x7 blev et vigtigt grænseobjekt på grænsen mellem overfladevidenskab og scanningtunnelmikroskopi (C. C. M. Mody & Lynch, 2009, s. 29). Et andet eksempel ses i artiklen "*The emergence of interdisciplinary knowledge in problem-focused research*" af Anna Wesselink (Wesselink, 2009).

I gennem Wesselinks analyse af et landplanlægningsprojekt vises, at den interdisciplinære forskning styrkes, når et grænseobjekt fungerer som formål for projektet. Disse caseanalyser af grænseobjekter i interdisciplinært arbejde tjener sammen med Collins et al. og Gormans teoretiske gennemgang af grænseobjekter i interdisciplinær samarbejde til at motivere hypotesen om, at integrationen i afhandlingerne kan forekomme i form af grænseobjekter.

Derudover er grænseobjekter relevante at identificere, fordi beskrivelsen af integration igennem grænseobjekter korresponderer med forestillingen om, at nanoskalaobjekter er centrale i nanoforskning (afsnit 1.3). Derfor virker det plausibelt, at denne model vil kunne beskrive nogle af de faglige integrationer i afhandlingerne. Ved at lede efter grænseobjekter og dernæst undersøge om disse grænseobjekter er nanoskalaobjekter, er det desuden muligt at undersøge den påstand, at nanoforskning er interdisciplinær pga. integration igennem nanoskalaobjekter.

Afgrænsning: Identifikation af et grænseobjekt

Star og Griesmers beskrivelse af grænseobjekter fungerer i dette speciale som afsæt for at lede efter integration gennem grænseobjekter. Det interdisciplinære samarbejde, hvori Star og Griesmer identificerer grænseobjekter, er dog meget anderledes fra de ph.d.-afhandling, som analyseres i specialet. Blandt de væsentligste forskelle er, at i) grænseobjektet er introduceret som et middel til kommunikation, og der optræder ikke direkte flere kommunikerende parter i afhandlingerne, ii) grænseobjekt er indført til at beskrive kommunikation mellem amatører og fagfolk, og i afhandlingerne foregår integration mellem to eller flere fag, og derudover iii) er det væsentligt, at Star og Griesmers grænseobjekter ikke nødvendigvis skaber integration; faktisk nævnes integration slet ikke i deres artikel.

Hvad angår punkt ii) kan der hentes støtte i Collins et al. og Gormans beskrivelse af grænseobjekter, idet de også bruger begrebet til at beskrive samarbejde forskere imellem. Både punkt i) og iii) er derimod aspekter, hvor inddragelse af grænseobjekter som analytisk redskab i dette projekt adskiller sig fra tidligere brug. Både Collins et al., Gorman samt Star og Griesmer opfatter grænseobjektet som et middel til kommunikation, der kan opstå mellem mennesker, og så vidt vides, er det første gang, grænseobjekter forsøges identificeret i et vidensprodukt, der ikke rummer flere kommunikerende parter.

Brugen af grænseobjekter, som analytisk redskab til at identificere faglig integration i ph.d.-afhandling, adskiller sig således fra den traditionelle brug af grænseobjekter, og begrebets betydning i dette projekt må indkredses. Derfor opstilles tre kriterier, som en genstand skal opfylde, for at kunne kaldes et grænseobjekt. Ud fra følgende tre kriterier kan eksistensen af grænseobjekter i den enkelte afhandling be- eller afkræftes:

1. Et grænseobjekt forbinder to eller flere discipliner. Et objekt, der ikke forbinder discipliner, befinder sig ikke på en disciplinær grænse, og kan ikke kaldes grænseobjekt.

2. Et grænseobjekt har en central rolle i det pågældende videnskabelige projekt. Et grænseobjekt støtter arbejde på tværs af discipliner. Hvis genstanden ikke er central i projektet, vil forskning ikke blive hjulpet væsentligt af denne genstand.
3. Den forbindelse, som grænseobjektet danner mellem to eller flere discipliner gennem grænseobjektet, skal være integrerende. Dette afviger fra Star og Griesmers beskrivelse af et grænseobjekt. For dette speciale, hvor forskellige former for integration ønskes identificeret, er et grænseobjekt kun interessant, hvis det rummer en integration.

I analysen vil et grænseobjekt således opfattes som en abstrakt eller konkret genstand, der er central for forskningens formål, og som integrerer forskellige discipliner.¹⁹

3.2 Integration qua teknovidenskabelighed

En ny forskningsaktivitet

Flere har peget på, at der i nanoforskningen er tæt forbindelse mellem videnskab og teknologi. Denne tendens er blevet beskrevet på mange måder, men her fokuseres på videnskabsfilosoffen Alfred Nordmanns beskrivelse af nanoforskningen som en *teknovidenskab* (Nordmann, 2008). Teknovidenskab er en særskilt type forskningsaktivitet, der hverken kan karakteriseres som klassisk videnskab eller klassisk teknologi. Nordmann beskriver forskellen mellem traditionel videnskabelig forskning og teknovidenskabelig forskning ved at pege på forskelle i forskningsartikler:

A typical research article of classical science states a hypothesis, offers an account of the methods, looks at the evidence produced, and assesses the hypothesis in light of the evidence. It participates in a public process of evaluating propositions, of finding certain beliefs or statements true or false, and of seeking certainty even where it is impossible to attain. In contrast, a technoscientific research article provides testimony to an acquired capability. It offers a sign or proof of what has been accomplished in the laboratory and tells a story of what has been done. [...]

As opposed to the truth or falsity, certainty or uncertainty of hypotheses, the hallmarks of technoscientific knowledge are robustness, reliability, resilience of technical systems or systematic action (Nordmann, 2008, s. 16).

En vigtig sondring imellem teknovidenskab og traditionel videnskab er således, at traditionelle forskningsresultater er motiveret af et ønske om at forstå og evalueres på deres sandhed, mens teknovidenskabelige resultater er motiveret af ønsket om at demonstrere, at noget er praktisk muligt og evalueres på deres robusthed.

Et tænkt eksempel på et stykke traditionel videnskabelig forskning kunne være et projekt, hvor et materiales kemiske sammensætning karakteriseres, og baseret herpå forklares dets kemi-

¹⁹ I afsnit 3.4 redegøres for, hvad der menes med disciplin.

ske egenskaber. Projektet er drevet af ønsket om at forstå sammenhængen mellem kemisk sammensætning og kemiske egenskaber, og projektet vil blive evalueret på, om den beskrevne sammenhæng mellem kemisk sammensætning og egenskaber stemmer overens med etableret teori, eller om sammenhængen kan genfindes andre steder (dvs. om sammenhængen er sand). Et eksempel på et stykke teknovidenskabelig forskning kunne være et projekt, hvor et nyt materiale med særlige kemiske egenskaber forsøges fremstillet i laboratoriet. Projektet er drevet af ønsket om at demonstrere, at det er praktisk muligt at fremstille et sådan materiale, og projektet vil blive evalueret på, om fremstillingsproceduren er simpel at udføre, hvor få biprodukter der dannes, og hvor ofte fremstillingen går som forventet (dvs. om fremstillingen er robust).

Nordmann argumenterer for, at nanofeltet er teknovidenskabeligt, fordi nanoforskning på den ene side har et teknologisk sigte og kun svag interesse i at udvikle teorier og forstå verden, mens teorier og begrebslige problemer samtidig spiller en stor rolle i analysen af den teknovidenskabelige udfordring.

As such, nanotechnoscience is just technical tinkering, just product development, just an attempt to design solutions to societal problems or to shape and reshape the world. However, the conceptual and physical tools it tinkers with do not come from ordinary experience, from common sense and a craft tradition but concentrate within them the labors of science. So, the "science" of "nanotechnoscience" is what goes into it. What comes out is skill knowledge and it does not rely on a corresponding scientific understanding. As long as one can produce an effect in a reasonably robust manner, it does not really matter whether scientific understanding catches up (Nordmann, 2008, s. 16).

Hvorfor lede efter teknovidenskab?

Motivationen for at lede efter integration qua teknovidenskabelighed i ph.d.-afhandlingerne er tredelt. Først og fremmest bliver fremkomsten af teknovidenskaber ofte knyttet til fremkomsten af interdisciplinært arbejde med et mere eller mindre implicit udsagn om, at interdisciplinær forskning er kausalt forbundet med ophævelsen af grænsen mellem teknologi og videnskab (Schummer, 2004a, s. 10). Når det i dette speciale undersøges, om afhandlingernes integration kan knyttes til teknovidenskabelige karakteristika, er det derfor dels med et ønske om at undersøge belægget for den påståede sammenhæng imellem teknovidenskab og interdisciplinaritet.

Valget er derudover motiveret af, at Nordmanns beskrivelse af nanoteknovidenskaben lægger op til, at teknovidenskabeligheden knytter sig til feltets interdisciplinære natur. I sin analyse af, hvordan nanofeltet bruger teorier anderledes end klassiske discipliner, beskriver Nordmann, at nanoforskere gør brug af etablerede teorier fra flere forskellige discipliner og strækker dem, så de kan belyse nanoskalafænomener, selvom teorierne egentlig ikke er lavet til at beskrive disse:

Rather than claim that the complex phenomena of the nanoscale can be described such that the concepts of the closed theory now apply to them, they draw on closed theories eclectically, stretching them beyond their intended scope of application to do some partial explanatory work at the nanoscale (Nordmann, 2008, s. 5).

Ifølge Nordmann er et eklektisk teorivalg karakteristisk for nanoforskningen, idet nanoforskere inddrager forskellige etablerede teorier, der gælder i mere simple situationer, men som hver især kan beskrive dele af det komplekse nanoskalafænomen, der studeres. Det er således muligt, at dette eklektiske teorivalg medfører en faglig integration i form af inddragelsen af teorier fra forskellige discipliner, og det er interessant at undersøge, om der findes eksempler herpå i de udvalgte ph.d.-afhandlinger. I forlængelse heraf er ønsket om at identificere teknovidenskabelig integration også motiveret af, at jeg under flere diskussioner med medstuderende har hørt udtalelser af typen: "nano er en værktøjskasse fyldt med redskaber fra mange forskellige fag". Disse studerende peger altså på, at nanoforskning er interdisciplinær qua de tværdisciplinære teknikker, som en nanoforsker kan bruge. Denne opfattelse understøtter Nordmanns udlægning af nanoteknologi, idet det eklektiske teorivalg, som Nordmann beskriver, meget vel kan betyde, at nanoforskere er mere tilbøjelige til at vælge teknikker og metoder fra forskellige felter.

Tredje og sidst er ønsket om at analysere teknovidenskabelige elementer motiveret af videnskabshistorikeren Cyrus Modys analyse af scanningprobemikroskopi i nanofeltets interdisciplinaritet (afsnit 1.3). Modys analyse kan tolkes således, at den gensidige afhængighed mellem nanofeltets forskerverden og scanningprobemikroskopiens teknologiske verden var medvirkende til, at nanoteknologien blev interdisciplinær. Dermed giver hans analyse grund til at undersøge, om den interdisciplinære natur i aktuel nanoforskning også skal forstås i lyset af et samspil mellem teknologi og videnskab.

Afgrænsning: Identifikation af teknovidenskabelig integration

For at kunne afgøre om den faglige integration i afhandlingerne kan knyttes til teknovidenskabelige karakteristika, er det nødvendigt at konkretisere, hvordan det afgøres, om en afhandling har teknovidenskabelige karakteristika. Dertil opstilles et begrænset antal kriterier, der kan bruges til be- eller afkræfte, om afhandlingerne er teknovidenskabelige. Det begrænsede antal kriterier udspænder en forenklet version af Nordmanns teknovidenskabsbegreb.

Med udgangspunkt i Nordmanns beskrivelse af nanoteknologi, opfattes en afhandling som havende teknovidenskabelige karakteristika, hvis følgende to kriterier er opfyldt:

1. Afhandlingens primære formål er at demonstrere, at et bestemt resultat er praktisk muligt at opnå i laboratoriet.
2. Opgavens resultater evalueres på robusthed frem for sandhed.

Når afhandlinger med teknovidenskabelige karakteristika er identificeret, undersøges det, om teknovidenskabeligheden skaber faglig integration. Dette afgøres ud fra, om et af følgende to kriterier er opfyldt:

- a) De teoretiske perspektiver, der inddrages i analysen af den opstillede problemstilling, involverer teorier fra forskellige discipliner.
- b) Der anvendes metoder og apparater fra forskellige discipliner i analysen eller løsningen af den opstillede problemstilling.

Grundet specialets begrænsede omfang er analysen kun baseret på de teorier, der præsenteres i afhandlingernes teoriafsnit samt de metoder, der gennemgås i afhandlingernes metodeafsnit.

3.3 Integration via interfield-teori

En teori på tværs

I 1977 udgav videnskabsfilosofferne Lindley Darden & Nancy Maull artiklen "*Interfield Theories*" (Darden & Maull, 1977). Heri beskrives, at videnskabelige teorier kan fungere som brobyggere mellem videnskabelige felter, og at disse *interfield-teorier* danner relationer mellem forskellige felter i naturvidenskaben. Relationen mellem to felter kan have forskellig karakter afhængigt af, hvilken type interfield-teori der er opstået mellem de to felter. Darden og Maull præsenterer fire typer relationer:

1. Et felt kan specificere den fysiske placering af en enhed eller proces beskrevet i et andet felt. Jeg kalder denne relation for en *hvor-relation*. Et eksempel herpå kan være, at man med cellebiologien er i stand til at lokalisere et protein, hvis funktion beskrives i biokemien. I tilfælde, hvor en enhed placeres som delelement i en større helhed, der beskrives i et andet felt, er der mere specifikt tale om en *part-whole-relation*.
2. Et felt kan beskrive den fysiske natur af en enhed eller proces beskrevet i et andet felt. Jeg kalder denne relation for en *hvad-relation*. Et eksempel herpå kan være, at kardiologien beskriver hjertet som organ, mens hjertets fysiske natur beskrives af histologiens vævslære.
3. Et felt kan beskrive strukturen af en enhed eller proces, hvis funktion bliver beskrevet i et andet felt. Jeg kalder denne relation for en *struktur/funktion-relation*. Et eksempel herpå kan være, at et protein, hvis struktur bestemmes af molekylærbiologien, har en funktion, der beskrives af neurologien.
4. Et felt kan beskrive årsagerne til en effekt, der beskrives i et andet felt. Jeg kalder denne relation for kausalrelation. Et eksempel herpå kan være øjets lysfølsomhed, der beskrives af lægevidenskaben, men er forårsaget af fotosensitive molekyler, der beskrives af biofotonik.

Det er værd at understrege, at ingen af de fire relationer reducerer det ene felt til mere grundlæggende elementer i et andet felt, og på den måde var indførelsen af interfield-teorier nytænkende i en tid, hvor det reduktionistiske synspunkt, at ethvert fænomen kan forklares ud fra egen-

skaber ved dets bestanddele, var dominerende både blandt videnskabsteoretikere og videnskabsfolk (Brigandt, 2013, s. 2).

Hvorfor lede efter interfield-teorier?

Forekomsten af integration gennem interfield-teoridannelse i de udvalgte ph.d.-afhandlinger er relevant at undersøge af to grunde. Først og fremmest har beskrivelsen af interfield-teorier haft en fremtrædende rolle i videnskabsfilosofiens ønske om at beskrive integration som en ikke-reduktionistisk proces, og flere casestudier viser, hvordan interfield-teorier kan identificeres i videnskaben. Darden og Maull demonstrerer, hvordan interfield-teorier spillede en vigtig rolle i udviklingen inden for de biologiske fag (Darden & Maull, 1977). Deres analyser peger på, at kromosomteorien dannede bro mellem cytologi og genetik, at operon-teorien dannede bro mellem genetik og biokemi, og at teorien om allosterisk regulering forbandt biokemien med fysisk kemi. Siden Darden og Maulls analyser, er interfield-teorier blevet brugt i analyser af interdisciplinær videnskab og dets udvikling. Blandt de mest fremtrædende er William Bechtels analyser af biokemiens fremkomst, cellebiologiens fremkomst samt udviklingen af biologiske mekanismer på tværs af cellebiologi og biokemi (Bechtel, 1986a, 1993, 2007).

En anden grund til at lede efter integration via interfield-teoridannelse er af mere metodisk karakter. Interfield-teorier dækker en form for integration, der er meget forskellig fra integration igennem grænseobjekter og integration qua teknovidenskabelighed, idet teorier og teoridannelse ikke nødvendigvis indgår i de øvrige typer af integration. For at udspænde et større felt af integrationsformer, vælges interfield-teoridannelse som tredje udspændingspunkt.

Afgrænsning: Identifikation af interfield-teoridannelse

Det er gennemgående for Bechtels, såvel som Darden og Maulls arbejde, at analyserne af biovidenskabernes udvikling er af historisk karakter. I Bechtels analyse af cellebiologiens fremkomst beskriver han, at udviklingen af cellefraktionering og elektronmikroskopet førte til, at cytologiens ønske om at identificere de strukturelle elementer i cellen og biokemiens ønske om at forstå de kemiske reaktioner, kunne integreres i cellebiologiens ønske og evne til at lokalisere bestemte reaktioner i de rette cellulære strukturer (Bechtel, 2007, s. 11). Bechtel skriver selv, at udviklingen af cellefraktionering *i retrospekt* var det første skridt mod dannelse af det nye felt cellebiologi (Bechtel, 2007, s. 12). Således antyder Bechtel, at det historiske perspektiv giver et klarsyn.

Det er relevant at fremhæve, at både Darden og Maull såvel som Bechtel har lavet *historiske* analyser af interfield-teorier i interdisciplinær forskning, fordi det udgør en væsentlig forskel mellem de eksisterende analyser og den analyse, der præsenteres i dette speciale. Her belyses aktuel forskning uden mulighed for at historien kan vejlede under analysen. Udfordringerne herved diskuteres i afsnit 7.2.

Det skal yderligere understreges, at interfield-teorier opstår og integreres i den etablerede viden, hvor de med tiden bliver en del af den etablerede viden og holder op med at fremstå som

interfield-teorier. Formålet med specialets analyse er ikke at kortlægge allerede etablerede interfield-teorier eller rester heraf, men blot undersøge om den nye viden, der præsenteres i afhandlingerne, indeholder dannelsen af *nye interfield-teorier*.

I gennemgangen af Darden og Maulls interfield-teori er felter og discipliner blevet omtalt, som var det en sproglig variation over samme fænomen. Ifølge Darden og Maull består et felt dog af et centralt problem, et domæne af fakta knyttet til problemet, generelle forklaringsfaktorer og forventninger til hvordan problemet løses, foruden teknikker, metoder og nogle gange også teorier (Darden & Maull, 1977, s. 44). Deres beskrivelse af felt er således mere snæver end en generel opfattelse af disciplin, idet en disciplin ikke nødvendigvis har et fællesdefinerende problem. Det er alligevel blevet foreslået, at de relationer, som interfield-teorier skaber mellem felter, måske også dækker de relationer, der kan opstå mellem discipliner (Bechtel, 1986b, s. 44). Derfor ledes der i dette speciale efter interfield-teorier mellem discipliner.

På baggrund af ovenstående overvejelser opstilles følgende kriterier, der begge skal være opfyldt, for at integration via interfield-teoridannelse identificeres i en ph.d.-afhandling:

1. En interfield-teori skal være central for opgavens videnskabelige bidrag. Hvis ikke ny interfield-teoridannelse er central for det videnskabelige bidrag, er den tilhørende integration heller ikke.
2. En interfield-teori skaber en relation mellem to eller flere discipliner og har en eller anden grad af generalitet knyttet til sig.

3.4 Afgrænsning: Identifikation af discipliner og subdiscipliner

I dette speciale undersøges integration mellem *discipliner*, og det er derfor nødvendigt at udfolde, hvordan discipliner kategoriseres og disciplinære elementer i afhandlingerne identificeres.

I det indledende afsnit 1.1 står beskrevet, at et rummeligt disciplinbegreb er ønskværdigt, og gennemgangen af analysens rammeteori viser hvorfor: Blandt de tre teorier, der anvendes som grundlag for de opstillede former for integration, er der forskel på det grundlæggende disciplinbegreb. Et rummeligt disciplinbegreb kan indfange alle tre forståelser af *disciplin*. Dog er det nødvendigt at konkretisere, hvad der menes med disciplin, for at kunne analysere integration af discipliner i de udvalgte ph.d.-afhandling. Kun derved kan disciplinerne kategoriseres, og integrationen mellem discipliner identificeres.

Klassificering af discipliner og subdiscipliner

Den anvendte klassificering og navngivning af discipliner tager udgangspunkt i et ønske om at kortlægge discipliner og integration, der mimer den måde, forfatterne bag afhandlingerne selv opfatter discipliner og integration. Det ligger uden for rammerne af dette projekt at undersøge

dette aspekt, men der er benyttet en disciplininddeling, der *tilsigter* at beskrive discipliner og integration ud fra den ph.d.-studerendes eget perspektiv.

Med udgangspunkt heri er der i klassifikationen og inddelingen af viden i discipliner skelet til, hvordan viden opdeles i forskellige kurser under nanouddannelsen. Dette er valgt med tanke på videnskabsteoretiker Thomas Kuhns beskrivelse af videnskabelige discipliner. Kuhn lægger vægt på, at oplæring i en videnskabelig disciplin særligt sker gennem *eksemplars*, hvor de studerende præsenteres for problemstillinger, som disciplinen er i stand til at beskrive, samt løsninger på disse problemer (Kuhn, 1962b, s. 186). Da denne indførsel i problemer og problemløsninger primært sker gennem de kurser, som den formelle uddannelse udbyder, er det plausibelt, at kurserne udgør konturerne af den disciplinopfattelse, som den enkelte ph.d.-studerende selv har.

Men kursusopdeling alene kan ikke gøre det. Discipliner vil blandt andet ofte være større og rumme mere forskelligartet viden, end kurser gør. Derfor er der under analysen kun skelet til kursusudbud, og i kombination med en naturvidenskabelig indsigt har de to ting i samspil ført til en indledende kategorisering af discipliner i hver ph.d.-afhandling. Næste skridt har været at sammenholde specialiseringsgraden i de identificerede discipliner.

Som beskrevet i introduktionen, er disciplin en term, der både bruges til at beskrive store vidensfelter som fysik og kemi, mens også mere specialiserede vidensfelter som halvlederfysik eller syntesekemi. I analysen rejser det en stor udfordring: Når jeg vil identificere integration mellem forskellige discipliner må jeg have for øje, om jeg sammenligner to discipliner af samme specialiseringsgrad. I Schummers bibliometriske analyse af interdisciplinaritet (afsnit 1.3), opstår netop en skævhed i analysen, fordi han opfatter og kategoriserer alle biologiske videnskaber som én samlet disciplin, og sammenligner disse med mere specialiserede discipliner som materialevidenskab og elektroingeniørvidenskab. Tilsvarende ville det i denne analyse være misvisende at belyse sammenfletning mellem biologi og halvlederfysik i den ene afhandling, biologi og kvantekemi i den næste. Dette kunne give det misvisende indtryk, at den samme disciplin, biologi, indgår i flere integrationer, når det er forskellige subdiscipliner af biologien, der optræder i de forskellige afhandlinger. Tilsvarende ville det også være misvisende, hvis en sammenfletning mellem fysik og kvantefysik beskrives som en faglig integration, eftersom kvantefysik kan siges at være en subdisciplin, der ligger inden for det større vidensfelt, fysik. Dermed kunne integration identificeres overalt, eftersom afhandlinger, der rummer en subdisciplin, f.eks. kvantefysik, nødvendigvis også rummer den tilhørende disciplin, f.eks. fysik.

For at begrænse dette problem er der, efter en indledende kategorisering af discipliner, sket en omkategorisering. De identificerede discipliner er blevet ændret til discipliner/subdiscipliner med højere eller mindre specialiseringsgrad, i de tilfælde hvor det var nødvendigt for at gøre de identificerede subdiscipliner sammenlignelige.

Den anvendte måde at kategorisere discipliner på, med skelen til kursusudbud og graden af specialisering, er ikke problemfri. Kursusudbud varierer langt mere over tid og sted, end opfattelsen af discipliner gør. Desuden kan to kurser godt rumme det samme stof, men tilhøre forskellige

subdiscipliner som eksempelvis kvantefysik for fysikere og kvantefysik for kemikere. I bestræbelserne på at identificere abstrakte størrelser som discipliner i konkret viden, kommer analysen uundgåeligt til at lide under den svaghed, der ligger i at kategorisere viden i discipliner. Dette tages op igen i afsnit 7.2.

Identifikation af disciplinære elementer i afhandlingerne

En kategorisering af viden i forskellige discipliner er nødvendig for at kunne identificere integration mellem discipliner i konkrete vidensprodukter, men det er herudover nødvendigt, at afgrænse hvilke videnselementer, kategoriseringen baseres på.

Kategoriseringen af discipliner læner sig op af Kuhns beskrivelse af eksemplars. Derfor giver det god sammenhæng, at de videnselementer, der kigges efter i afhandlingerne, knytter sig til Kuhns beskrivelse af den disciplinære matrice. Denne består af symbolske generalisationer, ontologiske og heuristiske overbevisninger og modeller, fælles værdier samt eksemplars (Kuhn, 1962b, s. 181-186). Grundet specialets begrænsede omfang identificeres forskellige discipliner i de enkelte afhandlinger dog kun ved at lede efter ontologiske overbevisninger, teorier og metodevalg. Kuhn bruger ikke begrebet *teori*, men *symbolske generalisationer*. Dog anvendes i dette speciale et teoribegreb (gennemgås nedenfor), der er bredt nok til at kunne harmonere med Kuhns begreb *symbolske generalisationer*. Desuden taler Kuhn ikke direkte om metodevalg, som en del af den disciplinære matrice, men det indgår som et element i de eksemplars, som Kuhn beskriver.

Mens ontologiske overbevisninger og metodevalg er eksplicite i afhandlingerne, er teorier det ikke. For at kunne gennemføre analysen, er det nødvendigt at afgøre, hvordan teorier identificeres, og dette er vanskeliggjort af teoriens uklare natur: Er det den enkelte formel, diagrammet hvor teorien træder frem eller blot ethvert generelt udsagn? I dette speciale anvendes en forståelse af teori-begrebet, der læner sig op ad videnskabsfilosoffen Ronald Gieres beskrivelse af teorier (Giere, 1990). Giere beskriver teori som bestående af populationer af modeller og hypoteser, der forbinder modellerne til reelle systemer. Teorier er ikke en konkret formulering eller en bestemt sætning, der kan identificeres i en tekstbog. Teorier er bagvedliggende påstande, der kommer til udtryk i de opstillede modeller, formuleret både med ord, tegn og diagrammer, samt i de opstillede hypoteser, der beskriver sammenhængen mellem repræsentationen og den reelle verden (Giere, 1990, s. 85). I analysen af faglig integration i ph.d.-afhandlingerne tages der udgangspunkt i Gieres beskrivelse af videnskabelige teorier, hvorved teorier opfattes som påstande om et princip eller fænomen, der beskrives både igennem diagrammer, formler, tekst, og hvad der ellers optræder af tegn i afhandlinger. På den måde grupperes den viden, der beskrives i teoriafsnittene, under forskellige teorier. Eksempelvis opfattes gennemgangen af den superkritiske tilstand i *afhandlingen om nanopartikelsyntese*, som en teori om den superkritiske tilstand der kommer til udtryk i generelle udsagn om stoffers mulige tilstandsformer, et fasediagram for vand, og empiriske resultater af densiteten for vands afhængighed af temperaturen (se appendiks B.3).

På baggrund af denne afgrænsning kan det nu uddybes, hvordan de tre forskellige former for integration undersøges og identificeres i de udvalgte ph.d.-afhandlinger:

- Grænseobjekter identificeres som abstrakte eller konkrete genstande, der er centrale for forskningens formål. Grænseobjektet integrerer forskellige discipliner, idet grænseobjektet bliver beskrevet ud fra flere discipliners ontologiske overbevisning, metode eller teori.
- Integration qua teknovidenskabelighed identificeres i de teknovidenskabelige afhandlinger, hvis i) den indgående teori indeholder teorier fra forskellige discipliner, eller ii) de anvendte teknikker kommer fra forskellige discipliner.
- Integration via interfield-teoridannelse identificeres, hvis der dannes en ny, generel relation mellem to eller flere discipliners ontologiske overbevisning eller teori.

For alle tre former af integration vurderes det, om der er tale om *forskellige discipliner* med skelen til, om videnselementet er blevet præsenteret i forskellige kurser, og om de involverede discipliner er af samme specialiseringsgrad.

Opsamling

På baggrund af tre fremtrædende videnskabsfilosofiske modeller for arbejde på tværs af discipliner, opstilles tre former for integration. Først opstilles integration via grænseobjekter, der bygger på Star og Griesemers beskrivelser af grænseobjekternes centrale rolle i samarbejdet mellem folk med forskellig baggrund. Dernæst opstilles integration qua teknovidenskabelighed, der bygger på Nordmanns beskrivelser af ophævelsen mellem teknologi og videnskab i nanoforskning. Sidst opstilles integration via interfield-teoridannelse, der bygger på Darden og Maulls beskrivelser af interfield-teorier som brobygger mellem felter.

De tre beskrivelser af arbejde på tværs af discipliner er udvalgt på grund af deres fremtrædende rolle i videnskabsfilosofiske beskrivelser af interdisciplinaritet. Derudover indfanger de forskellige beskrivelser af nanoforskningen: Integration via grænseobjekter indfanger det store fokus på nanoskalaobjekterne som årsag til feltets interdisciplinaritet. Integration qua teknovidenskabelighed indfanger det billede, at nanofeltets interdisciplinære natur knytter sig til samspillet mellem teknologi og videnskab. Integration gennem ny interfield-teoridannelse er primært valgt i sin egenskab af at være komplementær til de to andre former for integration.

4. De udvalgte ph.d.-afhandlinger

For at give læseren et kendskab til de ph.d.-afhandlinger, som er genstand for analysen, gives i dette kapitel et kort resume af det faglige indhold i hver afhandling, samt en kort gennemgang af den interdisciplinære uddannelse, som forfatterne bag ph.d.-afhandlingerne har gennemført.

4.1 Uddannelsen

Bacheloruddannelsen i nanoteknologi ved Interdisciplinary Nanoscience Center (iNANO), Aarhus Universitet blev udbudt første gang i 2002 samtidig med centrets opstart, og fundamentet i centret såvel som uddannelsen er et stærkt fokus på interdisciplinaritet:

At international level, iNANO has played a pioneering role in establishing a new interdisciplinary curriculum in nanotechnology. [...]The curriculum covers a broad spectrum of introductory, advanced, and specialized courses, which aim at providing the students with a sufficiently broad basis to conduct interdisciplinary research in the nano-area and at the same time achieve disciplinary depth and specialized skills in selected areas (iNANO annual Report 2004).

I nedenstående figur ses, hvilke kurser der udgjorde bacheloruddannelsen i nanoteknologi med start i studieåret 2004.²⁰ Overordnet er uddannelsen bygget op således, at de studerende både lærer fysik, biologi og kemi på bacheloruddannelsen. Først på kandidatdelen får de mulighed for at specialisere sig. Fysikkurserne, som eksempelvis Indledende mekanik, bliver udbudt af Institut for Fysik og Astronomi og foregår sammen med fysikstuderende. På samme måde foregår undervisningen i kemi, molekylærbiologi og matematikfagene også sammen med studerende, der læser de "rene" discipliner. Som udgangspunkt er det kun nanofagene (gule), som er tilrettelagt særligt til de bachelorstuderende i nanoteknologi. For dette speciale er to forhold værd at understrege. Dels fremgår det af skemaet, at bacheloruddannelsen skal opfattes som et bredt naturvidenskabeligt fundament, hvorfor der kun er meget lille mulighed for specialisering. Derudover er det interessant, at ingen af de obligatoriske kurser, eksplicit har til formål at integrere de øvrige. Dette peger på, at de faglige integrationer, der forekommer i ph.d.-afhandlingerne, ikke gennem særskilte selvstændige kurser, har fået støtte under bacheloruddannelsen.

²⁰Der kan være enkelte forfattere til de udvalgte ph.d.-afhandlinger, der er startet på uddannelsen tidligere, men da uddannelsen ikke har ændret sig radikalt fra år til år, er det ikke afgørende for min analyse.

3.år	Faststoffysik	Specialisering 3		Bachelorprojekt
	Statistisk fysik	Eksperimentel mol. bio.		
	Bionanoteknologi	Numeriske beregninger		Specialisering 2
	Fourieranalyse	Introduktion til programmering		Specialisering 1
2.år	Matematikmodul	Molekylspektroskopi og kemisk binding		Projekt
	Statistik og databehandling N			Eksperimentelle nano-øvelser
	Almen molekylærbiologi	Uorganisk kemi N		Kvantemekanik
	Almen biokemi	Termodynamik/kinetik		Indledende kvantemekanik
1.år	Almen Biologi 2	Organisk kemiske reaktioner	Nanoprojekt	Bølger og optik
	Almen Biologi 1	Organisk kemi intro		Elektromagnetisme
	Calculus 2	Numerisk Fysik		Mekanik og termodynamik
	Calculus 1	Almen Kemi N		Indledende mekanik

Figur 1 er en oversigt over kursussammensætningen på bacheloruddannelsen i nanoteknologi ved Aarhus Universitet fra 2004 (kilde: Studiekontoret, AU). Uddannelsen begynder med fagene Calculus 1, Almen Kemi N og Indledende mekanik og efterfølges af eksamener, før de næste tre kurser begynder. Hvert kursus har et omfang på 5 ECTS point, bortset fra halvårskurserne på 10 ECTS point. Farverne angiver hvilken monodisciplin, kurset knytter sig til, og dækker i de fleste tilfælde over, hvilke institutter, der udbyder kurset. Biologifag angives med orange, kemifag angives med grøn, fysikfag angives med blå, molekylærbiologifag angives med rød, støttefag angives med grå, nanofag angives med gul og de hvide kasser er valgfrie projekter.

4.2 Resume af indhold

I dette afsnit gives et kort resume af de syv afhandlinger, der danner grundlag for analysen. I appendiks afsnit A kan man finde de originale resumeer fra hver afhandling.

1) Imaging Molecular Frame Dynamics Using Spatially Oriented Molecules

Afhandlingen handler om at styre orienteringen af enkeltmolekyler ved brug af laserteknik. De rumligt orienterede molekyler bruges til at afbilde molekyllære dynamikker, som kun kan observeres for rumligt orienterede molekyler. Der er særligt fokus på, hvordan orienterede molekyler kan bruges til måle udsendelsesretningen af fotoelektroner i molekylets koordinatsystem.

Fremover refereres til afhandlingen som *afhandlingen om orientering af molekyler via lasersystemer*.

2) Computational Studies of Membrane Mimics and Peptides

Afhandlingen handler om at simulere biologiske protein- og lipidsystemer ved hjælp af molekyllær modellering under inddragelse af biokemiske eksperimenter. I første del af afhandlingen undersøges monoamintransportere og deres ligandinteraktion, og i anden del af afhandlingen studeres biceller, en membranlignende struktur, og bicellens interaktion med protein.

Fremover refereres til afhandlingen som *afhandlingen om modellering af biologiske molekyler*.

3) Nanoconfined Hydrides for Energy Storage

Afhandlingen handler om, hvordan man kan forbedre metalhydrider til brug i hydrogenopbevaring ved at lave metalhydrid-nanopartikler med et nanoporøst materiale som støbeform. Desuden undersøges, hvordan forskellige metalhydrider med fordel kan kombineres i nanopartiklerne, og en afsluttende del af opgaven belyser, hvorfor stoffet niobiumpentaoxid kan tilsættes metalhydrider og derved give optimeret hydrogenopbevaringsegenskaber.

Fremover refereres til afhandlingen som *afhandlingen om nanoconfinement af hydrider*.

4) Proteomics and Data Mining - Study of the human cornea proteome and the human embryo secretome

Afhandlingens første del præsenterer et nyt software til brug i databehandling i massespektrometriske proteomundersøgelser. I anden del præsenteres en proteomanalyse af proteinerne i rask hornhinde til belysning af hornhindesygdomme. I tredje del præsenteres en analyse af de proteiner, der udskilles af cellerne under celledeling for at identificere biomarkører, der kan bruges til at udvælge de bedst egnede befrugtede æg til opsættelse i livmoderen under *in vitro* fertilisering.

Fremover refereres til afhandlingen som *afhandlingen om proteomstudier*.

5) The Polarizable Embedding Coupled Cluster Method –Exciting News from Beyond the Vacuum

Afhandlingen beskriver udviklingen af en computersimulering til beregning af kvantekemiske egenskaber af molekyler i solvent. Afhandlingen tager afsæt i en teoretisk gennemgang af kvantemekanisme beregninger og implementeringen af disse i modeller. Herpå vises, hvordan modelleringen kan bruges til at beregne på fotonabsorption i fotosensitive proteiner.

Fremover refereres til afhandlingen som *afhandlingen om kvantekemisk modellering af molekyler i solvent*.

6) Nucleation, Growth and Morphology of Nanoparticles

I afhandlingen præsenteres det arbejde, der ligger bag udviklingen af et pulseret synteseapparat til fremstilling af nanopartikler, og desuden præsenteres eksperimenter, der er blevet udført for at demonstrere synteseapparatets succes.

Fremover refereres til afhandlingen som *afhandlingen om nanopartikelsyntese*.

7) Anion substitution in Metal Borohydrides

Afhandlingen handler om forbedring af hydrogenopbevaringsegenskaber af metalborhydrider igennem substitution af anioner ind i metalborhydriderne. I afhandlingen karakteriseres anion-substitutionen, og hydrogenoptagelses- samt hydrogenafgivelseskinetik af anionsubstituerede metalborhydrider bestemmes.

Fremover refereres til afhandlingen som *afhandlingen om anionsubstitution i hydrid*.

5. Former for integration i afhandlingerne

I dette kapitel analyseres, hvilke former for faglig integration der optræder i de udvalgte ph.d.-afhandling. For hver afhandling er der blevet ledt efter integration via grænseobjekter, integration qua teknovidenskabelighed og integration via interfield-teorier.

5.1 Hvilket mønster tegner sig?

Der eksisterer grænseobjekter

Der sker en integration igennem grænseobjekter i *afhandlingen om modellering af biologiske molekyler*, *afhandlingen om proteomstudier* og *afhandlingen om kvantekemisk modellering af molekyler i solvent*. Det er fælles for disse afhandling, at der optræder en genstand, der er central for projektet, som beskrives og forstås med ontologiske overbevisninger, teori eller metode fra forskellige discipliner, og som derigennem integrerer forskellige discipliner.

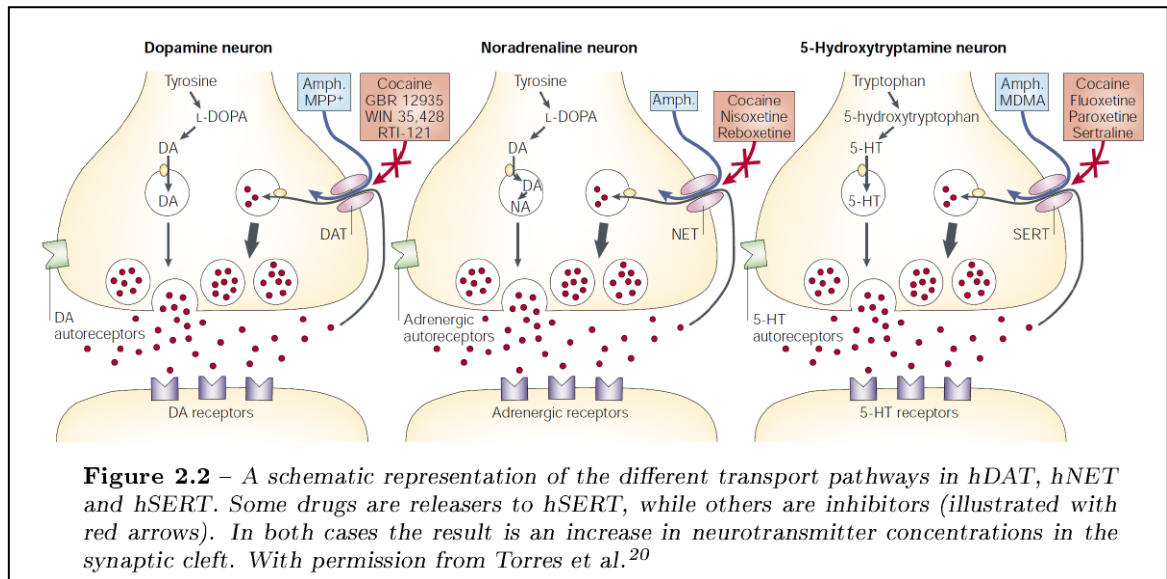
Integration af computervidenskab og biokemi samt biokemi og neurologi

Det overordnede formål i *afhandlingen om computersimuleringer af biologiske molekyler* er at opnå en ny forståelse af monoamintransportere (MATs) og bicellers struktur og funktion, og dette gøres ved inddragelse af computermodeller og biokemiske eksperimenter (Kraft, s. XI, 21). MATs og biceller fungerer dermed som grænseobjekter, der integrerer computermodelleringer og biokemiske eksperimenter. Der er tale om integration, idet resultaterne fra de biokemiske eksperimenter bruges til at forbedre den computerbaserede model. Således indgår de biokemiske eksperimenter ikke blot i en parallelbeskrivelse af de biologiske molekyler:

Based on all of the above observations [fra MD simulationer], it can be concluded that the ligands PP and 3-OH-PP remains in the binding pocket of hSERT during MD simulations. What the results do not reveal is which of the two clusters [...] from the IFD of 3-OH-PP in hSERT is the most favorable, since no clear preference for either one of the suggested binding modes is evident. [...] To conclude on which of the binding modes that the ligand prefers, it is necessary to include biochemical data in evaluation (Kraft, s. 21).

MATs fungerer desuden som grænseobjekt for en integration mellem biokemien og neurologien, idet MATs både bliver beskrevet ud fra deres funktion i nervesystemet og rolle i psykiske lidelser, jf. figur 2 nedenfor, samt biokemiske overvejelser omkring bindingskonfiguration og ligandinte-

raktion (Kraft, s. 23). Integrationen mellem biokemi og neurologi ses eksempelvis i sammenstillingen af billedet i figur 2 og sætningen "[w]hether the effect of the drugs are caused by induced release, inhibition, or competitive transport, the result is an increase in the concentration of neurotransmitters in the synaptic cleft which causes a "high" (Kraft, s. 9). Her integreres ontologiske overbevisninger fra biokemien som *induced release, inhibition* og *competitive transport* med ontologiske overbevisninger fra neurologien som *neurotransmitters, high* samt illustration af nervecellerne figur 2.



Figur 2 er et billede fra (Kraft, s. 8), der illustrerer hvordan neurologien, optræder i afhandlingen. hDAT, hNET og hSERT er forskellige typer af monoamintransportere (MATs).

Integration af molekylærbiologi og hhv. embryologi og histologi

Det humane *hornhinde-proteom* og det humane *embryo-sekretom* fungerer som grænseobjekter i *afhandlingen om proteomstudier*. Disse protein-pools bliver beskrevet med molekylærbiologiske instrumenter som massespektrometri og molekylærbiologiske termer som proteinidentifikation (Dyrlund, s. 21,50). Samtidig knyttes hornhinde-proteomet til øjets anatomi, histologi samt synsedsættelser, og embryo-sekretomet knyttes til embryologi og generel *in vitro* fertilisering (Dyrlund, s. 14-19, 29-31). Der er tale om integration mellem molekylærbiologi og hhv. histologi og embryologi, idet der gennem beskrivelsen af sekretomet og proteomet sker en tæt sammenfletning af de to discipliner: Billeder af raske og syge hornhinder og en beskrivelse af histologien i hornhindesygdomme kombineres med en molekylærbiologisk beskrivelse af de proteiner, der optræder i de forskellige lag i hornhinden for de forskellige sygdomme, jf. figur 3 nedenfor.

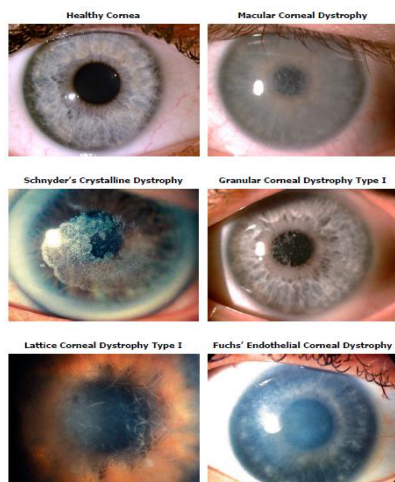


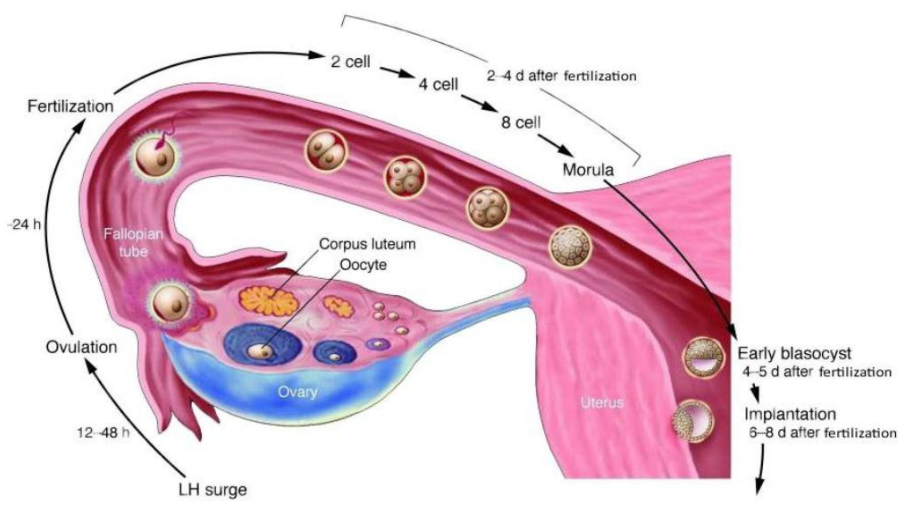
Figure 8 – Example of a healthy human cornea (top left) and diseased corneas characterized by protein aggregates. Photos courtesy of Jesper Ø. Hjørdal and Henrik Vorum.

Comparison with Fuchs' dystrophy

TGFBIp was found as the most abundant protein of the endothelium layer of healthy human corneas, accounting for about 37% of the protein amount. The second most abundant protein was collagen type VIII, accounting for about 10% (Table 2). Although both proteins have been associated with Fuch's dystrophy, only seven mutations in collagen type VIII have been linked to the disease (44, 49). As above, these mutations were probed against the gel lanes from the healthy human cornea dataset. However, none of the mutations were found, confirming that healthy corneas are negative for these mutations (Dyrlund, s. 22).

Figur 3 er et sammenklip af et billede og et tekstuddrag fra hhv. s. 19 og 22 i (Dyrlund). Billedet viser, hvordan øjet hos patienter med hornhindsygdomme ser ud sammenlignet med et rask øje (øverst venstre). I det valgte tekstuddrag karakteriseres sygdommen Fuchs dystrophy (nederste højre hjørne) ud fra et proteomstudie af de 30 mest dominerende proteiner i de tre hornhindelag.

Den sidste tredjedel af afhandlingen om *in vitro* fertilisering rummer illustrationer af de første trin af en graviditet (jf. figur 4 nedenfor), som opfølges af en beskrivelse af, hvordan de illustrerede udviklingstrin kan registreres igennem ændringer i aminosyrekoncentration i embryomedie ved kunstig befrugtning (Dyrlund, s. 34). Herved opstår en integration af embryologiens ontologiske overbevisning vedr. embryoudvikling og molekylærbiologiens metode og ontologiske overbevisninger vedr. målinger af aminosyrekoncentrationer.

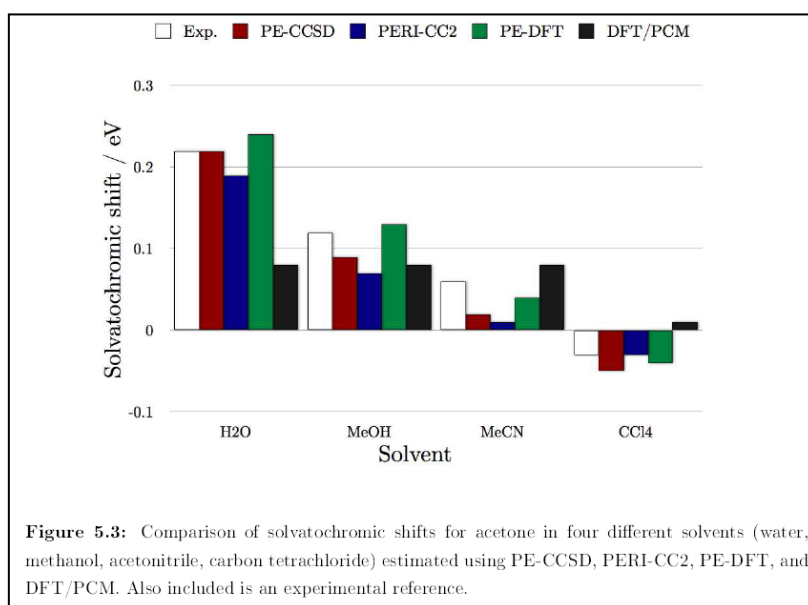


Figur 4 illustrerer, hvordan embryologien optræder i afhandlingen (Dyrlund, s.13).

Koblingen mellem embryologi og molekylærbiologien samt koblingen mellem histologi og molekylærbiologien kan således opfattes som en faglig integration via grænseobjekterne hornhindeproteom og embryo-sekretom.

Integration af kvantekemi, computervidenskab og biokemi

I *afhandlingen om kvantekemisk modellering af molekyler i solvent* udvikles en modellering til beregning af molekylære egenskaber under forhold, der er sammenlignelige med den eksperimentelle virkelighed. *Molekyle* fungerer således i dette projekt som grænseobjekt for den eksperimentelle biokemi, molekylære modelleringer og teoretisk kvantekemi. De modellerede beregninger af solvakromatisk skift sammenlignes med eksperimentelle målinger og bruges til at evaluere modellen, jf. figur 5 nedenfor. Således bliver de eksperimentelle målinger brugt til at forbedre modelleringen, og ikke blot som additiv, supplerende information. Der er således tale om trebenet integration, hvor den molekylære modellering bliver til på baggrund af kvantekemiske overvejelser og beregninger, mens modellen evalueres under inddragelse af eksperimentel biokemi (Sneskov, s. 65).



Figur 5 (Sneskov, tabel 5.3, s. 59) viser, hvordan forfatteren sammenligner forskellige kvantekemiske computermodeller (de farvede søjler) med eksperimentel biokemisk data (den hvide søjle) i forskellige solvent.

Tydelige elementer af teknovidenskab – nogle af dem er integrerende

Der er tydelige teknovidenskabelige elementer i *afhandlingerne om nanopartikelsyntese, afhandlingen om anionsubstitution i hydrider, afhandlingen om nanoconfinement af hydrider og afhandlingen om orientering af molekyler via laserteknik*. Det gælder for dem alle, at store dele af deres videnskabelige bidrag ligger i at demonstrere en praktisk mulighed; de fortæller en historie om, hvad de har opnået i laboratoriet, hvordan de har gjort, og deres resultat bliver ikke evalueret på

sandhed, men robusthed, jf. Nordmanns karakterisering af teknovidenskab beskrevet i afsnit 3.2.²¹

Af de afhandlinger, der har tydelige teknovidenskabelige elementer, er *afhandlingen om orientering af molekyler via lasersystemer* og *afhandlingen om nanopartikelsyntese* eksempler på, at den indgående teori og teknik integrerer forskellige discipliner, mens *afhandlingen om anion-substitution i hydrider* og *afhandlingen om nanoconfinement af hydrider*, der begge omhandler optimering af metalhydrider, ikke forbinder forskellige discipliner. Derimod holder disse afhandlinger sig inden for materialevidenskab, nærmere bestemt uorganisk materialekemi, både hvad angår indgående teorier, som hydrogenopbevaring og metalhydrider, og anvendte teknikker, som ball milling, røntgendiffraktion, og *in situ* SR-PXD.²²

Integration mellem kvantekemi og laserfysik

Når den indgående teori betragtes i *afhandlingen om orientering af molekyler via lasersystemer*, er det tydeligt, at der indgår både kvantekemiske beskrivelser af molekyler, information om laserlys og dets egenskaber, samt teoretiske beskrivelser af, hvordan molekyle og laserstråle interagerer. Der er således tale om integration mellem kvantekemi og laserfysik, hvilket eksempelvis ses i nedenstående udtryk for molekylets Hamilton-operator i et elektrisk felt. Molekylets Hamilton-operator beskriver molekylets samlede energi, og knytter sig til kvantekemien, mens V_{ind} og V_{stat} beskriver interaktionen mellem molekyle og laserlys og knytter sig til beregninger fra laserfysikken.

For a molecule in a combined static and non-resonant oscillating electric field the expression for the total Hamiltonian of Eq. (2.1) needs to be modified by the effective potentials induced by the two fields:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V_{\text{int}} = \hat{H}_{\text{rot}} + (V_{\text{ind}} + V_{\text{stat}}) \quad (2.7)$$

Figur 6 viser et uddrag fra (s. 11, Hansen), hvor forfatteren opstiller molekylets Hamilton-operator og i udtrykket herfor inddrager de potentialer, som laserfelterne danner.

Afhandlingens teknovidenskabelige formål er at demonstrere, at det er muligt at observere molekylær dynamik ved det orienterede molekyler, og teori fra kvantekemi og laserfysik integreres i afhandlingen i en beskrivelse af, hvordan det teknovidenskabelige formål kan opnås. Således nødvendiggør afhandlingens teknovidenskabelige karakter den faglige integration mellem kvantekemi og laserfysik.

²¹ Der er også elementer i disse afhandlinger, der ikke understøtter teknovidenskabelighed, men jeg mener ikke, at disse elementer ændrer den overordnede konklusion, at der er klare teknovidenskabelige træk, og derfor vender jeg først tilbage til de modsigende elementer i afsnit 6.2.

²² Se tabel B.2 og B.4 for oversigt over de indgående teorier og involverede teknikker.

Svag integration mellem el-lære, programmering og syntesekemi

Afhandlingen om nanopartikelsyntese rummer meget lidt teori, der ikke knytter sig til anvendte metoder og teknikker.²³ I det indledende teoriafsnit præsenteres kun teori om superkritisksyntese, og der optræder således ikke flere discipliner i den indgående teori. De anvendte teknikker, derimod, spænder fra programmering, henover opsætning af elektriske kredsløb og til kemiske analyser (Eltzholtz, s. 30-33, 36-58, 107). På den måde bliver teknikker fra forskellige discipliner inddraget under udviklingen af hans apparat.

Sammenkoblingen mellem el-lære, programmering og syntesekemi i *afhandlingen om nanopartikelsyntese* fremstår mindre integreret end de øvrige integrationer, fordi de forskellige discipliner indgår i apparatudviklingen som næsten parallelle elementer. Der er dog alligevel tale om integration imellem disciplinerne, da man ikke kan forestille sig en elektroingeniør, programmør og kemiker arbejde hver for sig om at bygge dette apparat. Både programmeringen og arbejdet med elektronik er baseret på et kendskab til den kemiske syntese, der skal forløbe.

Ingen ny interfield-teoridannelse

Der er ikke identificeret ny interfield-teoridannelse i nogen afhandling, og i afsnit 6.3 diskuteres mulige forklaringer herpå. I dette afsnit skal det fremhæves, at selvom der ikke er identificeret ny interfield-teoridannelse, kan Darden og Maulls beskrivelse af interfield-teorier stadig bruges til at beskrive den relation, som de identificerede integrationer skaber mellem felterne.

Strukturen af monoamintransportere bestemmes i *afhandlingen om modellering af biologiske molekyler* og på baggrund af computerbaserede modeller og biokemiske eksperimenter knyttes denne struktur til funktionen afhængighed, der forklares af neurologien (Kraft, s. 7-8). På den måde opstår en relation mellem biokemi og neurologi, der kan karakteriseres som en struktur/funktion-relation. Samtidig dannes en kausalrelation mellem biokemien og neurologien, hvor biokemien med hjælp fra computervidenskaben kortlægger en proteinstruktur, der kan forklare årsagen til fænomenet afhængighed på neurologisk niveau (Kraft, s. XI).

I *afhandlingen om proteomstudier* kan ønsket om at forstå, hvilke proteiner der er involverede i henholdsvis en række øjensygdomme og høj succesrate i *in vitro* fertilisering, ses som dannelsen af en kausalrelation mellem molekylærbiologien og lægevidenskab.

Darden og Maulls beskrivelse af relationerne mellem felter tjener altså til at belyse den relation, de identificerede former for integration skaber mellem de involverede discipliner, om end integration via interfield-teoridannelse ikke spiller en fremtrædende rolle. Monoamintransporterne er et grænseobjekt, der forbinder biokemi og neurologi med både en kausalrelation og en struktur/funktion-relation, og grænseobjekterne hornhinde-proteom og embryo-sekretom forbinder molekylærbiologien og lægevidenskab med en kausalrelation.

²³ Se tabel B.3 i appendiks.

5.2 Integrationens bidrag

Analysen af forskellige former for faglig integration i ph.d.-afhandlingerne afdækker, at foruden de identificerede forskelle i former for faglig integration er der yderligere forskelle i det videnskabelige bidrag, som de identificerede integrationer udgør.

Det er fælles for integrationen af biokemi og neurologi i *afhandlingen om modellering af biologiske molekyler* samt integrationerne af molekylærbiologi og hhv. histologi og embryologi i *afhandlingen om proteomstudier*, at integrationen fletter den disciplinære viden sammen i et større billede, der tjener til en forståelse baseret på en større helhed. Disse integrationer er eksempler på, at integrationen danner *et større billede* og viser således, at integration i nanoforskning kan tjene til at skabe en bedre helhedsforståelse af et videnskabeligt emne.

Det er fælles for integrationen mellem computervidenskab, biokemi og kvantekemi i *afhandlingen om kvantekemisk modellering af molekyler i solvent*, integrationen mellem laserfysik og kvantekemi i *afhandlingen om orientering af molekyler via lasersystemer* samt integrationen mellem computervidenskab og biokemi i *afhandlingen af modellering af biologiske molekyler*, at den høje grad af integration *muliggør* et videnskabeligt resultat, som ikke ville kunne opnås med hver disciplin særskilt.

Det beskrives eksplicit i *afhandlingen om modellering af biologiske molekyler*, at det ikke er muligt at lave retvisende strukturbestemmelser af ikke-krystaliserbare molekyler alene ud fra hverken biokemiske forsøg eller computermodeller. Metoderne er komplementære og bør bruges sammen (Kraft, s. 1). Samme karakteristikum kan genfindes i integrationen mellem kvantekemi og biokemi i *afhandlingen om kvantekemisk modellering af molekyler i solvent*, idet inddragelsen af biokemiske eksperimenter *gør det muligt* at lave gode computerbaserede modeller. For integrationen mellem laserfysik og kvantekemi i *afhandlingen om orientering af molekyler via lasersystemer* er det også tilfældet, at uden laserfysikken var det ikke muligt at måle den ønskede molekylære dynamik, og uden den kvantekemiske indsigt ville laserfysikken ikke kunne beskrive den observerede dynamik. Disse integrationer er eksempler på, at integration muliggør nye videnskabelige undersøgelser, og viser således at integration i nanoforskning kan tjene til at muliggøre ønskede videnskabelige undersøgelser.

Opsamling

Blandt de analyserede ph.d.-afhandling er der identificeret integration gennem grænseobjekter samt integration qua teknovidenskabelighed, mens dannelsen af nye interfield-teorier ikke spiller nogen fremtrædende rolle i de udvalgte afhandling. Resultaterne er opsamlet i tabel 1 nedenfor. Analysen indikerer desuden, at de identificerede integrationer udgør forskelligt videnskabeligt bidrag.

	Integration via grænseobjekt	Integration qua teknovidenskabelighed	Integration via interfield-teoridannelse
<i>Afhandlingen om orientering af molekyler via lasersystemer</i>		Ønsket om at demonstrere observation af molekylær dynamik integrerer kvantekemi og laserfysik	
<i>Afhandlingen om modellering af biologiske molekyler</i>	MATs og biceller integrerer computervidenskab og biokemi. MATs integrerer desuden biokemi og neurologi		
<i>Afhandlingen om nanoconfinement af hydrider</i>			
<i>Afhandlingen om proteomstudier</i>	Hornhinde-proteom integrerer histologi og molekylærbiologi Embryo-sekretom integrerer embryologi og molekylærbiologi		
<i>Afhandlingen om kvantetekemisk modellering af molekyler i solvent</i>	Molekyle integrerer Kvantekemi, computervidenskab og biokemi		
<i>Afhandlingen om nanopartikelsyntese</i>		Ønsket om at demonstrere anvendelsen af et nyt synteseapparat integrerer el-lære, syntesekemi og programmering	
<i>Afhandlingen om anionsubstitution i hydrider</i>			

Tabel 1 er en opsummering af de forskellige former for faglig integration, der er identificeret i de analyserede ph.d.-afhandlinger.

Det er interessant, at der både foregår integration via grænseobjekter og qua teknovidenskabelighed, fordi det peger på, at faglig integration i nanoforskning er en kompleks størrelse, der har flere former.

6. Nanoforskningens interdisciplinære natur

Med afsæt i de former for integration, der beskrives i kapitel 5, undersøges i dette kapitel, hvilken rolle nanoskalaobjekter og teknovidenskaben spiller i nanofeltets interdisciplinaritet. På baggrund heraf diskuteres eksisterende forestillinger om nanofeltets interdisciplinære natur.

6.1 Interdisciplinaritetens tilknytning til nanoskalaen

Det er en udbredt opfattelse, at nanoskalaobjekter og deres nanoskalaegenskaber er årsagen til, at nanoforskningen er interdisciplinær (se afsnit 1.3). I dette afsnit undersøges, hvorvidt nanoskalaobjekter og deres nanoskalaegenskaber kan forklare den faglige integration, der foregår i de analyserede afhandlinger, og det diskuteres, hvilken rolle nanoskalaobjekterne spiller i nanoforskningens interdisciplinære natur.

Integration gennem nanoskalaobjekter

I de analyserede ph.d.-afhandlinger ses eksempler på, at integration i nanoforskning kan ske gennem grænseobjekter med en størrelse, der befinder sig på nanoskalaen. Det ses ved grænseobjekterne MATs og biceller i *afhandlingen om modellering af biologiske molekyler* samt grænseobjektet molekyle i *afhandlingen om kvantekemisk modellering af molekyler i solvent*. Det interessante er, at den faglige integration her er nødvendiggjort af grænseobjekternes nanoskalastørrelse.

I *afhandlingen om modellering af biologiske molekyler* integreres computervidenskab og biokemi igennem computersimuleringer af MATs og biceller. I beregningerne bag computersimuleringerne af bicellerne og MATs indgår MARTINI-kraftfelter, der indeholder kvantemekaniske beregninger og approksimationer. De kvantekemiske beregninger er nødvendige at inddrage, idet forfatteren betragter interaktioner over afstande på nanoskalaen, hvor kvantekemien ikke kan ses bort fra. Samtidig er biokemien nødvendig at inddrage i beskrivelsen, idet størrelsen af de biologiske molekyler er så stor, at en fuldstændig kvantekemisk beskrivelse af deres struktur ikke er mulig. MATs og bicellernes nanoskalastørrelse fordrer således, at en modellering af deres struktur og funktion både beror på biokemiske eksperimenter og kvantekemiske overvejelser. Således nødvendiggør MATs og bicellernes størrelse, at biokemiske eksperimenter integreres med computermodeller, hvori kvantekemiske betragtninger indgår.

Ligeledes gælder det for integrationen mellem biokemi, computervidenskab og kvantekemi i *afhandlingen om kvantekemisk modellering af molekyler i solvent*, at kvantekemiske beregninger

inddrages, fordi molekylets er lille nok til at kvantemekaniske effekter ikke kan ses bort fra, mens computervidenskaben må tages i brug, fordi molekylet er stort nok til, at beregningerne af molekylets opførsel i solvent kræver stor regnekraft. Således nødvendiggør molekylets nanoskalastørrelse en integration mellem computervidenskaben og kvantekemien.

Den faglige integration i *afhandlingen om modellering af biologiske molekyler* og i *afhandlingen om kvantekemisk modellering af molekyler i solvent* viser, hvordan den faglige integration i nanoforskning sker gennem grænseobjekter, hvis nanoskalastørrelse nødvendiggør den faglige integration.

Nanoskalaobjektet kan ikke forklare al faglig integration

Som vist, kan størrelsen af nanoskala-grænseobjekter nødvendiggøre den faglige integration. Som det fremgår nedenfor, kan størrelsen af objekter på nanoskalaen dog ikke forklare al den integration, der foregår.

Afhandlingen om proteomstudier rummer faglig integration gennem grænseobjekter, på trods af at disse ikke er nanoskalaobjekter. Grænseobjekterne i afhandlingen, hornhinde-proteom og embryo-sekretom, er ikke nanoskalaobjekter, da de udgøres af et ensemble af proteiner, der ikke kan siges at have en længde. Således foregår der integration mellem molekylærbiologi og hhv. histologi og embryologi, men denne integration kan ikke knyttes til et nanoskalaobjekt.

I *afhandlingen om nanopartikelsyntese* og i *afhandlingen om nanoconfinement af hydrider* optræder hhv. nanopartikler og nanometalhydrider, der er nanoskalaobjekter, uden at de fungerer som grænseobjekter. Størrelsen af nanopartiklerne er central for formålet i *afhandlingen om nanopartikelsyntese* og spiller ligeledes en stor rolle i karakteriseringen af de producerede partikler samt forståelsen af syntesen (Eltzholtz, s. 1, 63, 109-115). Nanopartiklerne er et nanoskalaobjekt med særlige nanoskalaegenskaber, men de fungerer dog ikke som grænseobjekt, idet nanopartiklen kun beskrives og forstås ud fra et kemisk perspektiv, mens programmering og el-lære ikke indgår i forståelsen og beskrivelsen af nanopartiklen. Ligeledes, i *afhandlingen om nanoconfinement af hydrider* har nanometalhydriderne en størrelse på omkring 30 nm, og er en vigtig parameter for ønsket om at opnå forbedret hydrogenopbevaringsegenskaber (Nielsen, s. 66):

Nanoparticles may have significantly different properties as compared to bulk materials due to (i) increased surface area of the reactants, (ii) nanoscale diffusion distances (iii) increased number of atoms in the grain boundaries [reference udeladt] and (iv) intimate contact between different reacting solids or a melt. These nanoscale properties facilitate release and uptake of hydrogen and enhance reaction kinetics (Nielsen, s. 9).

Nanometalhydriderne er altså nanoskalaobjekter med særlige nanoskalaegenskaber, men hydriderne beskrives kun ud fra materialekemi. Det fungerer således ikke som grænseobjekt.

Opsamlende kan det konstateres, at i *afhandlingen om nanopartikelsyntese* og i *afhandlingen om nanoconfinement af hydrider* spiller nanoskalaobjekter med nanoskalaegenskaber en stor rolle

le, men disse nanoskalaobjekter er ikke grænseobjekter, der rummer en faglig integration. Dette viser, at nanoskalaobjekter med nanoskalaegenskaber kan forekomme i nanoforskning, uden at dette nødvendiggør en faglig integration af discipliner. I *afhandlingen om proteomstudier* optræder integrerende grænseobjekter, uden at disse kan kaldes nanoskalaobjekter. Dette viser, at der forekommer integration via grænseobjekter i nanoforskning, der ikke kan knyttes til nanoskalaen.

Nanoskalaobjekter kan altså forklare dele af den integration, der foregår i nanoforskningen, men nanoskalaobjekter medfører ikke nødvendigvis faglig integration og kan ikke forklare al den faglige integration, der foregår.

Nanoobjekter og interdisciplinaritet

Som beskrevet tidligere, eksisterer den opfattelse, at nanofeltets interdisciplinaritet knytter sig til nanoskalaen, idet nanoskalaobjekter og deres nanoskalaegenskaber "falder imellem" traditionelle discipliner, og derfor kun kan forstås ved en interdisciplinær tilgang. Analysen i dette speciale viser, at det billede er forsimplet, idet der både ses afhandlinger med nanoskalaobjekter med særlige nanoskalaegenskaber, der ikke begrundes den faglige integration, samt afhandlinger der rummer en faglig integration, på trods af at de ikke beskæftiger sig med nanoskalaobjekter.

Når nanoskalaobjekter med nanoskalaegenskaber ikke nødvendigvis fordrer faglig integration, kan der stilles spørgsmål ved almenlydigheden af Schmidts beskrivelse af nanofeltets interdisciplinære natur som grundet i interdisciplinære nanoskalaobjekter (Schmidt, 2008, s. 63). Schmidts beskrivelse er retvisende i den forstand, at interdisciplinære nanoskalaobjekter omtales blandt nanoforskere, men ikke i forhold til den faglige integration, der faktisk foregår i aktuel nanoforskning.

Videnskabsfilosoffen Schummer har tidligere fremført en kritik af nanoskalaobjektet som definerende for nanofeltet (Schummer, 2004a). Schummer peger på, at stort set al eksperimentel naturvidenskab og teknologi beskæftiger sig med objekter, der er struktureret på nanoskalaen, og eftersom nanoskalaobjektet kan genfindes overalt, er nanometerskalaen utilstrækkelig til at definere et forskningsfelt (ibid., s. 15). I forhold til interdisciplinaritet i nanofeltet påpeger Schummer, at forskellige discipliner kan samarbejde gennem en fælles forskningsgenstand, men størrelsen af forskningsgenstanden kan aldrig være afgørende. Forståelsen af, hvad nanoskalaobjektet er, vil være forskelligt fra disciplin til disciplin og denne barriere kan en genstand ikke fjerne, alene på grund af sin størrelse (ibid., s.16).

Analysen i dette speciale nuancerer og udbygger Schummers kritik. Den overordnede indvending, at nanoskalaobjekter ikke alene er afgørende for interdisciplinariteten i nanofeltet, understøttes af analysens resultater, hvor det ses, at nanoskalaobjekter ikke nødvendigvis fordrer integration. Dog er der også eksempler på, at den faglige integration godt kan knyttes til nanoskalaobjekternes størrelse. Således kan forskningsgenstandens størrelse godt være afgørende for den integration, der foregår.

Analysen af den faglige integration giver både grund til at nuancere Schmidts beskrivelse af nanofeltets interdisciplinaritet som objekt-orienteret, og samtidig grund til at nuancere Schummers afvisning af nanoskalaen som afgørende i nanofeltets interdisciplinaritet. Analysen viser, at faglig integration ikke nødvendigvis opstår, blot der optræder nanoskalaobjekter med særlige nanoskalaegenskaber. Nanoskalaobjekter forklarer dele af den faglige integration, men det overdriver nanoskalaobjekternes rolle i nanoforskningen at begrunde feltets interdisciplinære natur med nanoskalaobjekter.

6.2 Interdisciplinaritetens tilknytning til teknovidenskabelighed

Udover det store fokus på nanoskalaobjekter, er det en udbredt opfattelse, at nanofeltet er interdisciplinært, idet det er en teknovidenskab, hvor grænsen mellem teknologi og videnskab ophæves (afsnit 3.2). I dette afsnit undersøges, hvorvidt teknovidenskabelighed kan forklare den faglige integration, der foregår i de analyserede afhandlinger, og det diskuteres, om teknovidenskabelighed er en passende beskrivelse af nanoforskningen.

Teknovidenskabelighed forklarer kun dele af den faglige integration

Blandt de analyserede afhandlinger ses klare eksempler på, at teknovidenskab kan føre til faglig integration. Det teknovidenskabelige ønske om at demonstrere muligheden for at observere molekylær dynamik nødvendiggør integration af teori fra laserfysik og kvantekemi i *afhandlingen om orientering af molekyler via lasersystemer*. Ligeledes nødvendiggør det teknovidenskabelige ønske om at demonstrere et nyt synteseapparat en integration af metoder fra el-lære, syntesekemi og programmering i *afhandlingen om nanopartikelsyntese* (afsnit 5.1). Dog har *afhandlingen om nanoconfinement af hydrider* og *afhandlingen om anionsubstitution i hydrider* tydelige teknovidenskabelige elementer, uden at disse fører til faglig integration. Afhandlingerne viser således, at teknovidenskabelighed ikke nødvendigvis medfører faglig integration.

I afsnit 3.2 blev det foreslået, at det eklektiske teorivalg, der ifølge Nordmann er kendetegnende for teknovidenskaben, kan føre til et eklektisk metodevalg, dvs. en interdisciplinær værktøjskasse. Denne sammenkobling understøttes tydeligt i *afhandlingen om nanopartikelsyntese*, hvor forfatteren, grundet sit ønske om at bygge et synteseapparat, inddrager teknikker fra både syntesekemien, el-læren og programmering. Det er interessant, at forfatteren selv placerer sit projekt i en værktøjskasse med ordene: *"The aim of this project is to add to the toolbox available for nanoparticle production through the development of a novel production method"* (Eltzholtz, s. 14). Der er således ikke tale om, at han placerer sit redskab i en værktøjskasse kaldet nanoforskning, men han skriver eksplicit, at hans bidrag er et nyt redskab i en allerede eksisterende værktøjskasse for nanopartikelproduktion.

Der bruges også redskaber fra forskellige discipliner i *afhandlingen om modellering af biologiske molekyler* og *afhandlingen om kvantekemisk modellering af molekyler i solvent*. Her bruges

redskaber fra computervidenskab og biokemi, til at belyse et biokemisk problem. Disse afhandlinger er eksempler på, at nanoforskningen er interdisciplinær qua en tværfaglig teori- og værktøjskasse, om end afhandlingerne ikke er teknovidenskabelige, fordi de i stor udstrækning er drevet af ønsket om at forstå. Således foregår der også interdisciplinært metode- og teknikvalg, der ikke kan forklares med teknovidenskabelighed.

Samlet ses, at integration i nanoforskning i nogle tilfælde skyldes teknovidenskabelighed via inddragelsen af en interdisciplinær værktøjskasse og inddragelsen af teori fra forskellige discipliner. Dog fører teknovidenskab ikke nødvendigvis til faglig integration. Det ses yderligere, at noget nanoforskning gør brug af metoder fra en interdisciplinær værktøjskasse, men dette karaktertræk ses både i projekter, der er teknovidenskabelige og de, der ikke er. Analysen viser således, at teknovidenskabelighed kun indfanger dele af den faglige integration, der foregår i nanoforskning.

At demonstrere versus at forstå

For alle fire afhandlinger, der er karakteriseret som teknovidenskabelige i afsnit 5.1, kan der findes elementer, der peger på, at de ikke er teknovidenskabelige. Selvom afhandlingerne drives af et teknovidenskabeligt ønske om at demonstrere en mulighed, rummer de samtidig et mere traditionelt videnskabeligt ønske om at ville forstå.

I *afhandlingerne om anionsubstitution i hydrider* og *afhandlingen om nanoconfinement af hydrider* eksisterer et ønske om at demonstrere, at det er muligt at forbedre hydrogenopbevaringen via den valgte teknik, men samtidig drives projekterne også af et ønske om at forstå, hvad der sker. Det kommer eksempelvis til udtryk igennem de *trends* som forfatteren til *afhandlingerne om anionsubstitution i hydrider* forsøger at identificere: "*The substitution seems to follow a trend that the smaller anion dissolves in the compound containing the larger anion*" (Rude, s. ix). I disse afhandlinger hænger ønsket om at demonstrere forbedret hydrogenopbevaring sammen med forståelsen af mekanismerne bag hydrogenoptag og -afgivelse, idet de forsøger at forbedre hydrogenopbevaringsegenskaberne igennem forståelse af mekanismerne bag hydrogenoptag og hydrogenafgivelse:

Substitution may occur during ball milling where high pressures introduce defects and deformations of the material. For some systems thermal annealing is necessary for substitution to occur. This may be explained by higher disorder and thermal vibrations in the structure at elevated temperatures (Rude, s. 85).

Forfatteren forsøger at forstå og forklare resultaterne ud fra etablerede forståelser af reaktionskinetik, og nøjes ikke med at observere, at termisk annealing nogen gange er nødvendig for at gennemføre substitution. Det er således gennemgående for begge afhandlinger om hydrogenopbevaring, at ønsket om at forstå og at ville demonstrere er tæt forbundet.

I *afhandlingen om orientering af molekyler via lasersystemer* findes et dominerende ønske om at orientere molekyler og at demonstrere, hvordan det kan bruges til "molecular frame dy-

namics". Dette har hovedsageligt sin anvendelse i grundvidenskabelige spørgsmål inden for kemien, hvor der arbejdes på at kunne forstå, hvad der sker under en kemisk reaktion i høj tidslig opløsning. På den måde er afhandlingens formål mere vidtrækkende end blot ønsket om at demonstrere, at det er muligt at orientere molekyler og afbilde molekylære dynamikker. Således kan det argumenteres, at afhandlingens overordnede mål er at øge forståelsen af molekylære reaktioner, og at der derfor er tale om et traditionelt videnskabeligt projekt frem for et teknovidenskabeligt. Denne afhandling er altså et eksempel på, hvordan et projekts langsigtede formål er drevet af et ønske om at forstå, omend det mere kortsigtede formål med projektet er at demonstrere en mulighed i laboratoriet.

For *afhandlingen om nanopartikelsyntese* er det mere entydigt, at projektet er drevet af et ønske om at demonstrere, at det er muligt at fremstille nanopartikler ved et pulseret synteseapparat. Denne afhandling er anderledes fra de øvrige teknovidenskabelige afhandlinger, idet der ikke blot eksisterer et ønske om at demonstrere en mulighed i laboratoriet, men også et ønske om at udvikle et synteseapparat, der kan bruges i storskala-nanopartikelproduktion (Eltzholtz, s. 11). Dette forhold, kombineret med en påfaldende lille mængde indgående teori i afhandlingen, rejser spørgsmålet om, hvorvidt afhandlingen bedre kan beskrives som ingeniørvidenskab end som teknovidenskab.

Det står således klart, at nanofeltet er mere divers og den enkelte afhandlings teknovidenskabelighed er mere kompliceret, end betegnelsen teknovidenskab indfanger. Det er derfor ikke korrekt, når Nordmann skriver om nanoforskningen, at "*[a]s long as one can produce an effect in a reasonably robust manner, it does not really matter whether scientific understanding catches up*" (Nordmann, 2008, s. 17). Nogle ph.d.-afhandlinger er i høj grad drevet af et ønske om at skabe videnskabelig forståelse, og selv i de mest anvendelsesorienterede afhandlinger kan ønsket om at forstå og ønsket om at demonstrere ikke adskilles.

Nordmann peger selv på, at beskrivelsen af nanoteknovidenskab ikke forholder sig til heterogeniteten i nanoforskningen og berører dermed, at betegnelsen teknovidenskab ikke beskriver al nanoforskning (Nordmann, 2008, s. 18). I sit casestudie "*Molecular Disjunctions: Staking Claims at the Nanoscale*" (Nordmann, 2004) behandler Nordmann den omtalte heterogenitet. Han ser på to forskergrupper, der studerer enkeltmolekyler som strømledere. Nordmann beskriver, at den ene gruppes forskning er mere traditionel og rummer et ønske om at forstå, dvs. teoretisere hvordan et molekyle kan lede strøm, mens den anden forskergruppe blot ønsker at demonstrere, at noget er muligt, dvs. vise at enkeltmolekyler kan lede en strøm. Nordmann forklarer denne observation med, at forskellen mellem traditionel videnskab og teknovidenskab ligger i selvopfattelsen:

Thus, the difference between Reed and Tour on the one hand, and the Karlsruhe group on the other hand is not that one has a technoscientific orientation while the other adopts a theoretical stance. Both contribute to NanoTechnoScience. Reed and Tour do so openly while the Karlsruhe group still represents itself in terms of the traditional opposition between fundamental versus applied science and technology (Nordmann, 2004, s. 59).

Denne udlægning af teknovidenskab gør det sværere at afgøre, om et konkret stykke forskning er teknovidenskabeligt eller ej. Jævnfør citatet kan både det teoretisk-funderede og den anvendelsesorienterede nanoforskning kaldes nanoteknovidenskab. Derudover viser Nordmanns casestudie også, at den heterogenitet han ser bort fra i "*Philosophy of Nanotechnoscience*" (Nordmann, 2008), hvor han udførligt fremlægger, hvorfor nanoforskningen skal ses som en teknovidenskab, ikke er rimelig at se bort fra.

Med udgangspunkt i de analyserede ph.d.-afhandlinger ses, at ønsket om at forstå og ønsket om at demonstrere er forbundet i nanoforskning. En beskrivelse af nanoforskning som en nanoteknovidenskab, der kun er interesseret i at demonstrere, indfanger ikke den del af nanoforskningen, der ønsker at opnå teoretisk forståelse.

Det kan konkluderes, at sammenhængen mellem forståelse og demonstration i nanoforskning ikke kan forklares simpelt. Hvis teknovidenskabelighed bruges til at forklare interdisciplinariet i et konkret nanoprojekt, må det derfor først udfoldes, hvordan det konkrete projekt kan siges at være teknovidenskabeligt, og dernæst forklares, hvordan teknovidenskabeligheden i den givne sammenhæng afføder integration af discipliner.

6.3 Hvorfor ses ikke ny interfield-teoridannelse?

Der er ikke identificeret dannelse af nye interfield-teorier i ph.d.-afhandlingerne. I dette afsnit diskuteres, hvad denne observation kan fortælle om interdisciplinariet i nanoforskning. Der må dog tages det forbehold, at et casestudie på blot syv ph.d.-afhandlinger ikke er tilstrækkeligt til at sandsynliggøre at, fraværet af interfield-teorier er et billede, der gælder generelt for ph.d.-afhandlinger i nanoforskningen.

Teoridannelse spiller en lille rolle i nanofeltets interdisciplinære natur

Fraværet af interfield-teoridannelse kan skyldes, at teoridannelse generelt spiller en lille rolle i nanoforskning, hvilket understøttes af, at flere af de analyserede afhandlinger tilsigter at udvikle nye metoder og finde nye anvendelser frem for at udvikle teorier. Dog kan fraværet af ny teoridannelse på tværs af discipliner også knytte sig specifikt til nanoforskningen interdisciplinære natur, således at teoridannelse spiller en rolle i nanoforskningen, men ikke den måde hvorpå forskellige discipliner involveres og integreres.

Fraværet af interfield-teoriedannelse kan yderligere forklares ved, at den aktuelle nanoforskning er en normalvidenskabelig aktivitet, som ikke forsøger at etablere nye begrebslige sammenhænge men derimod udvide og forbedre etableret viden (Kuhn, 1962a). Denne forklaring understøttes af, at de præsenterede resultater i de analyserede afhandlinger ofte forklares i lyset af allerede etableret teori. I nedenstående citat ses et eksempel fra *afhandlingen om anionsubstitu-*

tion i hydriden, hvor en observeret trend forklares ud fra et etableret begreb om gitterenergi og enhedscellen:

From the results obtained during anion substitution of the heavier halides in metal borohydrides some trends in the structural chemistry appears, (i) the solid containing the smaller anion tends to dissolve into the compound containing the larger anion, and the structure of the latter tends to be preserved in the obtained solid solution. This trend follows the relative size of the anions, $I^- > BH_4^- > Br^- > Cl^-$. It explains that LiCl dissolves in $LiBH_4$ but $LiBH_4$ does not dissolve in LiCl and that $Ca(BH_4)_2$ dissolves in CaI_2 but CaI_2 does not dissolve in $Ca(BH_4)_2$. This trend can be interpreted as an increase in the lattice energy due to the clearly observed decrease in the unit cell volume, i.e. a decrease in the average distance between the ions in the structure (s. 120, Rude).

Darden og Maull, der introducerede begrebet interfield-teori, peger på, at de cases, de analyserer, repræsenterer signifikante udviklingstrin (Darden & Maull, 1977, s. 59). Dette understøtter, at interfield-teorier sjældent udvikles inden for rammerne af normalvidenskab.

Hvis integration gennem ny interfield-teoridannelse ikke ses i nanoforskning, fordi feltet har karakter af en normalvidenskab, er fraværet af nye interfield-teorier kendetegnende for store dele af den aktuelle videnskab, og ikke blot for nanofeltet. Det er ikke muligt ud fra de analyserede afhandlinger at afgøre, om teoridannelse er et karaktertræk ved nanofeltets interdisciplinære natur, nanofeltet generelt eller normalvidenskabelig forskning. Som belyst i næste afsnit, kan fraværet af interfield-teoridannelse desuden forklares med forhold uden for nanoforskningen.

Ph.d.-genren og teori-begrebet

Fraværet af ny interfield-teoridannelse i ph.d.-afhandlingerne kan skyldes ph.d.-afhandlingens særegne karakter: Teoridannelse kan være fraværende i ph.d.-afhandlinger, fordi videnskabelige teorier sjældent udvikles af enkeltmandsarbejde, men oftere langsomt udkrystalliseres i det videnskabelige samfund. Det er også muligt, at interfield-teoridannelse sjældent ses i ph.d.-afhandlinger, fordi ny interfield-teoridannelse er kontroversiel, og ph.d.-afhandlinger af natur ikke er kontroversielle, eftersom ph.d.-studerende kan være mere afhængige af fremtidig økonomisk støtte og faglig accept fra bedømmelsesudvalget end øvrig forskningsaktivitet.

Som tidligere nævnt bruger Darden og Maull i deres analyse det historiske klarsyn dels til at udpege og skelne forskellige felter, dels til at identificere interfield-teorierne. I dette speciale betragtes samtidens forskning, og dermed kan historien ikke vejlede. Det er muligt, at spiren til en ny interfield-teoridannelse overses, fordi teorien ikke har udkrystalliseret sig endnu, og fordi den lille spire befinder sig blandt en masse anden viden, som tiden endnu ikke har luget ud i.

Den manglende identifikation af interfield-teoridannelse, kan yderligere skyldes, at teori som begreb er for snævert til at beskrive den relation mellem discipliner, der dannes i ph.d.-afhandlingerne. Darden og Maull beskriver ikke, hvor specifik eller generel en relation skal være, for at den kan kaldes en interfield-teori:

We are not using 'theory' in the sense of 'deductive system'. In spite of the difficulties of providing a general analysis of 'theory', we have retained the term because the developments with which we are concerned are called 'theories' by their originators. Furthermore, the interfiled developments are solutions to theoretical problems, as we shall see (Darden & Maull, 1977, s. 44).

Dog giver Darden og Maull igennem deres casearbejde eksempler på interfield-teorier som kromosomteorien, operon-teorien og teorien om allosterisk regulering. Ud fra disse eksempler er det klart, at Darden og Maull taler om relationer, der er mere generelle og mindre specifikke, end de relationer, der identificeres i afhandlingerne, hvor bindingsmekanismen for MATs danner en relation mellem biokemi og neurologi, mens hornhindens proteom og embryo-sekretom danner relation mellem molekylærbiologien og lægevidenskaben (se afsnit 5.1). Det er relationer, der ikke er generelle nok til at kunne kaldes en teori.

Samtidig er de interfield-teorier, der identificeres af Darden og Maull samt Bechtel langt mere kontroversielle end de relationer, der opstår i de analyserede afhandlinger. Dette er medvirkende til, at den identificerede relation ikke opfattes som dannelsen af en ny teori. Således kan fraværet af interfield-teorier forklares med, at betegnelsen *en ny teori* er for snævert til at rumme den type relationer, der skabes mellem disciplinerne i ph.d.-afhandlingerne.

Disse forhold ved ph.d.-afhandlingen og interfield-teorier, er mulige forklaringer på, hvorfor der ikke identificeres interfield-teorier i de analyserede afhandlinger. Det er således ikke muligt at afgøre, om fraværet af interfield-teorier knytter sig til et særkende ved nanofeltet og dets interdisciplinaritet, eller om fraværet knytter sig forhold uden for nanofeltet som egenskaber ved ph.d.-afhandlingerne eller interfield-teoribegrebet. I forhold til dette projekts ønske om beskrive nanofeltets interdisciplinaritet indikerer analysen, at interfield-teorier ikke indfanger den integration, der eksisterer i aktuelle ph.d.-afhandlinger i nanoforskning.

Opsamling

Nanofeltets interdisciplinære natur er i dette kapitel blevet belyst med afsæt i de faglige integrationer, der beskrives i kapitel 5. Herved ses, at interdisciplinaritet i nanoforskning ikke udelukken- de kan forklares ud fra integrerende nanoskalaobjekter eller teknovidenskabelighed. Det fremstår klart, at interdisciplinariteten er langt mere kompleks end nanoskalaobjekter eller teknovidenska- belighed indfanger. Derfor konkluderes det, at et ensidigt fokus på nanoskalaobjekter forsimples billedet af den interdisciplinaritet, der foregår, og et ensidigt fokus på teknovidenskabelighed for- simples forholdet mellem nanoforskningens ønske om at demonstrere og forstå.

Analysen indikerer, at interfield-teorier ikke er velegnede til at indfange den faglige integrati- on i samtidig nanoforskning. En yderligere undersøgelse af interfield-teoridannelse i nanoforsk- ning er nødvendig for at kunne afdække årsagen hertil. Jeg foreslår, at fraværet af interfield- teorier kan være et karaktertræk ved nanoforskningen samt dens interdisciplinaritet, men også ph.d.-afhandlingens særegne genre og interfield-teori-begrebet.

7. Integration i nanoforskning

Med afsæt i de former for integration i ph.d.-afhandlingerne, der er identificeret og beskrevet i kapitel 5, afdækkes den faglige integration i større detalje i dette kapitel. I kapitlets første afsnit diskuteres fire aspekter af den faglige integration, der undervejs i analysen har vist sig at være centrale i en detaljeret forståelse af faglig integration. I kapitlets andet afsnit reflekteres over, hvad sammenkoblingen mellem videnskabsfilosofiske beskrivelser og en detaljeret læsning af nanofaglige vidensprodukter viser, om den måde faglig integration kan forstås og beskrives.

7.1 Hvad har vi lært om integration?

Specialets analyse viser, at det er muligt at identificere forskellige former for integration i nanoforskning, og det er blevet demonstreret, at integration er et fænomen, der lader sig analysere, klassificere og karakterisere. Således er faglig integration ikke blot et fænomen, der på tilfældig og uforklarlig vis opstår, når forskellige discipliner mødes.

Identifikation af integration via grænseobjekter viser, at genstande, der befinder sig på de kognitive snitflader mellem to discipliner, kan fungere som rum for en integration. Tilsvarende viser integration qua teknovidenskabelighed, at ønsket om at ville demonstrere en mulighed kan føre til integration gennem metode og teori fra forskellige discipliner. Denne viden er nyttig for vejledere og undervisere, der skal understøtte interdisciplinær nanoforskning, idet integrerende grænseobjekter eller teknovidenskabelighed kan identificeres i forskningsprojekter, og således kan den pågældende integration bedre understøttes. Desuden kan en belysning af den integration, der foregår, også styrke forskernes evne til at formidle sin forskning og dermed gøre dem bedre i stand til at finde økonomisk og politisk støtte til sine projekter. Muligheden for at kategorisere og beskrive integration som et videnskabeligt produkt er altså både vigtig for interdisciplinære uddannelser og videreformidlingen af den interdisciplinære forskning.

Samtidig viser analysen i dette speciale, at faglig integration er mangefacetteret, og at nanoskalaobjekter og teknovidenskabelighed ikke kan forklare al den faglige integration, der foregår. Den præsenterede analyse af forskellige former for integration udgør dog ikke en udtømmende beskrivelse af den faglige integration i nanoforskning. I dette afsnit afdækkes, hvilke øvrige forhold ved faglig integration, der under analysen har vist sig at være nødvendige at undersøge nærmere, for at opnå en dybere forståelse for faglig integration.

Integrationens videnskabelige bidrag

I afsnit 5.2 beskrives, at nogle af de identificerede integrationer *gør det muligt* at lave nye videnskabelige fremskridt, mens andre integrationer skaber en sammenfletning af disciplinære beskrivelser, der dermed bidrager med *et større billede* og bedre helhedsforståelse. På trods af at der tilsyneladende er en forskel i det videnskabelige bidrag, som de identificerede integrationer udgør, er det ikke sikkert, at de identificerede bidrag er komplementære videnskabelige bidrag. Det ligger uden for rammerne af dette speciale at undersøge nærmere, men yderligere analyser af disse typer af integration og en sideløbende terminologisk udvikling må foretages. Dermed kan det afgøres, om de identificerede typer af videnskabelige bidrag er komplementære, overlappende eller udtryk for en forskellighed i dybereliggende karakteristika ved den integrerede viden.

I forhold til at forstå, understøtte og uddanne folk til at kunne integrere, er identifikation af integrationens forskellige videnskabelige bidrag central, idet en italesættelse af integrationens formål kan støtte integrationen. Desuden kan identifikationen af integrationens videnskabelige bidrag tjene som argument for interdisciplinaritetens berettigelse i en normativ debat om, hvornår og hvorfor interdisciplinaritet er ønskeligt.

	A) Et større billede	B) Gør det muligt
Identificeret integration	• Biokemi, neurologi • Molekylærbiologi, histologi • Molekylærbiologi, embryologi	• Computervidenskab, biokemi, kvantekemi • Laserfysik, kvantekemi • Computervidenskab, biokemi

Tabel 2 er en oversigt over de identificerede integrationer og de videnskabelige bidrag, integrationen kan tilskrives. Det foreslås, at de to kategorier "et større billede" og "gør det muligt" undersøges nærmere.

Graden af integration og den kognitive spredning

Under analysen er der identificeret integrationer, som fremstår svagere end de øvrige. Det ses tydeligst i integrationen mellem el-lære, syntesekemi og programmering i *afhandlingen om nanopartikelsyntese*. Dette peger på, at integration kan variere med hensyn til hvor høj grad af integration, der foregår. Interdisciplinaritet beskrives ofte som en forskningstype, hvori der *a priori* foregår integration. Denne opfattelse bør nuanceres, eftersom interdisciplinær forskning kan rumme forskellige grader af faglig integration. Dog er graden af integration svær at konkretisere, fordi der hverken eksisterer en formaliseret metode til at bestemme graden af integration eller et veludviklet vokabularium til at sætte ord på de forskellige grader af integration.

Integrationen mellem el-lære, syntesekemi og programmering adskiller sig ikke kun fra de øvrige integrationer, idet den udviser lav grad af integration. Den adskiller sig også med hensyn til den kognitive spredning af de involverede discipliner. Den kognitive spredning er beskrevet af Hanne Andersen i manuskriptet "*Structure and Development of Contemporary Science*", oplæg holdt ved "Philosophy of/as Interdisciplinarity Network" (Andersen, 2012), som et mål for hvor stort overlap, der er i mellem de disciplinære matricer for de involverede discipliner i interdiscipli-

nært arbejde. Hvad angår den svage integration af el-lære, syntesekemi og programmering, er det karakteristisk, at den kognitive spredning mellem de tre discipliner er større, sammenlignet med de øvrige identificerede integrationer.

For *afhandlingen om nanoconfinement af hydrider og afhandlingen om anionsubstitution i hydrider* er der hverken identificeret grænseobjekter, teknovidenskabelig integration eller nye interfield-teorier, hovedsageligt fordi de indgående teorier og metoder udelukkende tilhører den kemiske videnskab. Under læsningen er det dog noteret, at begge afhandlinger, og i særdeleshed *afhandlingen om anionsubstitution i hydrider*, har et stort indledende fokus på samfundsrelaterede og miljømæssige udfordringer knyttet til energiforbrug (Nielsen, s. 1-2; Rude, s. 1-9). Selvom det ligger uden for dette speciales rammer at fortolke inddragelsen af samfundsvidenskabelige motiver i naturvidenskabelig forskning, fylder det så meget, at det alligevel må nævnes. Sammenfletningen mellem samfundsvidenskaben og kemien er så vag, at det ikke kan kaldes en integration, men nærmere en parallelbeskrivelse. Denne parallelbeskrivelse adskiller sig yderligere fra de øvrige integrationer, idet den kognitive spredning mellem kemi og samfundsvidenskab er meget større end for nogle af de øvrige integrationer, der er identificeret.

Disse iagttagelser motiverer, at en større analyse af integrationer i nanoforskning indeholder en undersøgelse af, hvordan integrationer kan variere i styrke, og hvordan den kognitive spredning mellem de involverede discipliner ligeledes kan variere.

	Lav integration	Ingen integration
Identificeret Integration	el-lære, programmering, syntesekemi	samfundsvidenskab, uorganisk materialekemi

Tabel 3 er en oversigt over de to identificerede sammenfletninger, der kan kategoriseres med henholdsvis lav grad af integration og ingen integration.

Computervidenskab: Disciplin eller redskab?

Flere af de analyserede afhandlinger gør brug af computermødeller, computerberegninger eller programmering. Det rejser spørgsmålet, om computervidenskab er et værktøj eller en selvstændig disciplin, der indgår i den faglige integration. Spørgsmålet belyses her med en analyse af, hvordan computervidenskaben indgår i tre af de mest computerbaserede afhandlinger.

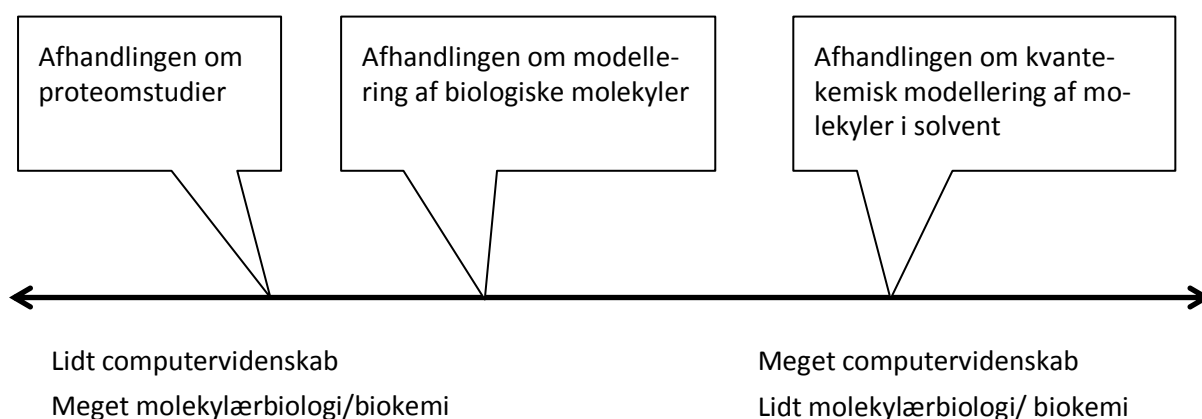
I *afhandlingen om kvantekemisk modellering af molekyler i solvent*, hvor der udvikles computermødeller til bestemmelse af molekyllære egenskaber, spiller computervidenskaben en stor rolle, og efter en gennemgang af den kvantekemi, der ligger bag "the Polarizable Embedding Coupled Cluster Method", præsenteres det, hvordan disse overvejelser implementeres i en programmering (Sneskov, s. 25-36). En del af afhandlingens videnskabelige bidrag ligger i denne implementering, idet programmeringen bliver lavet både robust og effektiv (ibid., s. xi). I afhandlingen har computermødelleringen altså to roller: Dels er afhandlingen motiveret af et ønske om at kunne beregne solvatiserede kemiske egenskaber som en- og to-foton absorption, hvilket er egenskaber, der knytter sig til kemien og kvantekemien. Dels har opgaven det formål at designe

algoritmer, der både er robuste og effektive nok til, at udregningerne kan foretages af almindelige computere. Dette formål knytter sig altså til computervidenskaben (ibid., s. xi).

Afhandlingen om modellering af biologiske molekyler minder på flere måder om *afhandlingen om kvantekemisk modellering af molekyler i solvent*, idet modellering også spiller en fremtrædende rolle. Men hvor *afhandlingen om kvantekemisk modellering af molekyler i solvent* også har et computervidenskabeligt formål, der knytter sig til effektiv og hurtig modellering, så er dette ikke gældende for *afhandlingen om modellering af biologiske molekyler*. Denne afhandling motiveres i stedet af et ønske om at forstå strukturen af biologiske molekyler, der ikke lader sig strukturbestemme eksperimentelt.

I *afhandlingen om proteomstudier* er computervidenskab ikke identificeret som en indgående disciplin, selvom første del af afhandlingen faktisk handler om at programmere et datamining-program, der kan anvendes i afhandlingens to senere studier. Computervidenskaben spiller altså en vigtig rolle i afhandlingens første tredjedel, selvom computervidenskaben ikke indgår i beskrivelser af de identificerede grænseobjekter.

Computervidenskab beskrives i analysen af former for faglig integration i kapitel 5 som en selvstændig disciplin, der indgår i den faglige integration i *afhandlingen om kvantekemisk modellering af molekyler i solvent* og *afhandlingen om modellering af biologiske molekyler*. Her spiller modellering så stor en rolle, at computervidenskab ikke blot kan opfattes som et værktøj. Modsat opfattes computervidenskaben som et redskab i *afhandlingen om proteomstudier*, fordi dets rolle i integrationen er mindre og implicit. Computervidenskab opfattes altså som en disciplin i nogle afhandling og ikke i andre, fordi vægtningen er anderledes, og ikke fordi computervidenskaben bliver brugt anderledes. Den forskellige vægtning er illustreret i figur 7.



Figur 7 er en simplificeret skitse over vægtningen mellem computervidenskab og molekylærbiologi/biokemi i de tre diskuteret afhandling. Jo længere til højre ad aksens, jo mere computervidenskab og jo mindre molekylærbiologi. Jo længere mod venstre ad aksens, jo mindre computervidenskab og jo mere molekylærbiologi/biokemi.

Det skal understreges, at illustrationen kun baseres på den vægtning, som computervidenskaben har i de foreliggende ph.d.-afhandlinger, og det er muligt, at programmering og modellering set i anvendt tid eller kognitive udfordringer har fyldt en større andel af projektet.

Den hyppige brug af computervidenskab og computerens regnekraft rejser et mere generelt spørgsmål til vores forståelse af interdisciplinær forskningsaktivitet og faglig integration: Når der tales om interdisciplinær forskning, menes så også, at en teoretisk fysiker, der gør brug af avancerede computere foretager interdisciplinær forskning? Hvad hvis beregningerne bliver lavet i hånden? Computervidenskaben spiller en rolle i dag, der minder om den matematikken længe har spillet. Selvom matematik, computervidenskab og den øvrige naturvidenskab i dag meget ofte indgår i faglige integrationer, så er det sjældent denne slags faglig integration, der tænkes på, når interdisciplinariteten hyldes. Det kunne være interessant at undersøge computervidenskabens rolle i nanoforskning yderligere, blandt andet for at finde ud af om denne type faglige integration adskiller sig fra de øvrige integrationer.

Hvis flere nanoforskere laver forskning, hvor computervidenskab og naturvidenskab integreres, må det overvejes, om uddannelser i nanoscience og nanoteknologi kan målrettes således, at de studerende bliver uddannet i at foretage denne type integration.

Ny integration eller etableret tværfaglighed?

Under udførelsen af analysen har det vist sig vanskeligt at afgøre, om de videnselementer, der tilsyneladende tilhører forskellige discipliner, egentlig indgår i et etableret tværfagligt felt, der bør opfattes som en selvstændig subdisciplin. Udfordringen skyldes, at der er en flydende grænse imellem etableret tværfaglighed, der fremstår monodisciplinær, og en ny integration, der fremstår interdisciplinær. For samtlige afhandlinger har denne sondring været svær, men uundgåelig at forholde sig til, og det er værd at synliggøre de vurderinger, der er blevet foretaget. Herved afsløres dels en metodisk udfordring, dels rejses et generelt spørgsmål om nyskabelse i nanoforskningens faglige integration.

I *afhandlingen om nanoconfinement af hydrider* og *afhandlingen om anionsubstitution i hydrider* er der ikke identificeret nogen integration, idet det vurderes, at al den viden, der indgår, knytter sig til uorganisk materialekemi. Alligevel indeholder også disse afhandlinger viden fra forskellige discipliner i den forstand, at uorganisk materialekemi i sig selv indeholder teori og metode fra både fysikken og kemien. Omend der eksisterer tværfaglige elementer i uorganisk materialekemi, er disse elementer så etablerede og formaliserede, at det her tolkes som en selvstændig subdisciplin.

For *afhandlingen om orientering af molekyler via lasersystemer*, der inddrager kvantekemi og laserfysik i orienteringen af molekyler opfattes kvantekemi og laserfysik som to særskilte subdiscipliner, der integreres i afhandlingen. Dog kan det indvendes, at denne integration ikke er opfundet i denne afhandling, men udgør et etableret forskningsområde. Med det udgangspunkt kan der ikke identificeres faglig integration i afhandlingen.

Disse eksempler illustrerer, at identifikationen af en faglig integration er afhængig af, om koblingen af de involverede discipliner opfattes som etableret eller kontroversiel. Jo mindre etableret og jo mere kontroversiel, desto mere fremstår sammenfletningen som en integration. Hvis forskning inden for orientering af molekyler med tiden bliver mere etableret, vil det også fremstå som et selvstændigt tværfagligt felt ligesom uorganisk materialekemi.

Den uklarhed, der eksisterer i analysen om subdisciplinernes relation, er en uundgåelig konsekvens af, at der i analysen af ph.d.-afhandlinger tegnes et stillbillede af vidensfelter, på trods af at viden og disciplinære afgrænsninger er under konstant forandring. Dette beskrives af videnskabsteoretikerne Ismael Rafols og Martin Meyer som en iboende svaghed i enhver taksonomisk kategorisering, der skaber faste grænser i et flydende videnslandskab (Rafols & Meyer, 2010, s. 264).

Udfordringerne ved at skelne mellem nyskabende integration og etableret tværfaglighed er ikke kun en metodisk udfordring. Det afslører samtidig et interessant aspekt af faglig integration i nanoforskning. Noget nanoforskning er integrerende, selvom det arbejder inden for etablerede tværfaglige felter, som eksempelvis materialekemi, kvantekemi eller molekylærbiologi. Andet nanoforskning er integrerende på en mere nyskabende måde, hvor teknikker eller teorier fra forskellige discipliner, der længe har eksisteret uden påvirkning fra hinanden, integreres. Det gælder f.eks. syntesekemi, programmering og el-lære.

En demarkation mellem ny integration og etableret tværfaglighed kan ikke kan findes i de konkrete forskningsprojekter, hvor det nyskabende og kontroversielle eksisterer i forskellige grader. Derfor forslås, at integrationer i nanoforskning opfattes som nyskabende i forskellige grader.

I et uddannelsesperspektiv er det interessant, at afhandlingernes faglige integrationer fordeles sig på et spektrum fra etablerede relationer som mellem molekylærbiologi og histologi til mere kontroversielle relationer som mellem el-lære og syntesekemi. Det peger på, at den interdisciplinære uddannelse ikke kun er relevant for den kontroversielle forskning. I de tværfaglige etablerede felter, der ikke er etablerede eller store nok til at have egne uddannelser, kan nanoteknologiens interdisciplinære uddannelse være en fordel, fordi felterne gør brug af teknikker og teorier, der trækker på viden fra forskellige discipliner. Eksempelvis kan en tværfaglig uddannelse i et allerede etableret felt som uorganisk materialekemi være gavnlig, fordi der indgår teknikker og teorier, som har rødder i både fysik og kemi.

7.2 Reflektioner: Videnskabsfilosofien møder naturvidenskab

I dette speciale inddrages tre videnskabsfilosofiske modeller for forskning på tværs af discipliner, og med udgangspunkt i disse er faglig integration i udvalgte ph.d.-afhandlinger blevet belyst. Denne metode giver anledning til at overveje, hvad brugen af videnskabsfilosofiske modeller i en analyse af naturvidenskabelige vidensprodukter fortæller, om den måde integration kan forstås og beskrives.

Et frugtbart, men vanskeligt venskab

Den præsenterede analyse af faglig integration viser, at videnskabsfilosofiske modeller for vidensdannelse kan fungere som afsæt for en øget forståelse af faglig integration i nanoforskningen. Analysen demonstrer på den måde, at videnskabsfilosofien kan være et nyttigt værktøj til at indfange og beskrive de komplekse egenskaber, der kendetegner aktuel forskning, herunder faglig integration i nanofeltet.

Analysen har desuden demonstreret, at en naturfaglig indsigt kombineret med en forståelse for videnskabsfilosofisk tænkning, gør det muligt at nuancere videnskabsfilosofiske beskrivelser af nanoforskning. Det nævnes ofte, at nanofeltet er interdisciplinær qua integrerende nanoskalaobjekter, men igennem en detaljeret analyse af den viden, nanoforskere producerer, har det vist sig, at dette er et forsimplet billede af den integration, der faktisk foregår. Ligeledes har det vist sig, at Nordmanns beskrivelser af nanoforskningen som teknovidenskab forsimples det komplekse forhold, der eksisterer i mellem forståelse og anvendelse i aktuel nanoforskning. En dybdegående indsigt i den viden, nanoforskere producerer, kan altså bidrage til, at de videnskabsfilosofiske diskussioner om integration i nanoforskning tager afsæt i - og stemmer overens med - den viden, der faktisk produceres.

Mødet mellem videnskabsfilosofi og ph.d.-afhandlinger fra nanoforskningen er dog ikke uproblematisk: De videnskabsfilosofiske modeller for vidensdannelse på tværs af discipliner er formuleret på et generelt plan, og de kan ikke uovervejede anvendes som analytiske værktøjer i en analyse af et konkret stykke viden. Modellerne må undergå en konkretisering for at kunne åbne op for det foreliggende vidensprodukt - og dette er hverken simpelt eller uproblematisk. I løbet af dette speciale er det blevet klart, at selv de videnskabsfilosofiske beskrivelser, der virker fyldestgørende og plausible på et generelt plan, kan være svære at genfinde, kan virke for snævre eller i værste fald kan være misvisende i den konkrete sammenhæng. Det er eksempelvis en udfordring for alle tre anvendte teoretiske modeller, at ny viden formuleres i et kompliceret netværk af både ny og gammel viden. Dette skaber en kompleksitet i det konkrete foreliggende vidensbillede, der gør det svært at genfinde abstrakte fænomener - hvad end der er tale om interfield-teorier, grænseobjekter eller teknovidenskabelighed.

En anden udfordring ligger i at kunne klassificere og identificere disciplinære elementer i et konkret vidensprodukt. Inddeling af viden i discipliner er mindre problematisk, når man ser viden overordnet og derfor kan benytte discipliner som vage termer, uden at skulle forholde sig til den underliggende kompleksitet. Når man ønsker at forstå integration i et konkret vidensprodukt, bliver man nødt til at forholde sig til kompleksiteten i disciplinerne, hvorved billedet bliver rodet.

Udfordringerne knytter sig til, at der endnu ikke findes en etableret måde at beskrive og karakterisere integration mellem discipliner i konkrete forskningsprojekter. Dette speciale begyndte med ønsket om at beskrive forskellige *typer* af integration, men med beskrivelserne af integration gennem interfield-teori, grænseobjekt og teknovidenskabelighed stod det klart, at der ikke er tale om *typer* af integration, men mere forskellige *rum*, hvori integrationen kan foregå. I mangel på

bedre er ordet *former* for integration blevet valgt i stedet. Dermed står det også klart, at der stadig ligger et arbejde i at beskrive, hvad der foregår inden for dette rum, hvor integrationen forløber. Hertil mangler både metode og terminologi.

For at kunne udvikle en større terminologi om faglig integration, er det formentlig nødvendigt ikke kun at betragte integration som et færdigt produkt, men også at vende blikket mod integrationsprocessen. Herved vil man bedre være i stand til at afgøre, hvilke typer af faglig integration, der foregår, og ikke mindst hvilke udfordringer der knytter sig til dem. En samlet analyse af integrationen og integrationsprocessen kunne altså videreudvikle en bredere og dybere forståelse af faglig integration i nanoforskning.

Opsamling

Analysen i kapitel 5 har vist, at der forekommer forskellige former for integration i nanoforskningen. Denne indsigt udgør et nyt detaljeniveau i beskrivelserne af faglig integration, og kan forbedre muligheden for at italesætte den faglige integration på interdisciplinære uddannelser, samt forbedre forskernes mulighed for at formidle den interdisciplinære forskning.

Analysen indikerer, at de identificerede integrationer varierer med hensyn til det videnskabelige bidrag, som integrationen udgør. Desuden indikeres, at integration kan være nyskabende i forskellige grader – nogle integrationer fremstår meget kontroversielle, mens andre integrationer er mere etablerede.

Det er blevet afdækket, at en varierende grad af integration, den kognitive spredning i de involverede discipliner og computervidenskabens rolle i nanofeltets integration er centrale og interessante aspekter, der bør undersøges nærmere for at opnå en mere detaljeret forståelse af faglig integration i nanoforskning.

Kapitlet slutter med en refleksion over samspillet mellem naturvidenskab og videnskabsfilosofi. Dette speciale demonstrerer, at der kan opnås nyttig indsigt, hvis videnskabsfilosofiske modeller forholder sig til detaljerne i den viden, der produceres i nanoforskning. Dog demonstreres også, at faglig integration i et konkret vidensprodukt er vanskeligt at belyse med de forhåndenværende metoder og termer.

8. Interdisciplinaritetens vilkår

I dette afsluttende kapitel vendes blikket mod de rammer, som den faglige integration i nanoforskningen påvirkes af, og det diskuteres hvordan den faglige integration, der er identificeret, kan forklares ud fra de institutionelle vilkår, som forskningen udføres under.

8.1 Hvorfor ses ikke mere interdisciplinaritet?

En af Danmarks mest fremtrædende nanoforskere har udtalt, at *"[n]anoteknologi er fysik, kemi, molekylærbiologi og biologi i skøn forening"* (Besenbacher, 2002), og nanofeltet fremhæves ofte som lærebogseksemplet på interdisciplinær forskning (som beskrevet i afsnit 1.2). Set i det lys kan det undre, at der i analysen af faglig integration ikke er fundet flere overbevisende eksempler på kontroversiel og nyskabende integration mellem fysik, kemi, biologi og molekylærbiologi. Hvorfor identificeres der ingen integration i afhandlingerne om forbedring af hydrogenopbevaring? Og hvorfor er de involverede discipliner i flere af de faglige integrationer, så tæt forbundne, at det er diskutabelt, om der virkelig er tale om en integration? I dette kapitel diskuteres to institutionelle forhold, der kan forklare den svage grad af integration.

Domineret af monodiscipliner

Den svage grad af integration i de analyserede afhandlinger kan knyttes til en udfordring ved at evaluere det interdisciplinære arbejde. Det er blevet påpeget, at interdisciplinær forskning er udfordret i forhold til fagfællebedømmelsen i videnskabelige tidsskrifter, fordi det er vanskeligt at afgøre, hvordan og af hvem den interdisciplinære forskning skal bedømmes (Bechtel, 1986b, s. 27). Ph.d.-afhandlingernes bedømmelsesudvalg foretager fagfællebedømmelsen for ph.d.-afhandlingerne, og i tabel 4 nedenfor ses den institutionelle tilknytning for de personer, der har indgået i bedømmelsesudvalgene for de analyserede ph.d.-afhandlinger.

Den institutionelle tilknytning afspejler ikke nødvendigvis den disciplin, personerne forsker indenfor, men giver en indikation på de ekspertiser, der optræder i bedømmelsesudvalgene.²⁴

²⁴ Som det også anfægtes i kritikken af Schummers bibliometriske analyse af interdisciplinaritet i nanoforskning (afsnit 1.3), kan det ikke alene på baggrund en forskers institutionelle tilknytning afgøres, hvilken forskning han/hun foretager. Det er muligt, at to forskere ansat på et institut for fysik kan have forskellige uddannelser eller, at de laver interdisciplinær forskning. Alligevel afspejler den institutionelle baggrund i en vis grad det vidensfelt, man er ekspert i, og det er udgangspunktet for dette argument.

Bedømmelsesudvalgene er i det lys påfaldende monodisciplinære, hvilket peger på, at udfordringen ved at bedømme den interdisciplinære viden i ph.d.-afhandlingerne ikke er løst. Eksempelvis indeholder bedømmelsesudvalget for *afhandlingen om kvantekemisk modellering af molekyler i solvent* udelukkende personer fra institutter for kemi, og ikke en person fra et datalogisk institut, der kan evaluere den computermodellering, der er en del af det videnskabelige bidrag.

Når bedømmelsesudvalgene hovedsagligt er monodisciplinære, er det dermed sandsynligt, at der i evalueringen af afhandlingerne bliver lagt særligt vægt på kvaliteten af arbejdet inden for den repræsenterede monodisciplin. Samtidig er det tvivlsomt, om integrationen og det arbejde, der ligger i at foretage en faglig integration, bliver bedømt. En manglende opmærksomhed på værdien af det integrerende arbejde er reelt en devaluering af arbejdet, der kan føre til en nedprioritering af det interdisciplinære arbejde blandt studerende og forskere. Det kan være den devaluering, der kommer til udtryk igennem den svage grad af faglig integration i de analyserede afhandlinger.

Bedømmelsesudvalgenes sammensætning afspejler formentlig den opfattelse blandt vejledere og ph.d.-studerende, at videnselementerne i afhandlingerne er så kognitivt beslægtede, at afhandlingen kan bedømmes inden for et enkelt institut. En tilrettelæggelse af forskningsprojekterne, der muliggør at de kan bedømmes af eksperter inden for de etablerede monodiscipliner, kan være et udtryk for, at de institutionelt etablerede monodiscipliner dominerer den interdisciplinære forskning. Således kan de monodisciplinære bedømmelsesudvalg og den svage grad af kontroversiel integration dække over, at der reelt foregår en dominans af etablerede monodiscipliner igennem universiteternes nedsættelse af bedømmelsesudvalg.

Heraf følger, at hvis integrationen og det interdisciplinære arbejde skal fremmes, må man sikre, at bedømmelsesudvalgene er sammensat således, at de har redskaber til at evaluere det interdisciplinære element.

Afhandlingens navn	Bedømmelsesudvalgets tilknytning
<i>Imaging Molecular Frame Dynamics Using Spatially Oriented Molecules</i>	iNANO (formand). Institut für Physik. Institut für Kernphysik.
<i>Computational Studies of Membrane Mimics and Peptides</i>	iNANO og Institut for Kemi (formand). Department of Biochemistry & Biophysics Novozymes A/S.
<i>Nanoconfined Hydrides for Energy Storage</i>	iNANO og Institut for Kemi, (formand). Group of Inorganic Chemistry and Catalysis, Debye Institute for Nanomaterials Science. Institute for Energy Technology.

Afhandlingens navn	Bedømmelsesudvalgets tilknytning
<i>Proteomics and Data Mining - Study of the human cornea proteome and the human embryo secretome</i>	iNANO, (formand). Institute of Bioinformatics, Proteome Informatics. Department of Protein Science, Novo Nordisk A/S.
<i>The Polarizable Embedding Coupled Cluster Method - Exciting News from Beyond the Vacuum</i>	iNANO og Institut for Kemi (formand). Department of Chemistry. Department of Chemistry.
<i>Nucleation, Growth and Morphology of Nanoparticles</i>	iNANO og Institut for Kemi (formand). Department of Polymer Science and Engineering- Institut de Chimie de la Matière Condensée.
<i>Anion substitution in metal borohydrides</i>	iNANO (formand). Dept. Energy, Environment and Mobility (Div. Hydrogen & Energy), EMPA Materials Science and Technology. Department of Chemistry.

Tabel 4 er en oversigt over den institutionelle tilknytning for bedømmelsesudvalgenes medlemmer. Oplysningerne er hentet fra officielle invitationer til ph.d.-forsvarene, som ligger på Aarhus Universitets hjemmeside.

Den interdisciplinære disciplin

Den svage grad af faglig integration i de analyserede afhandlinger kan også skyldes, at nanofeltet er blevet så etableret, at den oprindeligt kontroversielle interdisciplinære nanoforskning i dag har dannet sin egen monodisciplin.

Når nanoforskning samles på centre rundt omkring på verdens universiteter, og der eksisterer bacheloruddannelser i nanoscience og nanoteknologi på flere af Danmarks universiteter, er det et udtryk for, at der sker en institutionalisering af det interdisciplinære felt, der i høj grad minder om den institutionalisering, der sker for discipliner. Collins et al. beskriver, hvordan samarbejde mellem forskellige fagligheder kan tage forskellige former og giver i deres artikel et eksempel på, hvordan samarbejdet kan ændre sig over tid (Collins et al., 2007). De peger på, at al forskning, der starter som en interdisciplinær aktivitet kan ændre karakter med tiden. De interdisciplinære projekter kan udvikle sig til et selvstændigt felt, hvis medlemmerne af det interdisciplinære projekt bliver tilstrækkeligt gode til at kommunikere med hinanden og forstå hinandens forskellige discipliner, så et fælles videnskabeligt sprog opstår, således som det eksempelvis er sket for biokemien (Collins et al., 2007, s. 662).

Hvis institutionaliseringen har tendens til at disciplinere felterne, som det foreslås af Collins et al., kan den ringe grad af interdisciplinaritet i afhandlingerne være et udtryk for, at nanofeltet har undergået en institutionalisering, der gør nanoforskningen til en forskningsaktivitet, der bedst kan kaldes en interdisciplinær disciplin. Set i det lys, er det tankevækkende, at Aarhus Universitet

med sin seneste reform har haft iNANO som forbillede og oprettet fem nye interdisciplinære centre for at støtte den interdisciplinære forskning. Institutionaliseringsrisikoen er nemlig at blive så succesfuld, at den omformer den interdisciplinære forskning til selvstændige discipliner.

Hvis de analyserede afhandlinger kun i svag grad rummer kontroversiel faglig integration, fordi nanoforskningen bliver domineret af eksisterende monodiscipliner, vil øget institutionalisering og dermed selvstændiggørelse af nanoforskningen understøtte den interdisciplinære forskning. Hvis forklaringen modsat er, at nanoforskningen ikke er mere interdisciplinær, fordi forskningen er blevet så institutionaliseret, at den har opnået monodisciplinær karakter, vil en øget institutionalisering og dermed disciplinering undergrave den interdisciplinære nanoforskning.

Den fulde forklaring er formentlig mere kompliceret end blot den ene af de to forklaringer alene. Inden for rammerne af denne opgave kan det blot påpeges, at der ligger en udfordring i at besvare, hvordan man bedst kan understøtte interdisciplinær forskning. Samtidig kan det opsamlende konkluderes, at nanofeltets interdisciplinære natur er langt mere kompliceret end det indtryk man får, når nano-proponenter fremhæver nanoforskningen som et læreborgseksempel på interdisciplinaritet.

9. Konklusion

I dette speciale er faglig integration i aktuel nanoforskning blevet undersøgt gennem en detaljeret læsning af ph.d.-afhandlinger, skrevet af personer med en interdisciplinær nanouddannelse.

Specialet har frembragt et nyt detaljeniveau i beskrivelserne af faglig integration, idet det er blevet vist, at der eksisterer forskellige former for faglig integration i aktuel nanoforskning. Det ses, at integration kan foregå igennem grænseobjekter, hvor en genstand befinder sig på en snitflade mellem discipliner og danner rum for den faglige integration. Det ses yderligere, at integration kan knyttes til teknovidenskabelighed, hvor ønsket om at demonstrere en mulighed i laboratoriet fordrer, at teori og metode fra forskellige discipliner integreres. Dette illustrerer at faglig integration i nanoforskning er mangefacetteret.

Specialet har afdækket, at graden af integration, den kognitive spredning af de involverede discipliner og computervidenskabens rolle er centrale aspekter i en dybdegående forståelse af faglig integration i nanoscience. Yderligere ses indikationer på, at integration i nanoforskning varierer med hensyn til det videnskabelige bidrag, som integrationen udgør, samt at faglig integration i nanoforskning rummer både kontroversielle og trivielle integrationer. Disse forhold må undersøges nærmere.

De identificerede former for faglig integration har nuanceret etablerede beskrivelser af nanofeltets interdisciplinære natur, idet det er blevet vist, at interdisciplinaritet i nanoforskning ikke kan forklares alene ud fra integrerende nanoskalaobjekter eller teknovidenskabelighed. Et ensidigt fokus på nanoskalaobjekter overdriver nanoskalaobjekternes vigtighed i nanoforskningen, mens et ensidigt fokus på teknovidenskabelighed forsimples forholdet mellem nanoforskningens ønske om at forstå og anvende sin forståelse. Det står klart, at nanofeltets interdisciplinære natur er langt mere kompliceret, end de populære beskrivelser af nanoforskningen giver indtrykket af.

Gennem en inddragelse af videnskabsfilosofiske modeller og en detaljeret faglig læsning af nanoforskning, er eksisterende beskrivelser af interdisciplinaritet i nanoforskning blevet suppleret med en mere detaljeret beskrivelse af den faglige integration. En videre undersøgelse er dog stadig nødvendig i ønsket om at forstå, hvad der kendetegner faglig integration i nanoforskning, samt hvilke udfordringer der knytter sig til at bevæge sig på tværs af discipliner. Når denne detaljerede indsigt opnås, vil det blive muligt, at skabe bedre redskaber til at støtte det interdisciplinære arbejde og forbedre de interdisciplinære uddannelser i nanoscience og nanoteknologi.

10. Fremtidige studier

10.1 Øvrige interessante elementer i afhandlingerne

Igennem læsningen af de udvalgte afhandlinger har der vist sig flere problemstillinger, der ville være yderst interessante at diskutere op imod eksisterende forestillinger om nanofeltet og dets interdisciplinære natur.

Enkeltmolekyler frem for ensemble

Nanoforskningens særkende bliver af nogle nanoforskere beskrevet med, at nanoforskning beskæftiger sig med enkeltmolekyler i modsætning til fysikken og kemien, der oftere beskæftiger sig med et ensemble af molekyler. *Afhandlingerne om orientering af molekyler via lasersystemer, afhandlingen om modellering af biologiske molekyler og afhandlingen om kvantekemisk modellering af molekyler i solvent* understøtter dette billede. Det kunne være interessant at undersøge enkeltmolekylets rolle i nanoforskningen, samt undersøge om der knytter sig en særlig form for faglig integration hertil.

Lærebogseksempler

Blandt de analyserede afhandlinger optræder flere steder lærebogseksempler på, hvad nanoforskning er. Det ses eksempelvis i *afhandlingen om nanopartikelsyntese*, som eksemplificerer vigtigheden af nanopartikler ved at nævne lycurgus-koppen, et glas fra romerriget, hvis optiske egenskaber kan forklares ud fra tilstedeværelsen af nanopartikler i glasset (s. 1, Eltzholtz). Lycurgus-koppen og nanopartiklen er genstande, der ofte fremhæves i populærvidenskabelige beskrivelser af nanoforskning, og det kunne være interessant at undersøge, hvilken rolle disse og andre lærebogseksempler på nanoforskning spiller i ph.d.-afhandlinger. Man kan forestille sig, at de fungerer som markører for dannelsen af en selvstændig nanodisciplin, idet de fungerer som kuhnianske eksemplars, eller man kan forestille sig, at de er et udtryk for en søgen efter en fælles historie i et fragmenteret forskningsfelt.

Tilknytning til nanofeltet

Det er yderligere interessant at belyse, hvordan nogle afhandlinger meget eksplicit placerer sig selv i nanofeltet, mens andre ikke gør det. Det kunne være interessant at undersøge, om denne

forskellighed også dækker over en forskellighed i identitetsfølelsen og selvopfattelsen som nanoforsker. Dette kunne undersøges igennem interviews med de ph.d.-studerende.

Epistemisk afhængighed i nanoforskning

I *afhandlingen om modellering af biologiske molekyler* og i *afhandlingen om kvantekemisk modellering af molekyler i solvent* er det interessant at bemærke, at de biokemiske forsøg, der inddrages til evaluering og forbedring af computermodellerne, ikke er blevet udført af forfatteren selv. I litteraturen eksisterer der en diskussion af, hvordan interdisciplinært samarbejde bygger på en epistemisk afhængighed, og det kunne være interessant at undersøge, hvordan denne afhængighed udspiller sig i nanoforskning.

10.2 Udvidelse af dette speciale

Dette speciale har både været begrænset i omfang (dvs. antal af afhandlinger) og i dybde (dvs. hvor mange forskellige former for integration, der ledes efter). Analysen kan med fordel udvides.

Integration gennem reduktionisme

Inden for rammerne af dette speciale har jeg ikke kunne beskæftige mig med mere end tre former for integration. Det kunne dog være interessant yderligere at undersøge, om integration gennem reduktionisme opstræder i afhandlingerne. Flere af de identificerede integrationer fremstår ukontroversielle, som eksempelvis biokiemiens tilknytning til neurologien i *afhandlingen om modellering af biologiske molekyler*. Dette kan dække over, at relationen er baseret på en reduktionistisk tanke, der med stor succes har præget naturvidenskaben de sidste 100 år. I *afhandlingen om kvantekemisk modellering af molekyler i solvent* kan man finde tegn på, at problemer på biokemisk niveau reduceres til et problem på et lavere liggende niveau, eksempelvis i citatet: "*First, we seek to explain the fundamental physical reasons why the chromophore in the photoactive yellow protein (PYP) absorbs at almost completely identical wavelengths both in gas-phase and within the protein*" (Sneskov, s. 65). Selvom der tilsyneladende optræder reduktionistiske elementer i afhandlingerne, er en læsning af ph.d.-afhandlingerne ikke tilstrækkelig til at afdække, om der ligger en reduktionistisk tanke bag projektet og den integration, der foregår. Læsningen skal formentlig suppleres med en interview-baseret diskursanalyse af de ph.d.-studerendes opfattelse af disciplinernes indbyrdes relation.

Komparative studier

Den præsenterede analyse afdækker forskning fra iNANO ved Aarhus Universitet, og det vil være interessant at udvide analysen til et komparativt studie af faglig integration. Ph.d.-afhandlinger fra iNANO ved Aarhus Universitet kunne sammenlignes med ph.d.-afhandlinger fra Nano-Science

Center på Københavns Universitet, hvor uddannelsesstrukturen er anderledes. Herved kan det undersøges, om uddannelsesstrukturen fører til forskelle i den faglige integration.

Afhandlingerne fra iNANO kunne også sammenlignes med afhandlingerne fra en monodisciplinær uddannelse som kemi. Det er interessant at undersøge om en kemiker, der laver massespektrometri, er lige så tilbøjelig, som en nanouddannet, til at inddrage medicinske forklaringer i deres indledende teori.

Undersøgelse af integrationsprocessen

Som det foreslås i afsnit 7.2, kan en fuld metodologi og terminologi til beskrivelse af integration formentlig ikke udføres, hvis man holder fast i kun at se på integration som et vidensprodukt. Det er interessant at undersøge, hvordan forfatterne bag afhandlingerne opfatter den integration, de har udført, og hvordan de har oplevet integrationsprocessen. Dette kan dels give et indblik i integrationsprocessen, men også de udfordringer som de ph.d.-studerende oplever ved at gennemføre faglig integration i nanoforskning.

Litteraturliste

- ACE Denmark. (2013). Tværfaglighed på dagsordenen - Udfordringer og potentialer: ACE Denmark.
- Andersen, Hanne. (2012). *Structure and Development of Contemporary Science*. Oplæg afholdt ved konference "Challenging Philosophy: Interdisciplinary Problems and Disciplinary Philosophy", Philosophy of/as Interdisciplinarity Network, Tübingen 21.-23. september 2012.
- Apostel, L., Berger, G., Briggs, A., & Michaud, G. (1972). *Interdisciplinarity*. Paris: OECD.
- AU Kommunikation, AU Strategi, & AU Økonomi. (2013). Årsrapport 2012: Aarhus Universitet.
- Baird, Davis, & Shew, Ashley. (2004). Probing the History of Scanning Tunneling Microscopy. In D. Baird et al. (Ed.), *Discovering the Nanoscale* (Vol. 2, pp. 145-156). Amsterdam: IOS Press.
- Bechtel, William. (1986a). Biochemistry: A cross-Disciplinary Endeavor That Discovered a Distinctive Domain. In W. Bechtel (Ed.), *Integrating Scientific Disciplines* (pp. 77-106). Dordrecht: Martinus Nijhoff Publishers.
- Bechtel, William. (1986b). The Nature of Scientific Integration *Integrating Scientific Disciplines* (pp. 3-52). Dordrecht: Martinus Nijhoff Publishers.
- Bechtel, William. (1993). Integrating Sciences by Creating New Disciplines: The Case of Cell Biology. *Biology and Philosophy*, 8(3), 277-299.
- Bechtel, William. (2007). In Search of Mitochondrial Mechanisms: Interfield Excursions between Cell Biology and Biochemistry. *Journal of the History of Biology*, 40, 1-33.
- Besenbacher, Flemming. (2002, 22-09). En verden i nano, *Jyllands-Posten*.
- Brigandt, I. (2010). Beyond reduction and pluralism: Toward an epistemology of explanatory integration in biology. *Erkenntnis*, 73(3), 295-311.
- Brigandt, I. (2013). Integration in biology: Philosophical perspectives on the dynamics of interdisciplinarity. *Studies in History and Philosophy of Biological and Biomedical Sciences*, 5.
- Collins, Harry, Evans, Robert, & Gorman, Mike. (2007). Trading zones and interactional expertise. *Studies in History and Philosophy of Science*, 38, 657-666.
- Darden, Lindley, & Maull, Nancy. (1977). Interfield Theories. *Philosophy of Science*, 44(1), 43-64.
- Det Strategiske Forskningsråd. (2013). Årsskrift 2013/2012: Det Strategiske Forskningsråd Styrelsen for Forskning og Innovation.
- Dyrlund, Thomas Franck. (2012). *Proteomics and Datamining - Study of human cornea proteome and embryo secretome*. (ph.d.), Aarhus Universitet.
- ec.europa.eu.). What is meant by a societal challenge and how they have been selected? Retrieved 10/4, 2014, from <http://ec.europa.eu/research/index.cfm?lg=en&pg=faq&sub=details&idfaq=42341>
- Eltzholtz, Jakob Rostgaard. (2012). *Nucleation, Growth and Morphology of Nanoparticles*. (ph.d.), Aarhus Universitet.
- Evans, J., & Randalls, S. (2008). Geography and paratactical interdisciplinarity: Views from the ESRC-NERC PhD studentship programme. *Geoforum*, 39(2), 581-592.
- Feynman, Richard P. (1960). There's Plenty of Room at the Bottom. *Engineering and Science*, 23(5), 22-36.
- Giere, R.N. (1990). Models and Theories *Explaining Science: A Cognitive Approach* (pp. 62-91): University of Chicago Press.
- Gorman, Michael E. (2005). Levels of Expertise and Trading Zones: Combining Cognitive and Social Approaches to Technology Studies *Scientific and technological thinking* (pp. 287-302). Mahwah: Lawrence Erlbaum Associates.

- Grieneisen, M. L., & Zhang, M. (2012). The ongoing proliferation of nano journals. *Nature Nanotechnology*, 7(5), 273-274.
- Hansen, Jonas Lerche. (2012). *Imaging Molecular Frame Dynamics Using Spatially Oriented Molecules*. (ph.d.), Aarhus Universitet.
- Heldal, F. (2010). Multidisciplinary collaboration as a loosely coupled system: integrating and blocking professional boundaries with objects. *J Interprof Care*, 24(1), 19-30.
- iNANO. (2004). iNANO Annual Report 2004. In P. Thøstrup, F. Besenbacher & R. H. Nielsen (Eds.).
- Jensen et al., Anne. (2012). Fællesskab eller individualitet - om forskning og undervisning i et interdisciplinært universitetsmiljø. *Dansk Universitetspædagogisk Tidsskrift*, 7(13), 96-105.
- Klein, Julie Thompson. (1990a). The Evolution of Interdisciplinarity. In J. T. Klein (Ed.), *Interdisciplinarity: history, theory and practice* (pp. 19-39). Detroit, Michigan: Wayne State University Press.
- Klein, Julie Thompson. (1990b). Introduction: The problem of Interdisciplinary Discourse. In J. T. Klein (Ed.), *Interdisciplinarity: History, Theory, and Practice* (pp. 11-15). Detroit, Michigan: Wayne State University Press.
- Klein, Julie Thompson. (2000). A Conceptual Vocabulary of Interdisciplinary Science *Practising interdisciplinarity* (pp. 3-24). Canada: University of Toronto Press Incorporated.
- Klein, Julie Thompson. (2010). A taxonomy of interdisciplinarity. In R. Frodeman (Ed.), *Oxford Handbook of Interdisciplinarity, The* (pp. 15-30): Oxford University Press, USA.
- Kraft, Johan. (2012). *Computational Studies of Membrane Mimics and Peptides*. (ph.d.), Aarhus Universitet.
- ku.dk.). KU's 2016-pulje. Retrieved 6/3, 2014, from <http://www.science.ku.dk/finansiering/kalender/2016-pulje/>
- Kuhn, Thomas S. (1962a). Normal Science as Puzzle-solving *The Structure of Scientific Revolutions* (4 ed., pp. 35-42). USA: The University of Chicago Press.
- Kuhn, Thomas S. (1962b). Postscript-1969 *The Structure of Scientific Revolutions* (4 ed.). USA: The University of Chicago Press.
- Marzano, Mariella, Carss, David N., & Bell, Sandra. (2006). Working to Make Interdisciplinarity Work: Investing in Communication and Interpersonal Relationships. *Journal of Agricultural Economics*, 57(2), 185-197.
- Ministeriet for Forskning Innovation og Videregående Uddannelser. (2012). FORSK2020 strategiske forskningshorisonter: Ministeriet for Forskning Innovation og Videregående Uddannelser.
- Mody, Cyrus. (2011a). Introduction: Communities, Innovation, and Knowledge. In C. Mody (Ed.), *Instrumental Community - Probe Microscopy and the Path to Nanotechnology* (pp. 1-26). Cambridge, MA, USA MIT Press.
- Mody, Cyrus. (2011b). Probe Microscopy and the Path to Nanotechnology *Instrumental Community - Probe Microscopy and the Path to Nanotechnology* (pp. 163-199). Cambridge, MA, USA: MIT Press.
- Mody, Cyrus C.M., & Lynch, Michael. (2009). Test objects and other epistemic things: a history of a nanoscale object. *BJHS*, 43(3), 423-458.
- nano.gov.). Frequently Asked Questions. Retrieved 15/3, 2014, from <http://www.nano.gov/nanotech-101/nanotechnology-facts>
- nano.ku.dk.). Nanoteknologi Retrieved 15/3, 2014, from <http://nano.ku.dk/nanoteknologi/>
- nanowerk.com.). Definition – What is nanotechnology? Retrieved 15/3, 2014, from http://www.nanowerk.com/nanotechnology/introduction/introduction_to_nanotechnology_1.php
- nanowerk.com.). Nanotechnology Bachelor Degree Programs. Retrieved 27/2, 2014, from http://www.nanowerk.com/nanotechnology/bachelor_a.php
- nanowerk.com.). Nanotechnology Research – Universities. Retrieved 7/3, 2014, from http://www.nanowerk.com/nanotechnology/research/universities_a.php
- Navrotsky, Alexandra. (2000). Nanomaterials in the environment, agriculture, and technology (NEAT). *Journal of Nanoparticle Research*(2), 321-323.
- Nielsen, Thomas Kollin. (2012). *Nanoconfined Hydrides For Energy Storage*. (ph.d), Aarhus University.
- Nordmann, Alfred. (2004). Molecular Disjunctions: Staking Claims at the Nanoscale. In D. B. e. al. (Ed.), *Discovering the Nanoscale* (pp. 51-62). Amsterdam: IOS Press.

- Nordmann, Alfred. (2008). Philosophy of Nanotechnoscience *Nanotechnology* (pp. 217-244). Weinheim: Wiley.
- Porter, A. L., & Youtie, J. (2009). How interdisciplinary is nanotechnology? *Journal of Nanoparticle Research*, 11(5), 1023-1041.
- Porter, A. L., Youtie, J., Shapira, P., & Schoeneck, D. J. (2008). Refining search terms for nanotechnology. *Journal of Nanoparticle Research*, 10(5), 715-728.
- Prior, L. (2007). Talking About the Gene for Cancer: A Study of Lay and Professional Knowledge of Cancer Genetics. *Sociology*, 41(6), 985-1001.
- Rafols, I., & Meyer, M. (2010). Diversity and network coherence as indicators of interdisciplinarity: Case studies in bionanoscience. *Scientometrics*, 82(2), 263-287.
- Roco, Mihail C., & Bainbridge, William Sims (2002). Converging Technologies for Improving Human Performance. Dordrecht, The Netherlands.
- Rude, Line Holdt. (2012). *Anion Substitution in Metal Borohydrides*. (ph.d.), Aarhus University.
- Schmidt, Jan C. (2008). Towards a philosophy of interdisciplinarity. An attempt to provide a classification and clarification. *Poiesis Prax*, 5 (1), 53-69.
- Schummer, Joachim. (2004a). Interdisciplinary Issues in Nanoscale Research *Discovering the Nanoscale* (pp. 9-20). Amsterdam: IOS Press.
- Schummer, Joachim. (2004b). Multidisciplinarity, interdisciplinarity, and patterns of research collaboration in nanoscience and nanotechnology. *Scientometrics*, 425-465.
- Sneskov, Kristian. (2012). *The Polarizable Embedding Coupled Cluster Method - Exciting News From Beyond the Vacuum*. (ph.d.), Aarhus Universitet.
- Star, Susan Leigh , & Griesemer, James R. (1989). Institutional Ecology, "Translations" and Boundary Objects: Amateurs and Professionals in Berkeley's Museum of Vertebrate Zoology, 1907-39. *Social Studies of Science*, 19(3), 387-420.
- Wagner, C. S., Roessner, J. D., Bobb, K., Klein, J. T., Boyack, K. W., Keyton, J., . . . Börner, K. (2011). Approaches to understanding and measuring interdisciplinary scientific research (IDR): A review of the literature. *Journal of Informetrics*, 5(1), 14-26.
- Weingart, Peter. (2000). Interdisciplinarity: The paradoxical Discourse *Practising Interdisciplinarity* (pp. 25-41). Canada: University of Toronto Press Incorporated.
- Weingart, Peter. (2010). A short history of knowledge formations. In R. Frodeman, J. T. Klein & C. Mitcham (Eds.), *The Oxford Handbook of Interdisciplinarity* (pp. 3-14). Oxford: Oxford University Press.
- Wesselink, Anna. (2009). The emergence of interdisciplinary knowledge in problem-focused research. *Area*, 41(4), 404-413.
- Wilson, G., & Herndl, C. G. (2007). Boundary Objects as Rhetorical Exigence: Knowledge Mapping and Interdisciplinary Cooperation at the Los Alamos National Laboratory. *Journal of Business and Technical Communication*, 21(2), 129-154.

Appendiks

Indhold i appendiks

A. Originalresumeer af de analyserede ph.d.-afhandlinger	75
A.1 Imaging Molecular Frame Dynamics Using Spatially Oriented Molecules	75
A.2 Computational Studies og Membrane Mimics and Peptides	76
A.3 Nanoconfined Hydrides for Energy Storage	77
A.4 Proteomics and Data Mining – Study of the human cornea proteome and the human embryo secretome	78
A.5 The Polarizable Embedding Coupled Cluster Method – Exciting News from Beyond the Vacuum	79
A.6 Nucleation, Growth and Morphology of Nanoparticles.....	80
A.7 Anion substitution in metal borohydrides	81
B. Teknovidenskabelighed: teori- og metodevalg	83
B.1 Afhandlingen om orientering af molekyler via lasersystemer.....	83
B.2 Afhandlingen om nanoconfinement af hydrider	84
B.3 Afhandlingen om nanopartikelsyntese	85
B.4 Afhandlingen om anionsubstitution i hydrider.....	86

A. Originalresumeer af de analyserede ph.d.-afhandlinger

A.1 Imaging Molecular Frame Dynamics Using Spatially Oriented Molecules

Af Jonas Lerche Hansen, dansk resume s. iv i (Hansen, 2012):

”Molekyler er ikke blot faste strukturer som når de tegnes på et stykke papir. Tværtimod er de altid i bevægelse, hvilket betyder at selv stive molekyler på gasform vil kunne rotere frit i forhold til hinanden. En sådan samling af molekyler betegnes som tilfældigt orienterede.

I mange eksperimenter er denne tilfældige orientering ikke hensigtsmæssig da molekyllernes rumlige orientering i høj grad er bestemmende for hvorledes de vekselvirker med andre molekyler, atomer eller elektromagnetisk stråling. Dette medfører at man i sine målinger uundgåeligt kommer til at midle over alle de forskellige måder de enkelte molekyler ligger på, hvilket potentielt kan betyde at de molekyllære egenskaber, man ønsker at bestemme, udviskes.

Ved at benytte laserkemiske teknikker til at fastholde molekyler langs en eller flere akser, er det muligt at indføre en sammenhæng mellem molekylets og laboratoriets koordinatsystem, hvorved midlingen undgås. Molekyler, som fastholdes langs en akse, siges at være alignede og hvis molekylets retning langs akse samtidig kontrolleres, kaldes de orienterede. I denne afhandling arbejdes der med to hovedaspekter af alignede og orienterede molekyler: Den første del af afhandlingen omhandler videreudvikling af teknikker der kan kontrollere molekyllernes rumlige orientering, mens afhandlingens anden del udforsker eksperimentelle anvendelser af disse molekyler.

Arbejdet har især fokuseret på hvorledes orientering af stive molekyler kan anvendes til at måle udsendelsesretningen af fotoelektroner i molekylets koordinatsystem. Teoretiske beregninger under de førnævnte forudsætninger har tidligere forudsagt en undertrykkelse af elektronudsendelsen langs molekylets knudeflader. I denne afhandling præsenteres de første eksperimentelle observationer og studier af denne effekt.

Langt de fleste molekyler er dog ikke stive men i stedet fleksible strukturer. Dette gør dem i stand til at skifte imellem forskellige molekyllære former, hvorved studierne af dem yderligere kompliceres. Ved at kombinere muligheden for at fastholde fleksible molekyler med brugen af ultrakorte laser pulser til at eksitere molekyllær bevægelse langs en given reaktionskoordinat er

det muligt at "byde molekylerne op til dans" ved at kontrollere deres bevægelser og derved få molekylerne til at "twiste" i takt.

Afhandlingen illustrerer blot få af de mange anvendelsesmuligheder forbundet med evnen til at kontrollere det enkelte molekyles rumlige orientering. Fuld kontrol af denne vil potentielt muliggøre studier af fx kemiske reaktioner set fra molekylets synsvinkel.

A.2 Computational Studies and Membrane Mimics and Peptides

Af Johan Frederik Kraft, dansk resume s. XI (Kraft, 2012):

"I dette studie beskrevet i denne Ph.d. afhandling undersøges to forskellige biologiske systemer ved hjælp af molekulære modelleringsmetoder. Disse systemer er; monoamin transporterne og et lipidsystem kendt som biceller.

De humane monoamin transportere er primære mål for de antidepressive midler kendt som selektive serotonin genoptags inhibitorer samt de tricykliske antidepressiva, men derudover også for psykostimulanter såsom methylenedioxymetamfetamin (MDMA/ecstasy), kokain og amfetamin.

Da ingen løste 3D strukturer af monoamin transporterne eksisterer, er homologimodeller blevet bygget ved brugen af en løst 3D struktur af et protein (den bakterielle Leucin Transporter) der er beslægtet med monoamin transporterne.

I to af disse homologimodeller er der blevet beregnet bindingskonfiguration af liganden 1-fenyl-piperazin samt 1-(3-hydroxyfenyl)-piperazin ved brug af "induced fit docking". Efterfølgende er stabiliteten af proteinet i kompleks med liganderne blevet undersøgt for stabilitet ved hjælp af molekulær dynamiske beregninger. Resultaterne fra disse beregninger har, sammen med data fra biokemiske eksperimenter, givet indsigt i bindingen af liganderne og deres effekt på monoamin transporterne.

Disse resultater kan på sigt bruges til at videreudvikle modgifte, der kan bruges i behandlingen af forskellige former for stofmisbrug.

Biceller er disk formede lipid systemer, der typisk består af korte og lange lipider i et bestemt blandingsforhold. Disse lipid systemer har egenskaber, der er sammenlignelige med naturligt forekommende lipidmembraner. Dette har gjort biceller brugbare i forskellige former for biofysiske eksperimenter, der undersøger membran proteiner, såsom væskefase og faststof NMR.

I dette studie vil det blive undersøgt under hvilke forhold det er muligt for MARTINI kraftfeltet at reproducere egenskaberne for lipidet DHPC, der ofte indgår i bicelleblandinger. MARTINI kraftfeltets evner til at danne biceller, og interaktionen mellem et antimikrobielt peptid og bicellerne vil blive undersøgt. Dette gøres med henblik på at kunne sammenligne med data fra andre eksperimentelle metoder."

A.3 Nanoconfined Hydrides for Energy Storage

Af Thomas Kollin Nielsen, dansk resume s. xii (Nielsen, 2012):

”Hydrogen er anerkendt som en lovende fremtidig opbevaringsform af vedvarende energi, og kan være med til at danne et fundament for et miljøvenligt og karbonfrit energisystem. Hydrogen er et sikkerhedsmæssigt forsvarligt alternativ til fossile brændstoffer med vand som det eneste spildprodukt, og kan vende udviklingen med det eksponentielt stigende CO₂ indhold i atmosfæren, som medfører global opvarmning og klimaforandringer. Anvendelse af hydrogen kan fuldstændigt eliminere lokal forurening i form af skadelige udstødningsgasser og partikler fra biler, busser og lastbiler i verdens storbyer. Til hydrogenopbevaring i mobile enheder kræves en kompakt og effektiv løsning med et højt hydrogenindhold per vægt og volumen, hvilket kan realiseres ved opbevaring på fast form i materialer som MgH₂, LiBH₄ og NaAlH₄. Desværre begrænses anvendelsen af disse materialer af deres termiske stabilitet, hvorfor hydrogen kun afgives ved høje temperature $T \gg 85^\circ\text{C}$, hvilket ikke er foreneligt med lavtemperatur *proton exchange membrane* (PEM) brændselscelleteknologien.

I denne afhandling studeres nanoconfinement som en metode til at muliggøre lavtemperatur hydrogenoptagelse og afgivelse i disse materialer. Nanoconfinement er et koncept, hvor metalhydrider syntetiseres eller infiltreres i et inert nanoporøst materiale. Størrelsen af metalhydridpartiklerne begrænses derved af den gennemsnitlige porestørrelse af nanoporerne. Dette medfører adskillige fordele: (i) større overfladeareal af reaktanterne (ii) diffusionsafstande på nanoskala og (iii) øget antal af grænseflader mellem nanokrystallitter, som alle medvirker til hurtigere reaktionskinetik for hydrogenoptagelse og afgivelse.

Magnesiumhydrid nanopartikler blev inkorporeret i to udvalgte nanoporøse resorcinol formaldehyde karbon aerogeler, RF-geler, med gennemsnitlige porestørrelser på henholdsvis 22 og 7 nm. Jævnfør hydrogenafgivelsesraten for det nanoconfinede MgH₂, var det tydeligt at de mindre porer medførte hurtigere reaktionskinetik. Derved kan egenskaberne for metalhydridet altså optimeres ved hjælp af designet af det nanoporøse materiale. Hydrogenafgivelse fra LiBH₄ og MgH₂ er to meget endoterme reaktioner ($\Delta H = 75$ og 69 kJ/mol H_2), men i en kombineret kemisk reaktion dannes MgB₂, hvilket reducerer reaktionsenthalpien til 46 kJ/mol H_2 , og dette koncept kaldes reaktiv hydrid kompositer. I dette studie lykkedes det at nanoconfine 2LiBH₄-MgH₂ i samme nanoporøse materiale. Hydriderne reagerede inde i nanoporerne med en høj grad af reversibilitet, stabilitet og en signifikant hurtigere hydrogen desorptionsrate sammenlignet med en prøve, som ikke var nanoconfinet. Reaktionskinetikken kunne optimeres yderligere ved hjælp af nickel-funktionalisering af RF-gelen. Dette studie demonstrerede, at det var muligt at kombinere to koncepter, det vil sige nanoconfinement og reaktiv hydrid kompositer.

Nanopartikler bestående af NaAlH₄ blev fremstillet ved hjælp af smelteinfiltrering ind i en RF-gel, som var TiCl₃-funktionaliseret, og dette blev gjort for at studere mulige synergetiske effekter imellem nanoconfinement og et katalytisk nanoporøst materiale. Hydrogen afgivelsesraten var

signifikant forbedret for dette nye nanoconfined $\text{NaAlH}_4\text{-TiCl}_3$ materiale sammenlignet med det hidtil bedste system, som var kugleformede prøver af $\text{NaAlH}_4\text{-TiCl}_3$. Hydrogenafgivelsestemperaturen var tæt på stuetemperatur ($T_{\text{afg}} = 33\text{ }^\circ\text{C}$) og afgivelsesraten nåede et maksimum ved $125\text{ }^\circ\text{C}$. CO_2 -aktiverede RF-geler med øget overfladeareal og porevolumen blev også forsøgt anvendt til nanoconfinement af NaAlH_4 . Den reversible hydrogenkapacitet blev derved signifikant optimeret. Faktisk blev den tilgængelige hydrogenmængde ($2.7\text{ wt\% H}_2$) mere end fordoblet sammenlignet med de konventionelle nanoconfinede prøver ($1.3\text{ wt\% H}_2$). Ydermere fremgik det tydeligt, at Ti-funktionalisering af de CO_2 -aktiverede RF-geler kombinerede den høje hydrogenkapacitet med hurtig hydrogenafgivelsesrate under $100\text{ }^\circ\text{C}$.

Et systematisk studie af NaAlH_4 smelteinfiltreret i RF-geler med porestørrelser på henholdsvis $D_{\text{max}} = 4, 7, 10, 13, 19, 22, 26, 39$ and $> 100\text{ nm}$, blev også præsenteret. Dette studie viste, at størstedelen af den forbedring i kinetik og reversibilitet som nanoconfinement af NaAlH_4 medfører, kan tilskrives katalytiske egenskaber af det nanoporøse karbon materiale, og derimod har en reduktion i porestørrelsen fra 39 til 7 nm en minimal effekt.

Ammoniumborhydrid, NH_4BH_4 , har et højt hydrogenindhold på $\rho_m = 24.5\text{ wt\% H}_2$ og afgiver $18\text{ wt\% H}_2$ under $T < 160\text{ }^\circ\text{C}$. Levetiden for NH_4BH_4 ved stuetemperatur, ~ 6 timer, er dog for kort, hvis stoffet skal tages i betragtning til praktisk anvendelse. NH_4BH_4 blev stabiliseret i et modtryk af henholdsvist argon og hydrogengas, og denne observation kan forklares med et positivt aktivningsvolumen. Derfor blev nanoconfinement forsøgt anvendt som en alternativ stabiliseringsmetode. NH_4BH_4 blev dog særdeles destabiliseret og kun dekomponeringsproduktet, diammoniat af diboran $[(\text{NH}_3)_2\text{BH}_2][\text{BH}_4]$, blev observeret på trods af lavtemperatur oparbejdning. Selvom det ikke lykkedes at isolere nanoconfinet NH_4BH_4 , ledte karakteriseringen af prøverne til en overraskende opdagelse af en ny lavtemperatur $[(\text{NH}_3)_2\text{BH}_2][\text{BH}_4]$ fase.

Afslutningsvist benytter vi *in situ* tidsopløst synkrotron pulver røntgendiffraktions eksperimenter, til at studere kemiske reaktioner i $\text{Mg-MgH}_2\text{-Nb}_2\text{O}_5$ systemet, og medvirker til forståelsen af niobiumpentaoxids overlegne egenskaber som additiv. Rietveld forfininger af vores data indikerer, at en ternær fastopløsning med en ideal komposition $\text{Mg}_{0.6}\text{Nb}_{0.4}\text{O}$ er det aktive materiale, som er ansvarlig for de favorable egenskaber for hydrogen optagelse og afgivelse in Nb_2O_5 katalyseret MgH_2 ."

A.4 Proteomics and Data Mining – Study of the human cornea proteome and the human embryo secretome

Af Thomas Franck Dyrland, dansk resume s. iii (Dyrland, 2012):

"Massespektrometri har udviklet sig voldsomt de seneste år, og moderne instrumenter genererer enorme mængder af data. Databehandling og analyse af disse data er udfordrende og tidskrævende. Derfor blev MS Data Miner, et gratis web-baseret software, udviklet med det formål at minimere den tid der kræves for at analysere, validere, sammenligne og præsentere data genere-

ret i diverse MS software, herunder Mascot, Mascot Distiller og ProteinPilot. Softwaren nedsætter den tid, der kræves for at behandle store proteomics datasæt til publikation og inkluderer forskellige analyseværktøjer.

MS Data Miner blev i et stort studie af raske humane hornhinder anvendt til at udforske de molekylære mekanismer involveret og den proteinprofil der kræves for at opretholde hornhindens homeostase. De tre hovedlag af hornhinden (epitel, stroma og endothel) blev adskilt og analyseret ved massespektrometri, og der blev i alt identificeret 3250 unikke proteiner, hvoraf 771 blev kvantificeret. Mange af de identificerede proteiner er plasmaproteiner involveret i forsvarsmekanismer. Analysen giver et nyttigt reference datasæt til at udforske hornhinde sygdomme, som sammen med andre sygdomme i øjet, er årsag til at 4,2 % af verdens befolkning lider af synsnedsættelse.

Endelig blev sekretomet af humane embryoner fra fertilitetsbehandlinger undersøgt. Succesraten for fertilitetsbehandlinger er lav, idet under 30 % af behandlingerne fører til graviditet. Den lave succesrate er sandsynligvis knyttet til udvælgelsen af, hvilket embryo der skal overføres til livmoderen, en udvælgelse der i dag foretages på baggrund af embryonernes morfologi. For at undersøge alternative udvælgelsesmetoder blev mediet fra *in vitro* fertilitetsbehandlinger undersøgt for at finde proteiner udskilt af embryonerne. Disse proteiner kan derefter korreleres med embryonernes levedygtighed og anvendes som biomarkører i IVF behandlinger. I alt blev 96 potentielle humane proteiner identificeret og analyseret med targeted proteomics. Analysen af brugt embryo medie resulterede i tre co-eluerende transitions for 15 peptider, hvoraf ingen kunne bekræftes med SRM udløst MS/MS målinger. Det kunne derfor ikke bekræftes om nogen af de 96 proteiner er til stede i brugt embryo medie, og pooling af medieprøver er derfor sandsynligvis nødvendig for protein analyse med massespektrometri.”

A.5 The Polarizable Embedding Coupled Cluster Method – Exciting News from Beyond the Vacuum

Af Kristian Sneskov, dansk resume s. xi (Sneskov, 2012):

”Denne afhandling omhandler udviklingen af computermødeler til bestemmelse af molekylære egenskaber sammenlignelige med eksperimentielle målinger. En af de største udfordringer for sådanne computermødeler er, at eksperimentielle data ofte indeholder effekten af det solvent, som eksperimentet er udført i. I denne afhandling beskrives den såkaldte Polarizable Embedding Coupled Cluster (PE-CC) metode, som bygger på den velunderbyggede antagelse, at et molekylært system kan splittes op i to separate regioner: den kemisk vigtigste indre del, og en ydre del hvis tilstedeværelse bliver inkorporeret på mere effektiv vis. Det unikke aspekt for PE-CC modellen er dels, at beskrivelsen af den indre region finder sted ved hjælp af coupled cluster (CC) teori - anerkendt som den bedste enkelt-determinant beskrivelse af den elektroniske bølgefunktion - dels at den ydre region bliver beskrevet ved hjælp af polariserbare sites. Det sidste medfører, at for ek-

sempel anisotrope effekter såsom hydrogen-bindinger kan beskrives. Denne omgivelsesbeskrivelse er blevet kombineret med en Lagrange formulering af CC teori, hvilket giver mulighed for at regne solvatiserede molekyleres egenskaber såsom en- og to-foton absorption.

Fra et teknisk synspunkt, er en af de primære formål med afhandlingen at designe algoritmer, som både er robuste og beregningsmæssigt effektive. Derfor er de specielle transformationer, der er nødvendige for at inkorporere polarisations effekter, blevet implementeret på såkaldt densitetsdrevet facon. Til syvende og sidst giver dette begrænset beregningsteknisk overhead sammenlignet med traditionelle vacuum beregninger. Dette betyder at det velkendte CC respons hierarki af metoder er blevet udvidet til også at kunne beskrive solvent effekter samt fotoaktive proteiner. Metoden er blevet anvendt i mange forskellige sammenhænge. Ud over en demonstration af at metoden er anvendelig til at beskrive mange typiske solventer (vand, methanol, acetonitril og carbon-tetrachlorid), så kan den også kombineres med en molekyl-dynamik sampling strategi. Dette betyder, at statistisk midlede estimer af exciterede egenskaber kan beregnes. Derudover påvises, at metoden er overlegen til andre sammenlignelige metoder, netop fordi den fulde effekt af polarisation bliver inkorporeret også i de exciterede egenskaber selv.

De udviklede computermodeller er også blevet anvendt til at få indblik i absorptionsegenskaber af Photoactive Yellow Protein. Konkret dokumenteres det, at årsagen til at kromoforen absorberer ved næsten identisk bølgelængde både i vacuum og inde i proteinet er en hårfin balance mellem strukturelle og elektrostatiske effekter: de strukturelle restriktioner inde i proteinet medfører en blå-forskydning, som næsten fuldstændig udlignes af en modsatrettet rød-forskydning forårsaget af de elektrostatiske interaktioner med aminosyrerne. Inden for feltet, der beskæftiger sig med molekylært design, er sådan information vigtig i jagten på at udvikle nye fotoaktive proteiner med endnu bedre egenskaber end vildtypen. Dette er yderligere blevet illustreret i et farvetunings studie af Channelrhodopsin. Her blev en- og to-foton absorptionsegenskaber af et større sæt af *in silico* muterede Channelrhodopsin varianter karakteriseret. Sammenholdt med eksperimentielle målinger viser studiet, at det eksperimentielle krav om signifikant rød-forskudte Channelrhodopsin varianter ikke kan mødes i en traditionel enkelt-site mutationsstrategi.”

A.6 Nucleation, Growth and Morphology of Nanoparticles

Af Jakob Rostgaard Eltzholtz, dansk resume s. vii (Eltzholtz, 2012):

”Kapitel 2 of 3 præsenterer superkritisk syntese og superkritiske synteseapparater. Først introduceres egenskaberne af den superkritiske tilstand, hvorefter superkritiske reaktionstyper bliver gennemgået. Til slut ses der på udviklingen af superkritisk synteseudstyr med speciel fokus på flow produktion, introduceret af Adschiri *et al.* i 1992 [Reference udeladt].

Kapitel 4 er et teori afsnit hvor røntgendiffraction of transmissions elektron mikroskopi introduceres kort. I dette Ph.D.-arbejde har røntgendiffraction være brugt mest, og det er derfor denne teknik, der gennemgås mest grundigt.

Kapitel 5 dækker en central del af projektet med en detaljeret gennemgang af udviklingen af et pulseret synteseapparat. Der diskuteres hvorfor pulseret syntese er en lovende teknologi, hvilke parametre der er kritiske for at opnå problemfri syntese samt løsninger på specifikke problematikker i udviklingsarbejdet. Derudover bliver alt udviklet hardware gennemgået sammen med kontrol- softwaren, der er udviklet til at styre synteseanlægget. Til slut gennemgås en test af systemet sammen med en diskussion af potentielle problemer forbundet med syntese på anlægget.

Kapitel 6 er en brugervejledning til at forberede og køre synteser på anlægget. Kapitlet er ment som et selvstændigt værk, og der kan derfor forekomme gentagelser fra andre dele af afhandlingen. Brugervejledningen indeholder desuden udførlige beskrivelser af typiske vedligeholdelsesprocesser, såsom udskiftning af en defekt varmepatron.

Kapitel 7 omhandler brugen af reaktoren i *in situ* synkrotroneksperimenter til undersøgelser af nanopartikelvækst. Problemstillinger i forbindelse med denne brug af apparaturet diskuteres sammen med de nuværende løsninger.

Kapitel 8 beskriver synteser udført på det pulserede synteseapparat, hvor anodematerialet $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ til Li-batterier er den mest omfattende undersøgelse. Denne undersøgelse er samtidig et eksempel på en syntese, der ikke kan udføres på et flow anlæg, da der kræves lange opholdstider.

Kapitel 9 beskriver både *in situ* og *ex situ* eksperimenter udført på anatase (TiO_2). *In situ* forsøgene giver information om kimdannelse og vækst af nanopartiklerne, hvor en direkte sammenhæng mellem syntesetemperatur, opholdstid og partikelstørrelse blev etableret. På baggrund af partikelvæksten blev der udført både Lifshitz-Slyozov-Wagne og Avrami kinetikstudier med en estimeret aktiveringsenergi på 66 kJ/mol, hvilket passer udmærket med lignende studier [reference udeladt]. *In situ* forsøgene giver ydermere mulighed for at undersøge sammenhængen mellem makrostrain og partikelstørrelse, hvor en sammenligning med litteraturen viser store ligheder imellem resultater udført under lignende betingelser. Slutteligt indikeres det, at synteseparametre kan overføres direkte fra *in situ* eksperimenter til *ex situ* synteser, når det pulserede synteseapparat bruges til begge dele.”

A.7 Anion substitution in metal borohydrides

Af Line Holdt Rude, dansk resume s. xi (Rude, 2012):

”Vi står idag ved overgangen til et nyt energiregime. Stigende udgifter til fosile brændsler og de uoverskuelige konsekvenser af klimaforandringerne har medført en øget politisk opmærksomhed og vedvarende energikilder implementeres idag i stor skala i det meste af den industrialiserede del af verden. Vedvarende energikilder, for eksempel sol, vind eller bølge energi, er ulige fordelt geografisk og tidsmæssigt. Opbevaring af energi er derfor nødvendigt i et samfund, baseret på vedvarende energikilder. Energi kan opbevares i form af hydrogen. Hydrogenbaserede energiopbevaringssystemer har den højeste gravimetrisk energidensitet blandt carbon-fri energiopbevaringssystemer. Men energidensiteten for systemet er stadig væsentligt under værdien for fosile

brændsler. Det vil sige at et system der er baseret på hydrogen (700 bar), har en gravimetrisk energidensitet, der er 8 gange mindre end et system, baseret på fossile brændsler. Yderligere forskning er derfor nødvendig for at forbedre hydrogenopbevaringssystemerne.

I denne afhandling undersøges hydrogenopbevaringsegenskaberne af anion-substituerede metalborhydrider. Metalborhydrider anses for at være lovende hydrogenopbevaringsmaterialer, men kinetikken af hydrogenoptagelse og afgivelse må forbedres. Anion-substitution undersøges som en mulig metode til at ændre stabiliteten af metalborhydrider.

Substitution af BH_4^- med andre ioner af samme størrelse og ladning (for eksempel Cl^- , Br^- eller I^-) kan føre til dannelse af faste opløsninger. Anion-substitutionen undersøges i blandinger af metalborhydrider med deres tilsvarende metalhalid, $\text{MBH}_4\text{-MX}$ ($\text{M} = \text{Li, Na, Ca}$; $\text{X} = \text{Cl, Br, I}$). En trend observeres, hvor anionen med den mindste ion-radius substitueres ind i strukturen med den større anion. Dette vil medføre en øget gitter-energi i strukturen grundet reduktionen i enhedscellevolumen. Substitutionen har signifikant betydning for stabiliteten af det anion substituerede metalborhydrid. Den faste fase af metal borhydridet stabiliseres, men substitutionen har umiddelbart lille effekt på dekomponeringstemperaturen ($\Delta T < 10^\circ\text{C}$). Den ændrede stabilitet er mest udpræget for de metalborhydrider, der normalt omdannes til en smelte inden hydrogenafgivelse; LiBH_4 og NaBH_4 . Anion-substitution kan også resultere i dannelse af en ny dekomponeringsreaktionsvej med dannelse af dekomponeringsprodukter, der er unikke for det substituerede metalborhydrid. For eksempel observeres der dannelse af CaHX ($\text{X} = \text{Cl, Br, I}$) ved dekomponering af $\text{Ca}(\text{BH}_4)_2\text{-CaX}_2$. For nogle systemer kan den forandrede reaktionsvej forbedre hydrogenopbevaringsegenskaberne: $\text{LiBH}_4\text{-LiI}$ har væsentligt forbedret cyklisk kapacitet, men oftest er hydrogen afgivelsesegenskaberne uændrede for de substituerede metalborhydrider.

Den mindre fluorid ion (F^-) kan substituere for hydrid ionen H^- . Fluor-substitution undersøges i blandinger af metalborhydrider med deres tilsvarende metalborfluorid, $\text{MBH}_4\text{-MBF}_4$ ($\text{M} = \text{Li, Na, Ca}$). Direkte observation af fluor-substitution er meget udfordrende, hvilket kan skyldes en lav stabilitet af det dannede fluor-substituerede metalborhydrid, der vil dekomponere indenfor en begrænset tidsperiode efter dannelse. Derudover er fluor substituerede forbindelser ofte røntgen-amorfe. Substitutionen er dog observeret for $\text{NaBH}_4\text{-NaBF}_4$ med *in situ* synkrotron stråle pulver røntgen diffraktion (SR-PXD) og ^{19}F magic angle spinning nuclear magnetic resonance (MAS NMR). Dekomponeringsegenskaberne forandres betydeligt ved fluor-substitution for alle undersøgte blandinger af $\text{MBH}_4\text{-MBF}_4$ ($\text{M} = \text{Li, Na, Ca}$). Dekomponeringstemperaturen for LiBH_4 reduceres fra en temperatur >410 til $\sim 100^\circ\text{C}$ ved addition af LiBF_4 . Afhængigt af prøvens komposition prøven kan en gasafgivelse domineret af H_2 opnås. Dog observeres oftest en blanding af B_2H_6 , BF_3 og H_2 under dekomponering af de fluor-substituerede prøver.

De foreløbige resultater i undersøgelserne af kombineret anion- og kation-substitution i ammoniumborhydrid, NH_4BH_4 , undersøges med blandingerne $\text{MBH}_4\text{-NH}_4\text{X}$, hvilket resulterer i et antal nye forbindelser. Dekomponeringsprodukterne er en blanding af NH_3 og H_2 .

B. Teknovidenskabelighed: teori- og metodevalg

For de afhandlinger, jeg har identificeret som teknovidenskabelige, har jeg opstillet en tabel, der viser hvilken teori og teknik, der beskrives i afhandlingens teori- og metodeafsnit. Tabellerne bruges i analysen af former for integration, kapitel 5, til at afgøre, om de teknovidenskabelige afhandlinger inddrager teori og metode fra forskellige discipliner. De anførte sidetal angiver den side i ph.d.-afhandlingen, hvor den pågældende teori og teknik beskrives første gang.

B.1 Afhandlingen om orientering af molekyler via lasersystemer

Imaging Molecular Frame Dynamics – using spatially oriented molecules (Hansen, 2012)	
Indgående teorier	Anvendt teknik
Molecular wave function (s. 9) (Usikkerhedsprincippet, Hamilton-operatoren) laserstråling (s. 10) (Bølgefunktion, laserinduced potential) Alignment (s.11) (skitse over field-free states, induced interaction potential, delta-kick Model) Electrostatic deflection (s. 19) (quantum state selection) Den fotoelektriske effekt (s. 21) Strong-field Ionization (s. 23) (Keldysh parameter, Coulomb potential)	Photoelectron Spectroscopy (PES) (s. 21): Er baseret på den fotoelektriske effekt. Femtosekund lasersystem og nanosekund lasersystem (s. 27) Molecular beam apparatus (s.34): Består af tre vakuumkamre, hvoraf target chamber indeholder et Velocity map imaging spectrometer. Data opsamlet af CCD kamera behandles i et computerprogram udviklet i gruppen (s.38) Oscilloscope Trace Acquisition (s. 38): Time of flight målinger måles til at sikre tilstedeværelse og renhed af target-molekyle

B.2 Afhandlingen om nanoconfinement af hydrider

Nanoconfined Hydrides for Energy Storage (Nielsen, 2012)	
Indgående teorier	Anvendt teknik
Hydrogenopbevaring (s. 1) (gravimetric energy capacity, volumetric hydrogen capacity, hydrogen densities, hydrogen release temperatures, hydrogenation, dehydrogenation og reaktionsskemaer herfor) Nanoconfinement (s. 9)(termodynamiske og kinetiske forbedringer, nanoegenskaber) Scaffold (s. 10)(nanoporous materials, pH, reaktionsskema for RF-gel)	Sieverts metode (s. 28): Populær til måling af adsorption/desorption ved højt tryk. Thermal desorption Spectroscopy (TDS) (s. 28): Metode til at observere desorberede molekyler fra overoverflade under temperaturstigning, gør brug af massespektrometri. Thermogravimetric analysis TGA (s. 29): Termisk analyse, der måler massetab under opvarmning. Differential Scanning calometry (s. 29): Termisk analyse til bestemmelse af entalpiændringer. Scanning electron microscopy SEM (s. 31): Producerer billeder ved at scanne prøve med fokuseret stråle af elektroner, som interagerer med atomer i prøven. Gas sorption analyse (s.30): Karakteriser overfladeareal i porøst materiale. Energy Dispersive Spectroscopy (s. 31): Analyseteknik der bruges i forbindelse med SEM til at karakterisere strukturen af prøvens midte. Synchrotron Radiation Powder X-ray Diffraction (in situ SR-PXD) (s. 32): Teknik, der bruger x-ray diffraktion på pulver til at bestemme de strukturelle karakteristika. Bruges i mange videnskaber til strukturbestemmelser. Rietveld Method (s. 34): En teknik der bruges til at håndtere diffraktionsmønstre vha. mindste kvadraters metode til at forfine og en teoretisk diffraktionsprofil indtil den passer til den målte profil. Mas NMR (s.36): Strukturbestemmelse for ordnede systemer, komplimenterer X-ray diffraktion og kan bruges som kemisk fingeraftryk Mechanical Alloying (ball Milling) (s.38): Pulveriserer partikler i en højenergi-ball mill.

B.3 Afhandlingen om nanopartikelsyntese

6. Nucleation, Growth and Morphology of Nanoparticles (Eltzholtz, 2012)	
Indgående teorier	Anvendt teknik
Den superkritiske tilstand (s.3) (fasediagram, densitet, termiske transportegenskaber, opløselighed, dielektrisitetskonstant, reaktionskinetik, og superkritiske reaktioner) Superkritiske produktionssystemer (s. 11) I beskrivelsen af de anvendte teknikker indgår detaljeret teori om dannelsen af Røntgenstråling og diffraktion (s. 17)	Powder X-ray Diffraction (PXRD) (17): Brugt i denne afhandling til at opnå komplekse strukturinformationer vha. Rietveld Refinement. Bruges i mange videnskaber, der ønsker at strukturbestemme materialer. Rietveld analysis (s.20): Teknik der bruges til at håndtere diffraktionsmønstre vha. mindste kvadraters metode til at forfine og en teoretisk diffraktionsprofil indtil den passer til den målte profil. Transmission electron microscopy (TEM) (s. 21): Billedteknik, der genererer et billede ved at sende elektronstråle igennem ultratynd prøve. Bruges både på biologiske prøver, samt i kemi og fysik.

B.4 Afhandlingen om anionsubstitution i hydrider

Anion Substitution in metal borohydrides (Rude, 2012)	
Indgående teorier	Anvendt teknik
Hydrogenopbevaring (s. 12)(tilstandsformer, volumetric og gravimetric hydrogen densiteter) Metalborohydrider (s.13) (volumetric og gravimetric hydrogendensitet, koordinationsgeometri, ion-radius, strukturbestemmelse og bindingskarakteristik, stabilitet, dekomposition temperatur, reaktionsskema og data på et udvalg af borohydrider). Substitution (s.22) (brintopbevaring, alternativ til nanoconfinement)	Mechanical milling / ball Milling (s. 26): Pulverisering a reaktanter i forbindelse med syntese. Gammel metode. Rietveld Method (s.30): Teknik der bruges til at håndtere diffraktionsmønstre vha. mindste kvadraters metode til at forfine og en teoretisk diffraktionsprofil indtil den passer til den målte profil. Synchrotron Radiation Powder X-ray Diffraction (<i>in situ</i> SR-PXD) (s. 30): Teknik, der bruger x-ray diffraktion på pulver til at bestemme de strukturelle karakteristika. Infrared spektroskopi (s. 31): Molekylær fingeraftryk baseret på bindingsenergi. Giver også info om vibrationelle tilstande. NMR spectroscopy (s. 33): Strukturbestemmelse for ordnede systemer, kompletterer x-ray diffraktion og kan bruges som kemisk fingeraftryk. Differential Scanning calometry (DSC) (s. 34): Termisk analyse til bestemmelse af entalpiændringer. Sieverts metode (s. 35): Populær til måling af adsorption/desorption ved højt tryk. Thermogravimetric analysis (TGA) (s. 34): Termisk analyse, der måler massetab under opvarmning.

Recent RePoSS issues

- #12 (2009-2) **Laura Søvsø Thomassen**: "In Midstream: Literary Structures in Nineteenth-Century Scientific Writings" (Masters thesis)
- #13 (2011-1) **Kristian Danielsen and Laura Søvsø Thomassen (eds.)**: "Fra laboratoriet til det store lærred" (Preprint)
- #14 (2011-2) **Helge Kragh**: "*Quantenspringerei*: Schrödinger vs. Bohr" (Talk)
- #15 (2011-7) **Helge Kragh**: "Conventions and the Order of Nature: Some Historical Perspectives" (Talk)
- #16 (2011-8) **Kristian Peder Moesgaard**: "Lunar Eclipse Astronomy" (Article)
- #17 (2011-12) **Helge Kragh**: "The Periodic Table in a National Context: Denmark, 1880-1923" (Book chapter)
- #18 (2012-1) **Henrik Kragh Sørensen**: "Making philosophy of science relevant for science students" (Talk)
- #19 (2012-8) **Helge Kragh**: "Newtonianism in the Scandinavian Countries, 1690–1790" (Book chapter)
- #20 (2012-9) **Helge Kragh**: "Har Naturvidenskaben en Fremtid?" (Book chapter)
- #21 (2013-6) **Helge Kragh**: "Empty space or ethereal plenum? Early ideas from Aristotle to Einstein" (Article)
- #22 (2014-7) **Helge Kragh**: "Jørgen From (1605–1651): Et Billede fra Dansk Astronomi- og Lærdomshistorie" (Article)
- #23 (2014-8) **Nils Randlev Hundebøl**: "Big ambitions and supercomputing: A case of industry engagement in climate modeling" (Preprint)
- #24 (2014-8) **Julie Louise Hørberg Kristensen**: "Jagten på en god oplevelse i zoologisk have" (Masters thesis)
- #25 (2014-9) **Allan Lyngs Kjærgaard**: "Offentlig støtte til forskning og udvikling i industrien fra 1940'erne til 1990'erne" (Masters thesis)
- #26 (2014-10) **Julie Nørgaard Hostrup**: "Når discipliner mødes: Et casestudie af faglig integration i nanoforskning" (Masters thesis)

This list is up-to-date as of October 5, 2014. The full list of RePoSS issues can be found at www.css.au.dk/reposs.

RePoSS (Research Publications on Science Studies) is a series of electronic publications originating in research done at the Centre for Science Studies, University of Aarhus.

The publications are available from the Centre homepage
(www.css.au.dk/reposs).

ISSN 1903-413X

Centre for Science Studies
University of Aarhus
Ny Munkegade 120, building 1520
DK-8000 Aarhus C
DENMARK
www.css.au.dk



Faculty of Science
Department of Science Studies

AARHUS UNIVERSITET

