Sidste nyt om din branche fra TechMedia

Kemisk Forening - Kemiingeniørgruppen

dansk kemi

Nummer 4 - April 2012 / 93. årgang

Dødelige diatomeer

På jagt efter nye antibiotika

Gåden om diffusion i plast

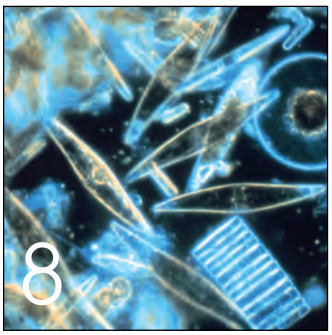
SEND LÆGEHJÆLP NU – STØT MED 150 KR.

Ring nu på 90 540 840 | SMS "MEDICIN" til 1414 | Støt online på msf.dk

Ved at støtte via sms eller telefon accepterer du, at Læger uden Grænser kontakter dig igen. Det koster 150 kr. + almindelig sms-takst. Udbydes af Læger uden Grænser, Kristianiagade 8, 2100 København Ø, tlf. 39775600.

MEDECINS SANS FRONTIERES
LÆGER UDEN GRÆNSER

INDHOLD



1 Forsidebillede: Nogle få diatomeer er giftige. Der findes f.eks. nogle arter, der forårsager opkoncentration af domoinsyre i muslinger. Det kan give amnesisk skaldyrsforgiftning.

8 En marin kiselalge desinficerer sin bopæl effektivt med bromcyan og overlever i modsætning til konkurrenter selv rengøringen.

10 Maria Månsson brænder for naturstofkemi. Hun har netop fået en Ung EliteForsk-pris for sit arbejde med at finde nye, alternative antibiotika.

14 Den anden artikel i en serie om DDT handler om den transport, der sker gennem atmosfæren til polerne og andre steder, hvor det aldrig har været brugt.

17 Kontrol med spildevandet er en forudsætning for kemisk produktion. Miljøkvalitetskrav fastsættes for de enkelte kemiske forbindelser i det rensede spildevand.

20 Chemostaten er et minirensningsanlæg, der kan kontrollere de fysisk-kemiske parametre i forbindelse med spildevandsrensningen.

23 Boganmeldelse af den 3. og reviderede udgave af Bioreaction Engineering Principles.

24 Den svenske "rødfarve" er kendt af de fleste. Læs om historien og jernkemien bag de røde træhuse. Fra helleristninger til kobberminer.

26 Kunstigt fremstillede nanomaterialer kan have egenskaber, der er svære at forudse, hvilket kan medføre konsekvenser for menneskers sundhed.

28 Kort & Godt – Nyt & Navne

29 Det har været en gåde, hvorfor Ficks 2. lov tilsyneladende ikke beskrev diffusion af mindre molekyler som opløsningsmidler, olier og aromastoffer i plast. Læs her hvorfor diffusionsligningen holder.

32 PARAFAC er særlig velegnet til analyse af fluorescens-data, men metoden er også relevant for andre datastrukturer. Her vises, hvordan PARAFAC kan anvendes til at modellere diffusionsvægtede NMR-data med henblik på lipoprotein-profilering af blod.

38 Læs mere om Kemiingeniørgruppens arrangementer.

TechMedia

Naverland 35
2600 Glostrup
Telefon 43 24 26 28
Fax 43 24 26 26

Ledelse:
Adm. dir. Peter Christensen
Direktør Rikke Marott Schelde
Direktør Susanne Eine

Redaktion:
Katrine Meyn (ansvarshavende)
km@techmedia.dk
Docent Carsten Christophersen (redaktør)
carsten@techmedia.dk
Lektor Søren Kiil
sk@kt.dtu.dk
Ph.d. Kristian B. Krogh
kbk@novozymes.com
Professor, seniorforsker Henrik Skov
hsk@dmu.dk

Redaktionskomité:
Professor John Villadsen (formand)
Ole Vesterlund Nielsen (Formand, Kemilærerforeningen)
Civ.ing. Hanne Bach
Professor, dr. scient. Mikael Bols
Professor Morten J. Bjerrum (Kemisk Forening)
Civ.ing. Arne Büchert
Professor Elo Harald Hansen
Cand.scient.
Allan Astrup Jensen
Lektor Palle Waage Jensen
Chefkonsulent Ulla Hansen Telcs (Procesindustriens Brancheforening)
Fagkonsulent i kemi Keld Nielsen
Lektor, dr. phil. Carl Th. Pedersen
Professor Kjeld Schaumburg
Underdirektør
Lars-Erik Kruse Pedersen
Lektor, ph.d. Peter Szabo (Kemiingeniørgruppen)
Professor, forskningschef Lars Wiebe

Redaktionssekretær:
Else Frederiksen
else.f@techmedia.dk

Annoncer:
Annie Overgaard, Tlf. 43 24 26 93
ao@techmedia.dk

Annonceproduktion:
Anni Jensen, Tlf. 43 24 26 96
aj@techmedia.dk

Hjemmeside:
www.danskkemi.dk

Abonnement:
Kasper Nielsen, Tlf. 43 24 26 91
e-mail: kn@techmedia.dk
Ring vedr. abonnement eller bestil direkte på shop.techmedia.dk under Fagblade

Scan og hent Dansk Kemi's medieinformation 2012 hér!

Brug for scanner? Send en sms til 1220 med ordet "scan" og få scanlife som app.

Layout: Susanne Amby

Tryk: KLS Grafisk Hus A/S

Trykt på miljøvenligt papir med vegetabilske miljøfarver.

Oplag: 5.600
Ekspl. heraf 5.103 i betalt abonnement.
Online Læsere: 1.257

Grønt kontor 2009-2011 og modtager af Albertslund Kommunes Grønne Initiativpris 2009.

Citater fra artikler i Dansk Kemi skal ske med tydelig kildeangivelse. Enhver form for gengivelse af artikler, herunder illustrationer, forudsætter udgiverens skriftlige tilladelse.
Redaktionen kan ikke påtage sig ansvaret for materiale, der indsendes uopfordret.

ISSN 0011- 6335

UK: Huson European Media -
Tel.: (+44) 1932-564999
USA, New York: Huson International Media
Tel.: +1 212 268 3344
USA, California: Huson INternational Media
Tel.: +1 408 879 6666
Germany: Huson International Media
Tel.: (+49) 89-9500-2778

DET SUNDHEDSVIDENSKABELIGE FAKULTET
KØBENHAVNS UNIVERSITET

Kemiker i lægemiddel-industrien?

School of Pharmaceutical Sciences (tidl. Det Farmaceutiske Fakultet) tilbyder forskningsbaseret efteruddannelse på lægemiddelområdet. 2012 byder på en lang række spændende kursusforløb, der sparker nye døre ind på arbejdsmarkedet.

Kursustitel	Varighed
Non-clinical Safety and Toxicology	7. - 11. maj
Clinical Evaluation of Drug Products	21. - 25. maj
Biopharmaceuticals - Pharmaceutical Development and Safety Assessment	13. - 17. august
Quality by Design (QbD) in Pharmaceutical Development Nyt!	13. - 17. august
Drug Regulatory Affairs in Drug Development	1. - 5. oktober
Drug Formulation and Delivery	12. - 16. november

Tilmeld dig elektronisk kursuskatalog på **farma.ku.dk/kursuskatalog**
eller gå direkte til information om indhold og tilmelding på **farma.ku.dk/kurser**

Master of Industrial Drug Development

School of Pharmaceutical Sciences udbyder også en hel masteruddannelse for dig, som har mod på mere.

Master of Industrial Drug Development (MIND)

- Giver dig indsigt i alle lægemiddeludviklingens faser fra discovery til klinisk afprøvning og registrering.
- Giver dig kompetencer på kandidatniveau.
- Er målrettet erhvervsaktive med mindst to års relevant erhvervs erfaring med lægemiddeludvikling.
- Foregår i intensive moduler – typisk af en uges varighed.
- Foregår på engelsk med studerende og undervisere fra dansk og europæisk lægemiddelforskning og -industri.

Optagelse på uddannelsen sker løbende.

Besøg **farma.ku.dk/mind** eller kontakt **master@farma.ku.dk** for yderligere information

LEDER

Imprægneringsmidler i fokus

> Norden er førende i forskning om skadelige fluorstoffer

I den sidste tid har perfluoralkylforbindelser (PFAS) være meget omtalt. Det er meget stabile og overfladeaktive stoffer. I sprayprodukter bruges de bl.a. til imprægnering af tøj, tæpper og møbler. En vigtig og nyttig anvendelse er også i brandslukningsmidler til oliebrande, f.eks. i lufthavne og på olieplatforme. Anvendelsen har dog givet anledning til mange forureningsproblemer rundt om disse anlæg.

Den mest omtalte anvendelse i øjeblikket er brugen i papir/papindpakning til fødevarer. Her bruges det til at forhindre, at fugt eller fedt misfarver eller trænger igennem indpakningen. Til gengæld kan fluorstofferne migrere over i fødevaren. Et af de mest omtalte produkter er færdigpakker til at lave popcorn i mikroovnen. Den høje temperatur, betyder at en større del af fluorstofferne ender i de færdige popcorn. Dette er vist af Xenia Trier fra DTU-Food/KU-Life i hendes glimrende ph.d.-afhandling fra sidste år.

Producenterne har ikke været klar over problemet og har overholdt lovgivningen, som endnu ikke omfatter disse fluorstoffer, men fødevaremyndighederne har intensiveret kontrollen, så det varer nok ikke så længe, før de fleste danske producenter har stoppet brugen. Dog er en ny EU-lovgivning nødvendig, før vi helt slipper for disse stoffer i fødevareemballage. Selvom der findes alternative stoffer, også til popcornposer.

Disse stoffers nyttige fysiske egenskaber er også baggrunden for, at de er sundheds- og miljøskadelige. Stofferne nedbrydes ikke i affaldsforbrændingsanlæg, i spildevandsanlæg eller i naturen. De akkumuleres i aske, slam, jord, sediment, dyr og mennesker. De spredes og transporteres med luft og havstrømme til afsides egne som Svalbard og Grønland, hvor man finder de højeste koncentrationer i isbjørnelever. I mennesker sker akkumuleringen også bundet til proteiner i blodrige organer som lever, nyrer og milt. Fluorstofferne er ikke lipophile og i modsætning til de fleste andre persistente miljøgifte ophobes de ikke specielt i fedtvævet. Udskillelsen er minimal, og halveringstiden i blodet er mange år. Halveringstiden i organerne kendes ikke, men er formodentlig endnu længere.

Udsættelsen for disse stoffer begyndte for ca. 25 år siden, og det er først nu, vi begynder at konstatere skadelige effekter. Meget omtalt har været effekten på børnevaccination på Færøerne, desuden mulighed for hormon- og adfærdsforstyrrelser, fedme, nyreskader og kræft. Mekanismen ser ud til at være en binding til proteiner i cellemembranerne, der ændrer membranernes egenskaber. Cellerne får en ”regnfrakke” på!

Forskere i Norden er internationalt førende i forskningen om disse stoffer. Derfor støtter Nordforsk et netværk ”Nordfluor” bestående af 23 forskningsinstitutioner, der startede sidste år. Den 4. juni 2012 afholder netværket et seminar i Turku, Finland, i forbindelse med det nordiske miljøkemikermøde (NECC2012) 4-7. juni.[1)]

Allan Astrup Jensen, allan.astrup.jensen@gmail.com

[1)] http://www.necc2012.fi/index.php/2011-06-09-07-41-42/nordfluor-seminar.

Kärcher kan optimere din rengøring – så du både sparer vand, strøm og kemi.

Ring og hør mere om sublim tysk ingeniørkunst til attraktive priser.

Gulvvasker

B 60 W BP Pack Classic + R 55

- Arbejdsbredde: 550 mm
- Sugebredde: 850 mm
- Kapacitet: 2200 m²
- Tank rent / snavset vand: 60 / 60 l

Kampagnepris kr. 49.995,-

Vejl. pris kr. 84.995,-
Leasingydelse md. / 36 mdr. kr. 1.601,-

Fejemaskine

KM 75/40 B

- Drift: HONDA motor
- Kapacitet: 3375 m²/t
- Arbejdsbredde m. 1 sidekost: 750 mm
- Container: 40 l

Kampagnepris kr. 22.695,-

Vejl. pris kr. 33.695,-
Leasingydelse md. / 36 mdr. kr. 749,-

Våd- / tørsuger

NT 65/2 Tact²

- Luftgennemstrømning: 2 x 74 l/sek.
- Vakuum: 230 mbar
- Kapacitet: 65 l
- Effekt: 2760 W

Kampagnepris kr. 6.195,-

Vejl. pris kr. 9.195,-

Vidste du det? Kärcher er verdens største leverandør af rengøringsmaskiner med mere end 75 års erfaring på markedet. Vi har over 400 verdenspatenter, skabt med det ene formål at spare tid og penge for dig. Alle maskiner bliver livstidstestet på eget test-center, så du kan stole på kvaliteten. Desuden kan vi rådgive dig, så du optimerer din rengøring – og samtidig sparer både vand, strøm og kemi. **Ved leasing:** Hvis du vil lease over 36 måneder er oprettelsesgebyret kr. 1.000,-. Restværdi 10% og variabel rente.

KÄRCHER®

makes a difference

Tlf. 70 20 66 67 · www.karcher.dk

Priser er ekskl. moms.

To nye grundstoffer skal have navne

IUPAC udsender fra tid til anden anbefalinger vedrørende nomenklatur, terminologi og symbolbrug. Der fremkommer altid et udkast til kommentering i offentligheden, før man færdigbehandler dokumenterne i IUPAC. Det sker for ofte til, at det er muligt eller rimeligt at gøre opmærksom på det hver gang her i bladet. I stedet kan man følge med på IUPAC's hjemmeside (www.iupac.org), hvor alle udkast til kommentering bringes løbende.

Når nye grundstoffer skal døbes, har det altid haft en særlig bevågenhed, så vi gør lige en undtagelse, for nu er det tid til det igen.

Som allerede omtalt i *Dansk Kemi*s oktobernummer sidste år har den fælles arbejdsgruppe mellem IUPAC og fysikernes søsterorganisation IUPAP gransket og anerkendt dokumentationen for observation af grundstofferne med atomnumre 114 og 116, som indtil videre har haft de foreløbige kunstnavne (og atomsymboler) ununquadium (Uuq) og ununhexium (Uuh).

Opdagerne har nu fået lov til at foreslå definitive navne og atomsymboler. Forslagene er flerovium, Fl, for Uuq og livermorium, Lv, for Uuh. De nærmere begrundelser for disse forslag kan ses på nævnte hjemmeside, og fristen for indsendelse af kommentarer til dem er 30. april 2012.

Ture Damhus,
Kemisk Forenings Nomenklaturudvalg
tda@novozymes.com

Ph.d.-pris i Organisk Kemi

Ved Kemisk Forenings Årsmøde i Odense vil Sektionen for Organisk Kemi uddele en pris til årets bedste ph.d.-afhandling inden for organisk kemi. Prisen er på 5.000 kr.

For at komme i betragtning, skal ph.d.-graden være opnået i perioden 1. maj sidste år til 30. april i år. Ydermere skal Bestyrelsen for Sektionen for Organisk Kemi modtage en indstilling fra ph.d.-vejlederen inden 10. maj i år. Indstillingen skal være på maks. 1 side og være ledsaget af ph.d.-bedømmelsesudvalgets vurdering af afhandlingen samt en liste over publikationer afledt af ph.d.-studiet.

Prisen bliver overrakt på Årsmødet i Odense, hvorefter modtageren af prisen forventes at holde et foredrag om det tilgrundliggende arbejde.

Indstillingerne bedes sendt til: Mads H. Clausen, DTU Kemi, Kemitorvet 201, 2800 Kgs. Lyngby

Mads H. Clausen, mhc@kemi.dtu.dk

Velkommen til The Copenhagen Chemometric Session

Institut for Fødevarevidenskab har udnævnt Lars Nørgaard til adjungeret professor i kemometri. I den anledning vil han holde sin forelæsning med titlen:

"Chemometrics - exploration and solution of complex challenges in research and development" sammen med professor Tormod Næs som vil holde en forelæsning inden for:

"What has chemometrics taught me? Confessions from a statistician" og professor Harald Martens som vil give en æresforelæsning inden for:

"Chemometrics in applied mathematics: multivariate metamodelling"

Kollegaer og partnere er hermed inviteret til en reception efter forelæsningerne i Marmorhallen, Thorvaldsensvej 40 torsdag den 26. april 2012 fra kl. 13:00–16:00 i A2-70.04 (3.14).

Såfremt du ønsker at deltage, bedes du sende en mail til Jeanette på jvh@life.ku.dk senest 20. april.

Institutleder Bjarke Bak Christensen
og professor Søren Balling Engelsen

Ny mulighed for bekæmpelse af sejlivede bakterier

I tilslutning til vor artikel, "Mikrobejægere – hvordan udryddes sejlivede bakterier" (Dansk Kemi, nr. 3, 2012), skal vi her gøre opmærksom på en helt ny opdagelse, som kan få betydning for bekæmpelsen af multiresistente bakterier.

Som omtalt i artiklen kan resistensudviklingen, hvor bakterier bliver modstandsdygtige over for vore traditionelle antibiotika, bero på forskellige mekanismer. Den mest kendte er bakteriernes evne til at producere forskellige beta-laktamaser, der nedbryder vore antibiotika således, at de mister deres antibiotiske effekt. En anden resistensmekanisme er bakteriens evne til at udvikle effluxpumper, der effektivt pumper antibiotika ud, så snart det er trængt ind i bakterien. Begge mekanismer resulterer i, at vore traditionelle antibiotika bliver ubrugelige i infektionsbehandlingen.

Den nye opdagelse satser på, at hæmme effluxpumpen så effektivt, at bakterien ikke formår at udpumpe sit indhold af antibiotika. Hermed vil infektioner med disse multiresistente bakterier kunne behandles med vore traditionelle antibiotika, når behandlingen suppleres med en pumpehæmmer. Denne mulighed synes nu at foreligge. Det er studiet af indianernes behandling af sårinfektioner med bladene fra en chilensk regnskovsplante, en avokadoart (*Persea*-familien), der har ført til isolering af et stof, som har vist sig at være en effektiv pumpehæmmer. Undersøgelserne, der fokuserer på de sejlivede gule stafylokokker (*Staphylococcus aureus*), er nu offentliggjort af *J. G. Holler et al*. i *J Antimicrob Chemother* doi:10.1093/jac/dks005.

Svend Norn, ksnorn@post.cybercity.dk
Poul R. Kruse, pk@dfhf.dk

Kilde: Dansk Farmacihistorisk Samling www.dfhf.dk

Thermo SCIENTIFIC

Dramatically different ICP-MS

Experience dramatic differences in performance and ease-of-use with the all-new **Thermo Scientific iCAP Q ICP-MS**. For any application, class-leading sensitivity is achieved with revolutionary QCell flatapole technology, while single mode analysis and enhanced throughput can slash up to 50% off your total analysis time. One click set-up makes any user feel like an expert and a radical space-saving, easy-access design makes the iCAP Q extremely efficient to install and maintain in any laboratory. Another innovation in ICP-MS, ICP-OES and AA solutions.

for trace elemental analysis

• experience the difference • thermoscientific.com/dramatic

• For more information: +45 70 23 62 60, analyze.dk@thermo.com

• Thermo Fisher Scientific, Stamholmen 193, 2650 Hvidovre

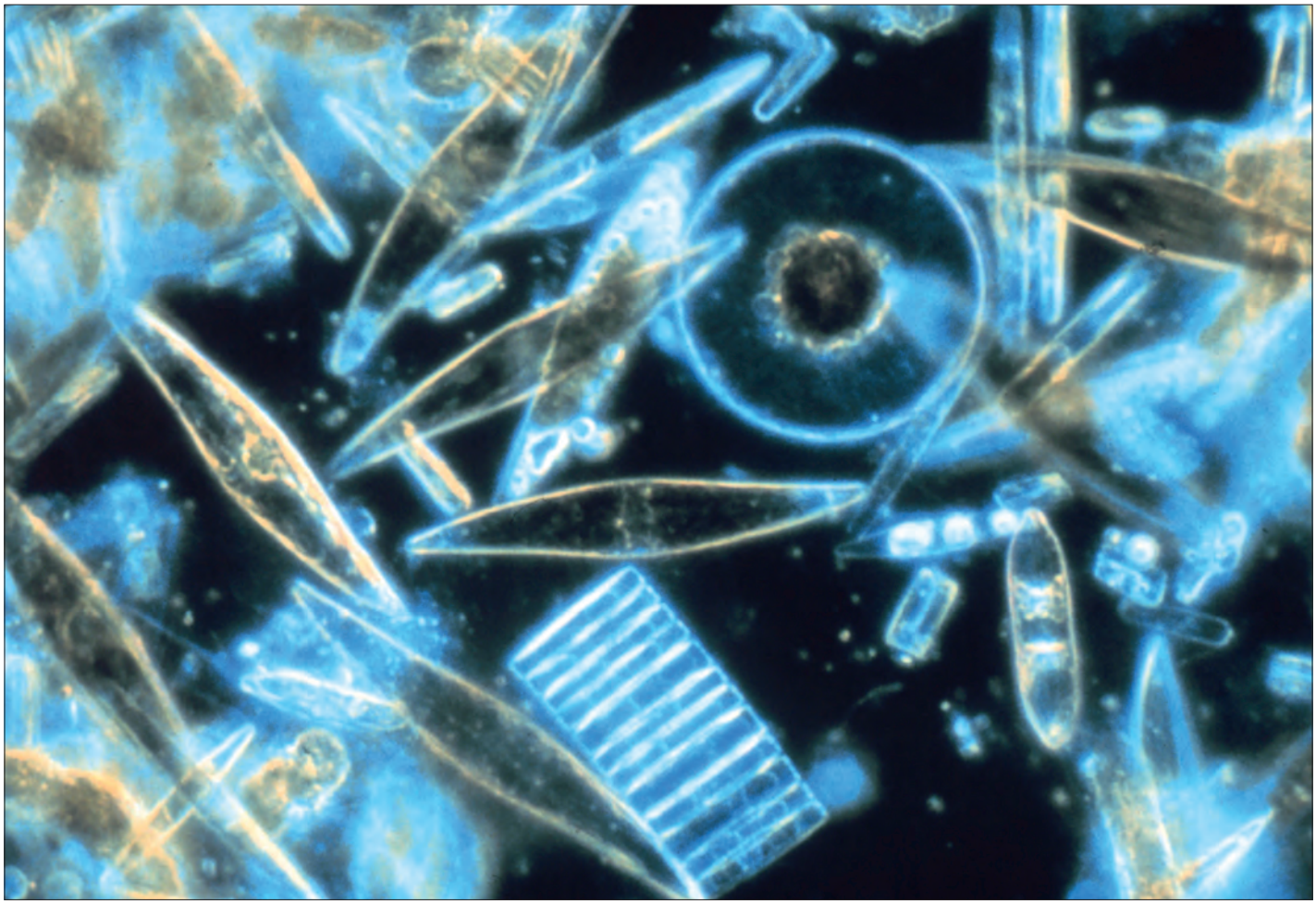
© 2012 Thermo Fisher Scientific Inc. All rights reserved.

iCE 3000 Series AA
Innovative design for ease of use with flame and furnace AA technology

iCAP 6000 Series ICP-OES
Reliable, routine multi-element analysis with the best performing ICP-OES

iCAP Q ICP-MS
Delivering performance, productivity and reliability through advanced design

ELEMENT 2 HR-ICP-MS
High resolution ICP-MS for the most demanding of applications



Dødelige diatomeer

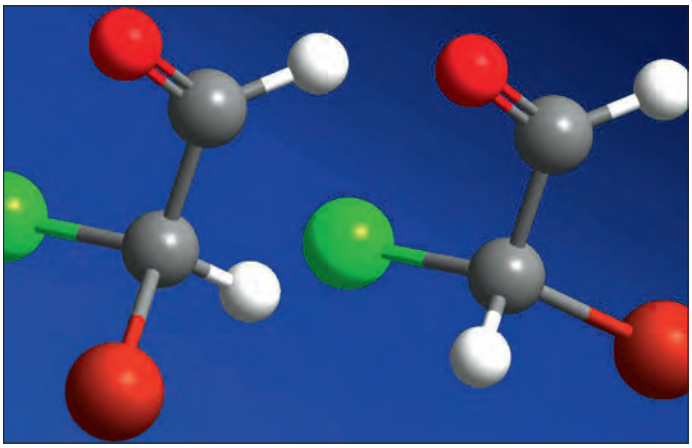
En marin kiselalge desinficerer sin bopæl effektivt med bromcyan og overlever i modsætning til konkurrenter selv rengøringen.

Af Carsten Christophersen, carsten@techmedia.dk

Under 1. Verdenskrig blev bromcyan eller cyanogenbromid (BrCN) forsøgt anvendt som krigsgas, men uden tilfredsstillende resultat. Kiselalgen *Nitzschia cf pellucida* har langt større succes med at bruge BrCN til at rense overflader for konkurrenter. BrCN virker nemlig langt bedre end de begroningshæmmende midler, der tilsættes skibsmaling. Problemet er, at det er alt for giftigt og reaktivt til at have en fremtid inden for dette område.

Bromcyan fra morgen til aften

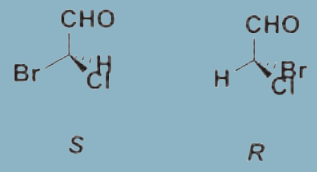
Når morgenens første lysstråler rammer algen, begynder den at udsende BrCN, og det bliver den ved med, indtil mørket sænker sig. Omkring algen opbygges en beskyttelseszone med giftstoffet. Allerede ved en koncentration på 2 µM BrCN dør 93% af diatomeen *Entomoneis paludosa* i løbet af 3 timer. *N. pellucida* selv tåler 16 µM uden problemer og viser først nedsættelse



af væksthastighed og fotosyntese ved 32 µM. Bakterier tåler behandlingen.

Bromcyan – cyanogenbromid – BrCN

Hvor utroligt det end lyder, så eksisterer det superreaktive bromcyan i naturen. I laboratoriet håndteres det under store sikkerhedsforanstaltninger, fordi det både er meget giftigt og meget lumskt. Det har et højt damptryk, og smeltepunktet 52°C er nær kogepunktet 61,4°C. Det hydrolyserer i vand til hydrogenbromid (HBr) og cyansyre (HOCN) og ikke som fejlagtigt antaget i megen litteratur hydrogencyanid (HCN).



Bromchloracetaldehyd kan eksistere i to spejlbilledisomere former *R* og *S*.

Kiselalger er udbredte

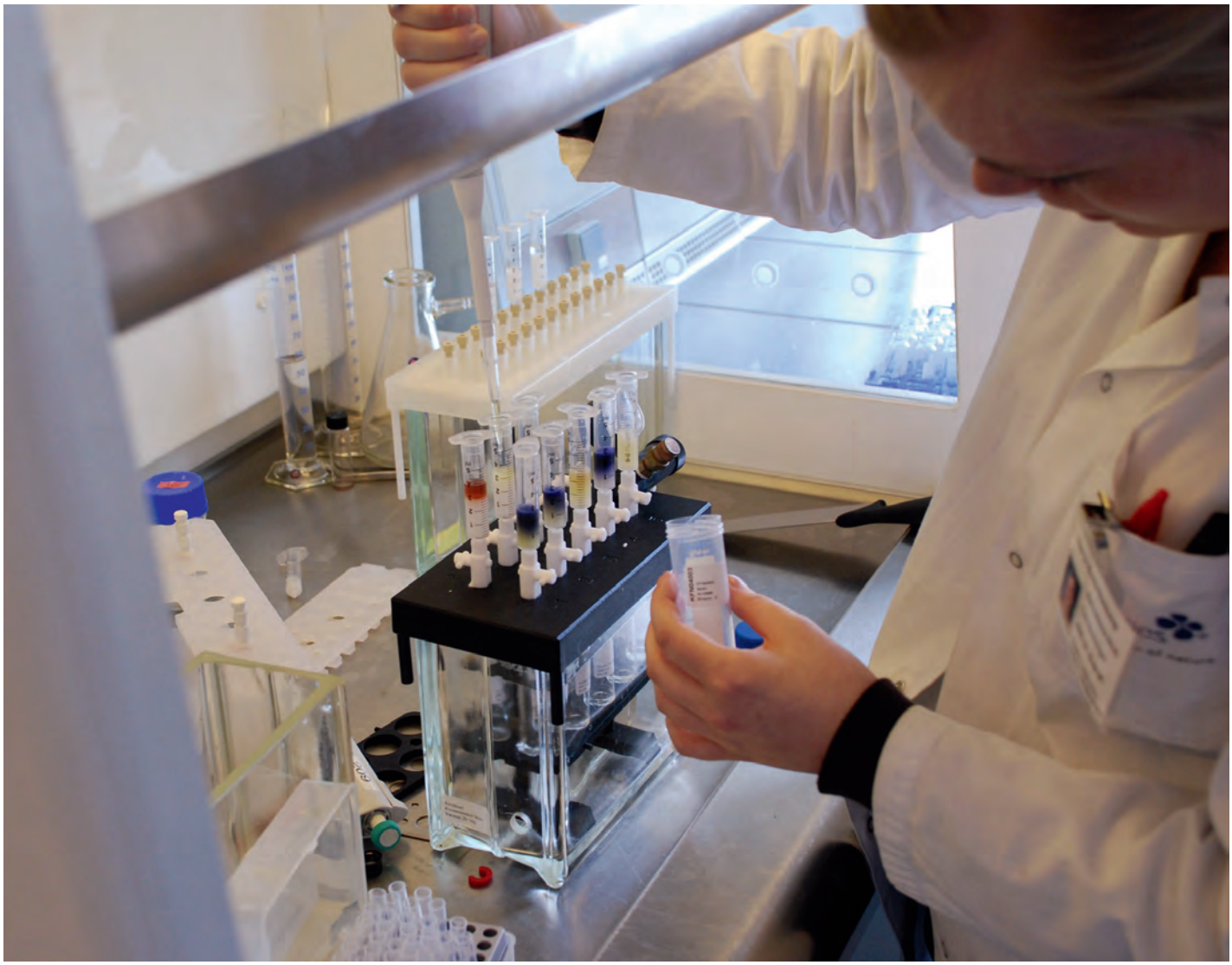
Diatomeer eller kiselalger er en dominerende bestanddel af havets planteplankton, men findes også udbredt i ferskvand og i fugtig jord. De mikroskopiske encellede alger er opbygget af to kiselskaller, en bund og et låg som en kageæske. Nogle få er giftige, f.eks. *Pseudo-nitzschia*-arter, hvor indhold af domoinsyre opkoncentreret i muslinger er skyld i amnesisk skaldyrsforgiftning, som kan give offeret hukommelsestab og kan medføre døden.

Halogenforbindelser

Nitzscia-arter har gjort sig bemærket ved produktion af simple halogenerede forbindelser, men *N. pellucida* er bemærkelsesværdig ved at udsende mindst 16 forskellige halogenerede alkaner og acetaldehyder. De fleste indeholder enten brom eller iod, CH_3Br, CH_3I, CH_2Br_2, CH_2I_2, CH_2BrI, $CHBr_3$, CHI_3, $CHBr_2I$, $CH_3CH_2CH_2I$ og $Br_2CH\text{-}CHO$. Men blandingen indeholder også chlorforbindelser CH_2ClI, $CHBr_2Cl$, $CHClI_2$, $BrClCH\text{-}CHO$, $ClBr_2C\text{-}CHO$ og $ClCH_2\text{-}CH_2Cl$. Ingen af forbindelserne er dog tilnærmelsesvis så effektive som BrCN. $BrClCH\text{-}CHO$ har et asymmetrisk carbonatom og eksisterer derfor i to spejlbilledisomere former, *R* og *S*. Hvorvidt algen syntetiserer en ren optisk isomer eller en racemisk blanding er ukendt.

Når algen dyrkes i iodidholdig næringsvæske, producerer den hovedsageligt iodforbindelser inkl. cyanogeniodid (ICN), der gør mediet endnu mere giftigt.

Kilde
Daily burst of biogenic cyanogens bromide (BrCN) control biofilm formation around a marine benthic diatom B, Vanelslander, C. Paul, J. Grueneberg, E. K. Prince, J. Gillard, K. Sabbe, G. Pohnert og W. Vyverman. *PNAS* 2012, doi:10.1073/pnas.11080662109.



På jagt efter nye antibiotika

Maria Månsson brænder for naturstofkemi. Hun har netop fået en Ung EliteForsk-pris for sit arbejde med at finde nye, alternative antibiotika. Pengene skal bl.a. bruges til at udvikle en ny analytisk metode, der kan optimere screeningen af lovende lægemiddelkandidater.

Katrine Meyn, km@techmedia.dk

Maria Månssons fascination af naturstofkemi har næsten altid været der.

- Jeg elsker naturens kemiske mangfoldighed, der ofte overgår fantasien. Og så elsker jeg blandingen af spændende detektivarbejde og udfordrende analysearbejde, der, hvis man er heldig, giver et indblik i naturens hemmelige verden, forklarer hun.

Det startede med lakridsrod

Et afgørende tidspunkt for Maria Månsson var et tredages praktikophold i 3. g.

For at få styr på organisk kemi søgte hun ind på Det Farmaceutiske Universitet (nu KU-Farma). Hun endte hos Søren Brøgger Christensen, der undersøgte en sammenhæng mellem forekomst af malaria og nogle aktive indholdsstoffer i lakridsrod kaldet chalconer. Hun fik opgaven at fremstille mere aktive analoger af chalconerne.

"Det er godt, at man på universiteterne er ved at råde bod på års forsømmelse af naturstofkemi som kilde til antibiotika".

- Jeg var dybt fascineret af arbejdet med meget små mængder stof med så stor effekt, og da Søren ringede til mig og fortalte, at de analoger jeg havde lavet virkede, så var jeg helt solgt, fortæller hun.

En skræddersyet uddannelse

Efter gymnasiet vælger Maria at læse videre på DTU. Her kan hun lettest tilpasse uddannelsen, så den svarer til hendes interesser. Bachelorprojekt og speciale laver hun inden for naturstofkemi, sidstnævnte hos Thomas Ostenfeldt Larsen på DTU Systembiologi. Han forsker i naturstofkemi fra skimmelsvampe og andre mikroorganismer.

- Jeg er så heldig, at mit speciale falder sammen med Galathea-ekspeditionen, hvor jeg får mulighed for at følge indsamlingen af mikroorganismer fra hele verden. Hjemme fra Danmark kunne jeg få lov til at undersøge de mange bakterier for deres kemiske potentiale og aktive indholdsstoffer, siger hun.

Udvikling af E-SPE-metoden

I sit ph.d.-projekt fortsætter Maria Månsson arbejdet med de mere end 1000 forskellige gramnegative bakterier. Nu starter et stort samarbejdsprojekt med fokus på at finde alternative antibiotika (finansieret af Det Strategiske Forskningsråd: Programkomiteen om Fødevarer og Sundhed). DTU-Food (under Lone Gram som projektleder) og Københavns Universitet (Hanne Ingmer og Hanne Frøkiær ved KU-Life og Michael Givskov ved KU-Health) deltager. Maria Månsson er kemikeren i midten mellem de forskellige grupper, der repræsenterer mikrobio-

Priser:
Individuelt postdoc-stipendie (november 2011) fra det Frie Forskningsråd for Teknologi og Produktion "Ecology-driven drug discovery: a novel approach for enhancing chemical diversity from marine bacteria" (2.968.230 kr.).

Sapere Aude "DFF-Ung eliteforsker" (december 2011) fra Forskningsrådet (962.365 kr.).

"Det er et faktum, at naturen er den bedste kemiker".

loger og molekylærbiologer med speciale i dyrkning af marine bakterier og antibakterielle aktiviteter.

Hun bruger især lang tid på at udvikle en analytisk metode til at prioritere kemiske ekstrakter ud fra kriterier om biologisk aktivitet og "strukturel nyhedsværdi". Metoden hedder E-SPE: Explorative Solid-Phase Extraction, baseret på komparative analyser i meget lille skala fra kromatografi, massespektrometri og biologiske assays. Med metoden kan man med det samme se, om bakterien producerer stoffer, der er nye eller kendte, og hvilke stoffer, der giver biologisk aktivitet. Herefter kan bakterierne hurtigt prioriteres til videre arbejde og opskalering.

De sorte får

Historisk set har gramnegative bakterier ikke været i høj kurs hos naturstofkemikerne. Man har ikke ment, at de har generne til at producere nogle spændende stoffer, og gør de det endelig, så er det i så små mængder, at det er svært at udnytte.

- Men vi blev positivt overraskede over, hvad de gemte på af muligheder, fortæller Maria Månsson.

- Det viste sig at være meget brugbart at have så stor en samling bakterier, at vi kunne kortlægge kemodiversiteten inden for en art. Det var en spændende udfordring, og vi måtte være gode kemikere for at finde de stoffer, der var. Vi skulle været meget systematiske og måtte bruge meget følsomme analysemetoder for at finde de rigtige bakterier at arbejde med, forklarer hun.

I laboratoriet forkæles mikroorganismer typisk med en masse god næring, men disse betingelser ligger ofte langt fra deres naturlige miljø og er måske med til at gøre dem for "dovne" til at producere deres antibiotika. Derfor begyndte Maria i samarbejde med DTU-Food at undersøge hvilke stoffer, der produceres, når bakterierne gror på substrater såsom alger og tang (der minder om dem, de lever af i naturen).

- Et eksempel er *Vibrio*-bakterier, der, når de får kitin (havets cellulose) som substrat, pludselig overudtrykker nogle af de stoffer, vi virkelig er interesseret i, siger hun.

Til gengæld giver brugen af alternative substrater nye udfordringer for kemikeren. F.eks. vil en alge selv producere masser af naturstoffer, og det er et stort opklaringsarbejde at finde ud af, hvilke stoffer bakterien har produceret, og hvilke der er baggrund fra algen. En anden udfordring er at få nok stof. Der er brug for ca. ½-1 mg til strukturopklaring af et nyt stof. Og at få det på et naturligt substrat er meget svært, da stofferne ofte er meget potente og til stede i ekstremt små mængder. Så det giver nogle praktiske udfordringer i forhold til dyrkning og håndtering af bakteriekulturerne.

Udvikling af screeningssystem

Maria Månsson har bl.a. fået midler til at udvikle et screeningssystem, der systematisk og hurtigt kan screene og prioritere, hvilke bakterier der får et boost af at være på de forskellige substrater.

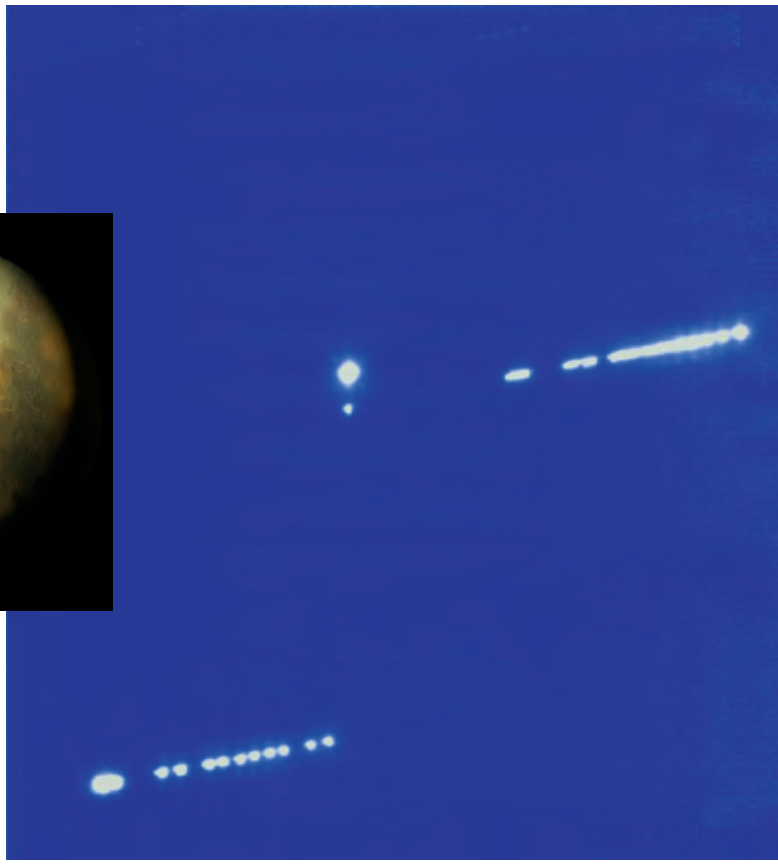
Hun samarbejder bl.a. med forskere på Scripps Institution of Oceanography, San Diego, der har et af de største marinkemiinstitutter i verden. De har et avanceret instrument, der kan følge, hvilke stoffer der produceres, mens bakterierne gror. Princippet er baseret på massespektrometrisk billeddannelse, hvor stoffer kan analyseres direkte fra en overflade ved hjælp af en nanokapillær (nano-desorption electrospray ionisation).

- Jeg har en ide om at udvikle en slags chip, hvor vi kan sammenligne produktionen af stoffer på mange forskellige substrater på én gang, lidt ligesom i en lagkage. Når bakterierne gror på chippen, scanner vi overfladen for stoffer, og med passende algoritmer kan vi hurtigt udpege, hvor der dukker nye stoffer op. Og på den måde kan vi hurtigt screene mange stammer, fortæller hun.

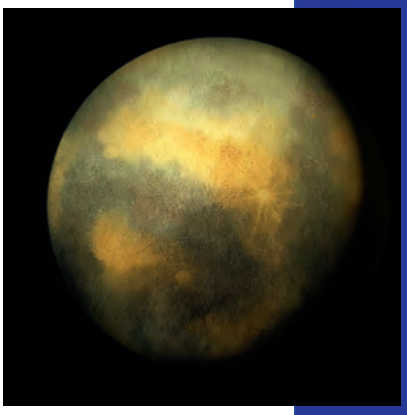
Første trin er at tage til USA og lære instrumentet bedre at kende, og som gravid postdoc med spændende ideer er der nok at tage fat på de næste år.

Og Maria Månsson har da også planer om at invitere verdens førende forsker inden for marinkemi som gæsteforsker på DTU og at afholde et symposium i marin mikrobiel bioteknologi, hvilket skal være med til at skabe et netværk, der kan tiltrække masser af nye forskere og dygtige studerende.

Nyt om….
….Plutos organiske overfrakke



På overfladen af Pluto ligger et dække af carbonhydrider og/eller nitriler. Det er konklusionen på nye højtopløste UV-reflektansspektre målt med Hubble Space Telescope Cosmic Origins Spectrograph. Kraftig absorption mellem 2100 og 2400 Å stammer fra de organiske molekyler. De antages dannet ved fotokemiske reaktioner og/eller radiolyse af methan, carbonmonoxid og nitrogen på Plutos overflade. Målingerne er så nøjagtigt lokaliseret, at absorptioner fra månen Charon kan adskilles. På Charon var det dog ikke muligt at måle disse absorptioner. I juli 2015 passerer rumsonden "Horizons" Pluto, og så bliver der mulighed for bedre observationer.



Carsten Christophersen

First ultraviolet reflectance spectra of Pluto and Charon by the *HUBBLE SPACE TELESCOPE COSMIC ORIGINS* SPECTROGRAPH: Detection of absorption features and evidence for temporal change. S. A. Stern, N. J. Cunningham, M. J. Hain, J. R. Spencer og A. Shinn. *The Astronomical Journal* 2012, 143:22.. doi:10.1088/0004-6256/143//1/22

Den anden artikel i en serie om DDT

Foto: Karin Frykman

DDT – spredes over hele jorden

Når DDT bruges i bekæmpelsen af malaria, bliver det transporteret gennem atmosfæren til polerne og andre steder, hvor det aldrig har været brugt.

Af Maria Kjeldstrup Christensen[1], Julie Dam Larsen[2], Tina Mønster[2] og Anne-Mette Vire[3]
[1]Institut for Kemi, Aarhus Universitet, [2]Institut for Bioscence, Aarhus Universitet, [3]Lektor, Risskov Gymnasium

DDT (1,1,1-trichlor-2,2-bis(p-chlorphenyl)ethan [1]) er gennem mange år blevet brugt til bekæmpelse af malariamyg. Det største forbrug er i fattige tropiske områder, hvor forekomsten af malaria er meget højere end i resten af verden [2]. DDT kan detekteres i de fleste dele af verden, endda Arktis og Antarktis, hvor det aldrig har været brugt [3].

Udbredelse globalt

DDT transporteres over store afstande i atmosfæren, hovedsageligt pga. troposfærens vinde [4]. Migrerende fugle kan også være årsag til spredning, da mange overvintrer i Afrika, hvor DDT er meget brugt. DDT kan findes på Arktis og Antarktis som følge af den såkaldte jump-effekt [3,5].

Brugen af DDT er størst omkring ækvator, så hvis DDT kan spores på polerne, kan det spores over hele verden.

Optages DDT af mennesker, dyr eller andre levende organismer, kan det have alvorlige konsekvenser, da stoffet er under mistanke for at forårsage kræft [6], æggeskalsfortynding [7], reproduktionsvanskeligheder [8] og meget andet.

Nedbrydningsprodukter af DDT

DDT har mange nedbrydningssprodukter, hvoraf DDE og DDD er de vigtigste, specielt DDE har vist sig at have store konsekvenser for fuglelivet.
DDE: 1,1-dichlor-2,2-bis(p-chlorphenyl)ethylen [1]
DDD: 1,1-dichlor-2,2-bis(p-chlorphenyl)ethan [1]
DDMU: 1-chlor-2,2-bis(4'-chlorphenyl)ethylen [5]
DDNU: 2,2-bis(chlorphenyl)ethylen [5]
DDOH: 2,2-bis(chlorphenyl)ethanol [5]
DDA: 2,2-bis(chlorphenyl)eddikesyre [5]

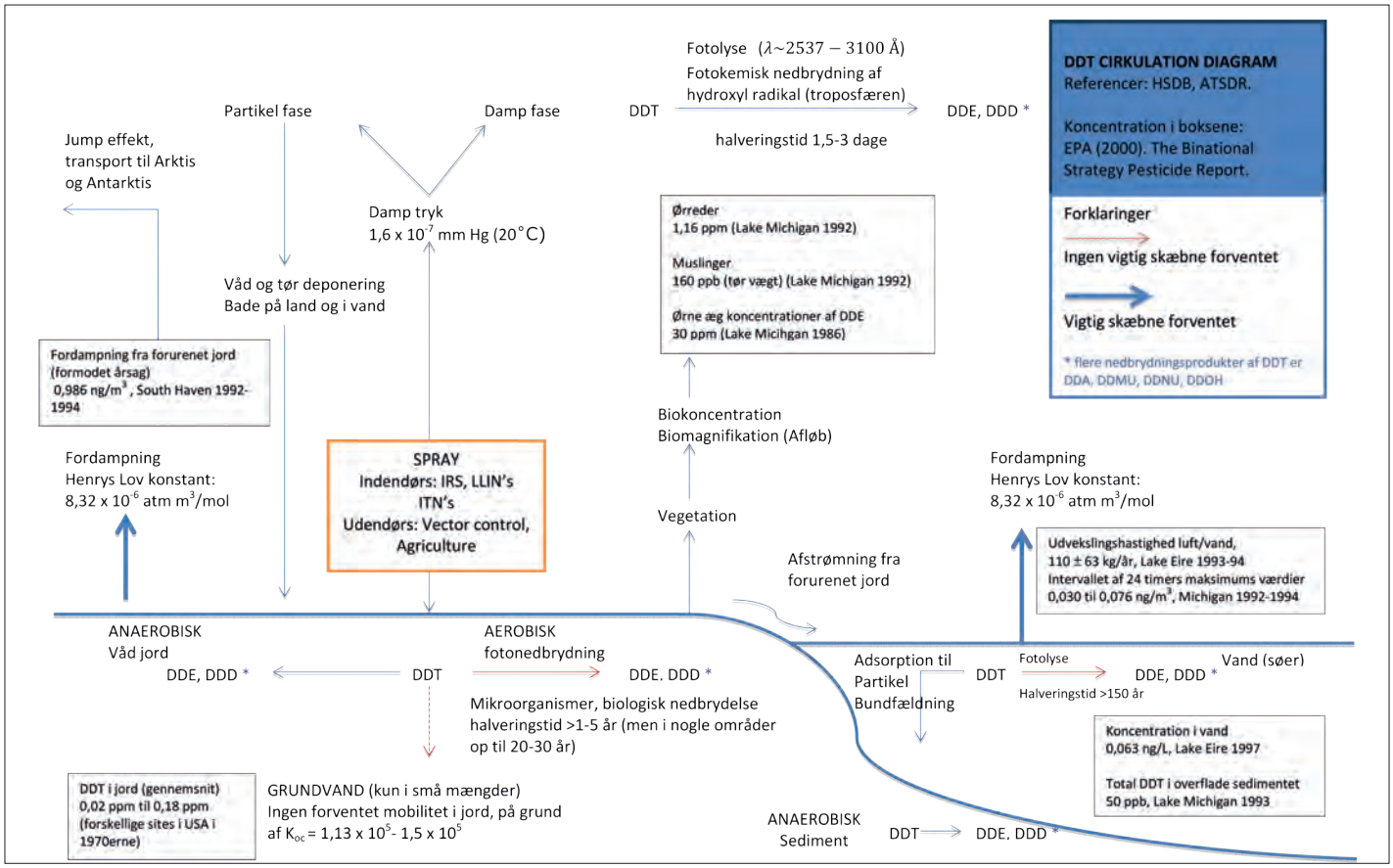


Diagram over hvordan DDT transporteres i miljøet, hvor det nedbrydes og hvor det deponeres.

Jump-effekt

De fleste stoffer, der kommer ud i atmosfæren, er enten fordampet fra jord eller vand eller bliver direkte udledt til atmosfæren. Stofferne når ikke at blive nedbrudt, før de bliver midlertidig deponeret i enten jord eller vand. Fra jorden og vandet kan de igen fordampe til atmosfæren. På denne måde bliver stofferne transporteret imod polerne [5].

Effekt af DDT i jord

Ved brugen af DDT ender en del på jorden. Jordtypen har stor betydning for, hvor kraftigt DDT bindes og hvordan det nedbrydes. Jord med et højt indhold af organiske stoffer absorberer meget DDT [9]. Halveringstiden i jord varierer fra under 1 år i tropiske til 5 år i tempererede områder. Halveringstiden er op til 20-30 år i nogle jordtyper [5]. Det er afgørende, om der er tale om våde eller tørre områder. I våde områder når det meste DDT at fordampe, inden det kan nedbrydes, pga. den lave værdi for Henrys konstant ($8{,}32*10^{-6}$ atm m^3/mol ved 25ºC) [10]. I tørre områder nedbrydes DDT hovedsageligt til DDE og DDD. Andre nedbrydningsprodukter (se boks) er af mindre betydning [5]. DDT i jorden kan optages af planter gennem rødderne og overføres til både dyr og mennesker, der spiser planterne, hvorefter det kan blive biomagnificeret [5].

Afstrømning af DDT til vandløb og havet

Tilførsel af DDT til have, vandløb og søer sker via afstrømning fra jorden og regn [9]. Specielt havet er vigtigt, da DDT langsomt falder ned gennem vandsøjlen og sedimenteres [5].

For mange miljøgifte er havet det endelige deponeringssted, og DDT er ingen undtagelse [11]. DDT i havet har en halveringstid på 150 år [5]. Fotolyse i vandoverfladen er den eneste måde, hvorpå DDT kan blive nedbrudt i vand [5].

DDT i atmosfæren

Ved bekæmpelsen af malaria sprøjtes DDT indendørs og kan herefter fordampe ud af husene til atmosfæren [5]. I troposfæren nedbrydes DDT hovedsageligt af hydroxyl-radikaler med en halveringstid på 1,5-3 dage, men det sker kun, hvis DDT er i gasfasen (5). Størstedelen nedbrydes i troposfæren, men små mængder diffunderer op i stratosfæren. I stratosfæren nedbrydes DDT fotokemisk ved indvirkning af ultraviolet lys med bølgelængder mellem 2537 og 3100 Å [1,12-14].

Foto: Karin Frykman

Biomagnificering
Organismer på de nederste trin af fødekæderne optager miljøgifte. De spises af organismer højere oppe i fødekæden, som så optager giften. Biomagnificering er når mængden af miljøgift stiger op gennem fødekæden [15].

Ud over gasfasen kan DDT også befinde sig på partikelfase, men hvad nedbrydning angår, er denne fase af mindre betydning. I partikelfasen vil DDT ikke blive nedbrudt [5]. Våd og tør deponering på jord eller vand er den eneste måde, hvorpå DDT i partikelfasen kan fjernes fra atmosfæren [5]. Dette betyder også, at DDT som partikler kan transporteres gennem atmosfæren til fjerne steder på jorden.

Effekter af DDT

Et højt forbrug et enkelt sted på jorden vil afspejles, ikke kun i plante og dyreliv omkring det pågældende sted, men globalt. Da DDT mistænkes for at have fatale konsekvenser for dyr og miljø, er der gennem mange år søgt efter alternativer. Der er dog også en positiv side af DDT-brugen, da mange mennesker kan reddes fra malaria.

Vi vil gerne rette en stor tak til vores vejleder i dette projekt Michael Goodsite for positivt og inspirerende samarbejde og til Marianne Glasius og Henrik Skov for hjælp til denne artikelserie.

Referencer

1. Plimmer, Jack R., Klingebiel, Ute I. og Hummer, Burton E. Photooxidation of DDT and DDE. Science. 167, 2. Januar 1970, 3914, s. 67-69.
2. Attaran, Amir, et al. Balancing risks on the backs of the poor. Nature Medicine. 6, July 2000, 7, s. 729-731.
3. Wania, Frank og Mackay, Donald. Global Fractionation and Cold Condensation of Low Volatility Organochlorine Compounds in Polar Regions. Ambio. 22, Februar 1993, 1, s. 10-18.
4. Tanabe, Shinsuke, et al. Global Distribution and Atmospheric Transport of Chlorinated Hydrocarbons: HCH (BHC) Isomers and DDT Compounds in the Western Pacific, Eastern Indian and Antarctic Oceans. Journal of the Oceanographical Society of Japan. 38, 1982, s. 137-148.
5. ATSDR. Toxicological Profile For DDT, DDE and DDD. Atlanta : Agency for Toxic Substances and Disease Registry, 2002. s. 1-497.
6. International Agency for Research on Cancer. Occupational exposures in insecticide application, and some pesticides. IARC Monographs for the evaluation of carcinogenic risk of chemicals to humans. 53, 1991, s. 179-249.
7. Lundholm, C. E. DDE-Induced Eggshell Thinning in Birds: Effects of p,p'-DDE on the Calcium and Prostaglandin Metabolism of the Eggshell Gland. Comparative Biochemistry and Physiology Part C: Pharmacology, Toxicology and Endocrinology. 118C, 1997, 2, s. 113-128.
8. EFSA. Opinion of the scientific panel on contaminants in the food chain on a request from the commission related to DDT as an undesirable substance in animal feed. EFSA Journal. 2006.
9. Cramer, J. Model of the circulation of DDT on earth. Atmospheric Environment. 7, Marts 1973, 3, s. 241-256.
10. HSDB. Hazardous Substances Data Bank. [Online] [Citeret: 3. Februar 2012.] http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/search/f?./temp/~EmBqr7:1.
11. Clare A. Stewart, Jr., et al. Atmospheric Circulation of DDT. Science. 177, 25. August 1972, 4050, s. 724-725.
12. Fleck, Elmer E. The Action of Ultraviolet Light on DDT. Journal of the American Chemical Society. 71, Marts 1949, s. 1034-1036.
13. Gunther, Francis A. Aspects of the Chemistry of DDT. Journal of Chemical Education. Maj 1945, s. 238-242.
14. Mosier, A. R., Guenzi, W. D. og Miller, L. L. Photochemical Decomposition of DDT by a Free-Radical Mechanism. Science. 164, 30. Maj 1969, s. 1083-1085.
15. Baird, Colin and Cann, Michael. Environmental Chemistry. New York : W. H. Freeman and Company, 2008. ISBN-13: 978-1-4292-0146-9.

Kontrol med spildevandet en forudsætning for kemisk produktion

Miljøkvalitetskrav fastsættes for de enkelte kemiske forbindelser i det rensede spildevand.

Af Heidi Gade Andersen, Inge Margrethe Jensen og Kirsten Kjær, Cheminova A/S

Som kemisk virksomhed med eget rensningsanlæg er Cheminova underlagt Miljøministeriets bekendtgørelse om miljøkvalitetskrav for vandområder og krav til udledning af forurenende stoffer til vandløb, søer eller havet. Derfor er der fokus på spildevand.

Ny produktion stiller krav til forståelse af spildevandsrensning

På Cheminova kan tilledningen af processpildevand fra en nyetableret produktion til det biologiske rensningsanlæg først iværksættes, når der er dokumentation for, at det rensede spildevand fra produktionen ikke vil være årsag til uacceptable negative effekter på økosystemet i recipienten. Tilsvarende må tilledningen fra den igangværende produktion standses, hvis driftsanalyser viser, at indholdet af specifikke stoffer i det rensede spildevand overstiger et fastsat udlederkrav.

Det stiller krav til forståelse og dokumentation af de kemiske processer, proceskontrol, spildevandsbehandling, analysemetoder og ikke mindst samarbejde på tværs af organisationen. Denne artikel beskriver arbejdet i Cheminovas spildevandsforum, der er en tværorganisatorisk gruppe med deltagelse af laboranter, kemikere og ingeniører fra synteseudvikling, driftsanalysen, miljøafdelingen, produktionen og det biologiske rensningsanlæg.

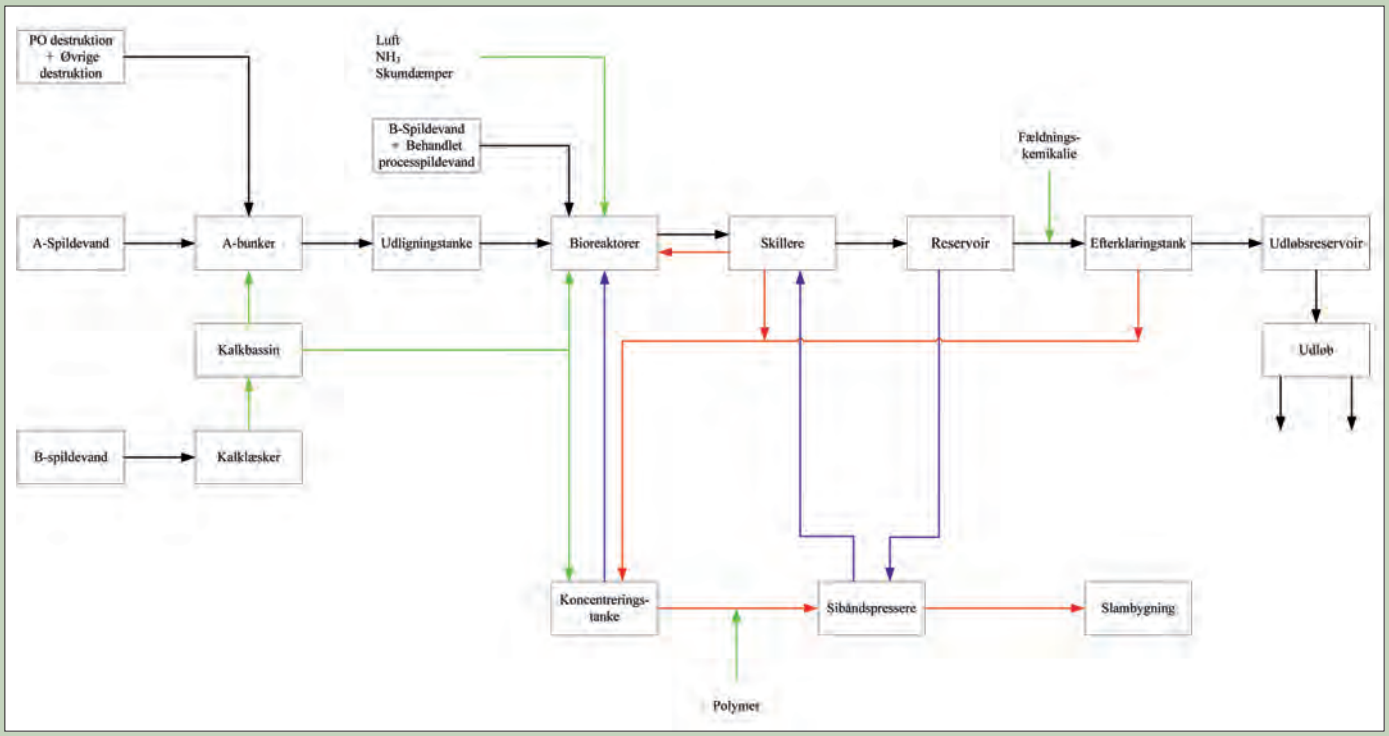
Miljøkvalitetskravet er pejlemærket

Cheminova har tilladelse til at udlede renset spildevand til Vesterhavet. Det rensede spildevand fra den kemiske produktion kan indeholde små mængder af det færdige produkt, udgangsstoffer og bi-eller nedbrydningsprodukter. I forbindelse med tilladelsen er det ønskeligt for Cheminova, at der kan fastsættes et miljøkvalitetskrav for hvert enkelt kemisk stof. Miljøkvalitetskravet afhænger af stoffets økotoksikologiske egenskaber og er udgangspunkt for beregning af miljømyndighedernes vilkår for det maksimale indhold af det kemiske stof i det rensede spildevand (udlederkravet).

Hvis indholdet af stoffet er så lavt, at det vurderes uden betydning for vandmiljøet, fastsættes der ikke et miljøkvalitetskrav. I sådan en situation må stoffet ikke forekomme i det rensede spildevand.

I situationer hvor forsøgsarbejdet indikerer, at en kemisk forbindelse kan forekomme i det rensede spildevand i koncentrationer, der kan have betydning for vandmiljøet, skal der laves risikovurdering for effekten på økosystemet, og der skal fastsættes et miljøkvalitetskrav. Risikovurderingen er baseret på stoffets økotoksikologiske egenskaber og den forventede koncentration i spildevandet.

Luftfoto af Cheminovas produktionsanlæg på Rønland med recipienten, Vesterhavet, i baggrunden.
Fotograf: Mogens Hald.



Opbygning af det biologiske rensningsanlæg på Cheminova A/S

Cheminovas biologiske rensningsanlæg på site Rønland ved Harboøre er i grove træk sammensat af en kemisk forbehandling (A-bunkeren) og et aktivt slamanlæg (bioreaktorerne). Det blev etableret i 1988.

Spildevandet opdeles i følgende kategorier:

- A-spildevand bestående af processpildevandet fra hovedparten af anlæggene
- B-spildevand, som er overfladevand og sanitært spildevand

På størstedelen af arealet er overfladevandet separeret fra sanitært spildevand. B-spildevandet, med undtagelse af overfladevandet fra produktionsområdet, pumpes enten direkte i bioreaktorerne eller overfladevandet genanvendes til fremstilling af læsket kalk, som benyttes i A-bunkeren eller bioreaktorerne.

Inden A-spildevandet sammen med overfladevandet fra produktionsområdet ledes til udlignings-tankene og derfra til bioreaktorerne, passeres A-bunkeren, hvor pH er indstillet til 12 med læsket kalk. Det høje pH bevirker en basisk hydrolyse af de fleste af færdigvarerne. Desuden giver kalken senere i processen anledning til kemisk fældning af de uorganiske forbindelser, primært ortho-fosfat og sulfat.

I udligningstankene køres med alternerende drift mellem indpumpning, analyse af spildevandets sammensætning og bortpumpning.

I bioreaktorerne foregår den biologiske nedbrydning. For at opnå maksimale vækstbetingelser for bakterierne er der indført regulering af pH (tilsætning af læsket kalk), temperaturen (kølesystem), beluftningen (bund- og overfladebeluftning) samt mængden af tilgængeligt kvælstof (tilsætning af ammoniak).

Overløbet fra bioreaktorerne pumpes videre til skillerne via et fordelerbygværk, hvor mængden af aktivt slam til den enkelte skiller justeres manuelt.

Da der ikke opnås en tilfredsstillende fældning af ortho-fosfat alene med kalken, tilsat i bioreaktorerne, tilsættes ligeledes et fældningskemikalie i form af jern(III)sulfat i rørsystemet lige inden efterklaringstanken.

Overskudsslammet tilsat polymer presses på en sibåndspresser og sendes efterfølgende til deponi.

Cheminovas spildevandsforum er en tværorganisatorisk gruppe, der samarbejder om stort og småt vedrørende spildevandsbehandling. Gruppen består af udviklingsingeniør Heidi Gade Andersen, analysekemiker Bo Breinbjerg, driftsingeniør Claus Ove Sørensen, senior laboratorietekniker Inger Skov, leder af miljø-og kemikalieafdelingen Kirsten Kjær og mester for rensningsanlægget David Jensen.

Cheminovas biologiske rensningsanlæg.

Hvis forbindelsen er meget giftig, og/eller hvis den forventede koncentration i spildevandet er høj efter den planlagte spildevandsbehandling, kan det ske at, man ikke kan dokumentere, at der ikke er effekt på vandmiljøet. Under disse omstændigheder kan der ikke gives tilladelse til udledning, og rensningsprocessen må genvurderes med henblik på at opnå en lavere koncentration.

Spildevandsforum – stedet hvor trådene samles

Cheminovas spildevandsforum danner rammen om den iterative proces, der er nødvendig for at fastsætte udlederkravet. Processen består af chemostatforsøg [1], udvikling af analysemetoder til bestemmelse af de relevante stoffer, analyser, test på vandlevende organismer, in-house risikovurdering med afsluttende evaluering af, hvorvidt der vil kunne gives tilladelse til udledning og dermed fastsættes et udlederkrav. Hvis det ikke skønnes muligt, må der arbejdes yderligere med spildevandsbehandlingen, f.eks. kan muligheden for ekstraktion, inddampning eller brug af kulfilter undersøges. Effekten af disse tiltag må dokumenteres med chemostatforsøg, analyser og ny risikovurdering. Det er vigtigt for den iterative proces, at der i spildevandsforum sidder folk med den rigtige ekspertise, og at eksperterne samtidig har forståelse for hele processen fra produktion til udledning af det rensede spildevand, for forsøgsarbejdet og for papirarbejdet.

Krav til analysemetoder

Når der skal sættes udlederkrav for enkelte kemiske forbindelser, stilles der store krav til de analysemetoder, der bruges til at kvantificere indholdet i det rensede spildevand. Spildevand er en kompleks matrice at analysere på, og der er krav om genfinding ved meget lave koncentrationer, når det skal dokumenteres, at udlederkravene overholdes.

Cheminovas færdigvarer er plantebeskyttelsesmidler, og nogle af dem har en høj biologisk aktivitet med en deraf følgende risiko for recipienten. Derfor kan miljøkvalitetskravene og dermed også udlederkavene for visse stoffer være endog meget lave. Kravet til Cheminovas insektmiddel gamma-cyhalothrin, som er verdens mest potente insektmiddel, er f.eks. så lavt, at der kun må udledes 300 mg pr. dag, vel at mærke i de omkring 2.500 m^3 renset spildevand, der dagligt udledes til recipienten.

E-mail-adresse
Kirsten Kjær: kirsten.kjaer@cheminova.com

Om Cheminova

Cheminova er en kemisk virksomhed med hovedområde inden for plantebeskyttelsesmidler.

Virksomhedens produkter er i udstrakt grad baseret på egen procesudvikling og egen udvikling af formuleringer. Produkterne markedsføres hovedsageligt gennem egne datterselskaber og salgskontorer i de store landbrugsmarkeder i verden. Den årlige omsætning for koncernen ligger på omkring 5 mia. kroner.

Uden for plantebeskyttelsesmiddelområdet produceres flotationsmidler til mineindustrien.

Cheminova beskæftiger 800 medarbejdere i Danmark og 1.200 i udlandet. Der er produktionsanlæg på Harboøre Tange i Danmark og i delstaten Guajarat i Indien. Begge produktionsanlæg er miljøcertificerede.:

Kilder:
Miljøministeriets bekendtgørelse om miljøkvalitetskrav for vandområder og krav til udledning af forurenende stoffer til vandløb, søer eller havet (BEK nr 1022 af 25/08/2010).

Referencer:
1. Andersen, H.G. og Jensen, I.M., (2012), *Anvendelse af chemostatforsøg i arbejdet med spildevandsrensning*, (Dansk Kemi, dette nummer)

Pipettecenteret
Kalibrering og service af alle fabrikater pipetter.
Vi kalibrerer både ved indsendelse eller på kundens adresse.
Salg af pipetter og laboratorie varer.

Pipettecenteret
Skovkanten 41 · 4700 Næstved
Tlf. 55 73 62 05 · Mobil 30 33 32 49
Email. nielslindgaard@stofanet.dk
www.pipettecenteret.dk

WWW

Luftfoto af Cheminovas produktionsanlæg på Rønland. Det biologiske rensningsanlæg ligger i det sydvestlige hjørne af fabriksarealet og ses nederst til venstre.
Fotograf: Benny Vejlby

Anvendelse af chemostat-forsøg i arbejdet med spildevandsrensning

Chemostaten er et minirensningsanlæg, hvor de fysisk-kemiske parametre kan kontrolleres.

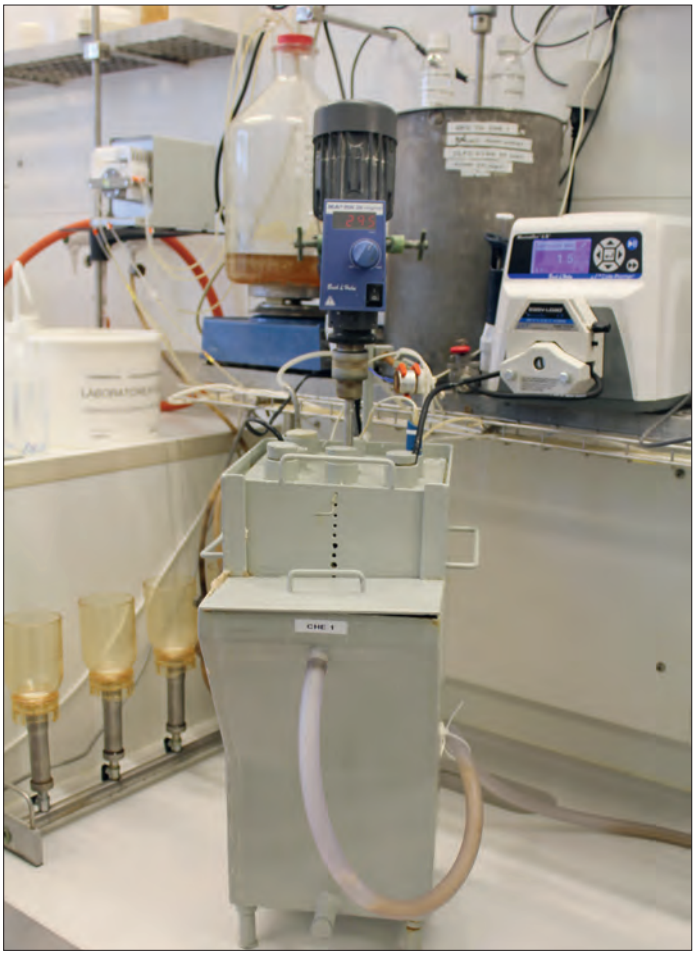
Af Heidi Gade Andersen og Inge Margrethe Jensen, Cheminova A/S

Chemostatforsøg kan simulere omsætningen af kemiske forbindelser i processpildevand fra den kemiske produktion. Forsøgene er væsentlige for forståelsen af omsætningen i et fuldskala rensningsanlæg. Cheminova bruger chemostatforsøg, når en ny produktion skal iværksættes, og når der sker ændringer i eksisterende processer. Forsøgene er med til at levere den dokumentation, der er nødvendig for etablering af udlederkrav for specifikke kemiske forbindelser i det rensede spildevand fra det biologiske rensningsanlæg.

Modellering af spildevandsrensningen

I forbindelse med tilladelsen til at udlede renset spildevand skal der fastsættes udlederkrav for hver enkelt forbindelse. I den sammenhæng stiller myndighederne krav om dokumentation for nedbrydning af kemiske stoffer i processpildevandet.

Senior laboratorietekniker, Inger Skov, og udviklingsingeniør, Heidi Gade Andersen, overvåger chemostaten, der er opstillet i et stinkskab i et af udviklingslaboratorierne.



Chemostaten er koblet op med tilledningspumpe, omrøring og udtag til måling af temperatur og pH.

Det skal kunne dokumenteres, at spildevandet kan renses og udledes til recipienten på en miljømæssig forsvarlig måde. Til dette formål anvendes en chemostat, der fungerer som et rensningsanlæg i miniatørrelse. Chemostatforsøgene er således en vigtig faktor i arbejdet med spildevand, og chemostatens opbygning og funktion i denne sammenhæng beskrives i det følgende.

Stabilitet og nedbrydning af udgangsmaterialer

Chemostatforsøget til dokumentation af den biologiske nedbrydning påbegyndes med fastsættelse af stabiliteten af udgangsmaterialerne og det tekniske produkt i udligningsspildevandet.

Erfaringen viser, at de fleste færdigvarer fra Cheminovas produktion har tendens til at undergå basisk hydrolyse i udligningsspildevandet pga. det høje pH (pH 12). I disse tilfælde er det vigtigt at få identificeret nedbrydningsproduktet.

Dette gøres ved at foretage en kemisk nedbrydning af forbindelsen ved pH 12 og efterfølgende analysere reaktionsblandingen ved brug af enten LC-MS, GC-MS eller NMR. Afhængigt af forbindelsens opløselighed udføres dette forsøg enten direkte i teknisk lud eller i et polært solvent, såsom methanol eller ethanol tilsat lud.

Dernæst fastsættes rensningsgraden for udgangsmaterialerne, det tekniske produkt og eventuelle nedbrydningsprodukter ved at tilsætte 10-50 mg/L af de kemiske forbindelser til chemostatens spildevandsforlag. Ofte er det muligt at undersøge nedbrydningen af udgangsmaterialerne og det tekniske produkt samtidigt. I de tilfælde, hvor den biologiske nedbrydning ønskes oplyst for en forbindelse, der ikke er stabil i udligningsspildevandet, opløses denne forbindelse i vand eller et biologisk nedbrydeligt solvent og pumpes derefter direkte ned i chemostaten.

Processpildevand

Når rensningsgraden for relevante kemiske forbindelser i det kommende processpildevand kendes, startes et forsøg med tilsætning af processpildevand genereret under forsøgskørsel i pilot plant til spildevandsforlaget. Mængden vil være proportio- ▶

Spildevandsslammets egenskaber vurderes blandt andet ved en flokkuleringstest.

nalt med mængden, der ledes til det biologiske rensningsanlæg, når den maksimale produktionskapacitet udnyttes.

I forbindelse med dette forsøg belyses, hvorvidt den generelle chemostatdrift påvirkes samt størrelsesorden af evt. restkoncentrationer.

Under udførelsen af forsøget undersøges chemostatdrift ugentligt ved analyse af organofosfat-nedbrydningen. Prøverne analyseres for koncentrationen af ortho-phosphat og total-phosphat i chemostaten [1]. Desuden vurderes slammets egenskaber ud fra slamvolumen, mængden af suspenderet stof og sedimentations- og flokkuleringsevnen. Endvidere måles ledningsevnen.

Ud over driften kontrolleres desuden følgende styringsparametre, da afvigelser kan få konsekvens for rensningen: flow, temperatur, pH, ilt- og kvælstofindhold.

Selve rensningen af det kommende processpildevand vurderes ud fra bestemmelse af de relevante forbindelsers koncentration i spildevandsforlaget og chemostaten ved stofspecifikke GC- eller HPLC-analyser. Ud fra resultaterne vurderes om rensningsgraden er acceptabel.

Der udtages både en filtreret prøve (svarende til det rensede spildevand) og en prøve med slam. Afvigelser i analyseresultaterne mellem disse to prøver indikerer, at forbindelsen binder sig til slammet.

Opbygning af chemostat

Chemostaten er konstrueret, således at den afspejler forholdene på det biologiske rensningsanlæg bedst muligt.

Den består af en 17 L rustfri stålbeholder påmonteret en skiller. Åbningsstørrelsen mellem beholderen og skilleren justeres ved at hæve eller sænke frontpladen.

Desuden er chemostaten forsynet med en mekanisk omrører og beluftning. Temperaturen og pH-forholdene i chemostaten reguleres af en Combicontrol-boks forbundet til en termoføler og et akvarievarmelegeme samt en pH-elektrode og en magnetventil koblet til et kalkforlag.

Urenset produktionsspildevand udtaget fra udligningstankene på det biologiske rensningsanlæg hældes i det omrørte spildevandsforlag og pumpes derfra ned i chemostaten.

Dokumentation for effekt af spildevandsbehandling

Analyseresultaterne fra chemostatforsøgene dokumenterer effekten af spildevandsbehandlingen og indgår i den dokumentation, der ligger til grund for fastsættelse af udlederkravet. Chemostatforsøgene bruges også eksperimentelt til at dokumentere effekten af ændringer i spildevandsbehandlingen.

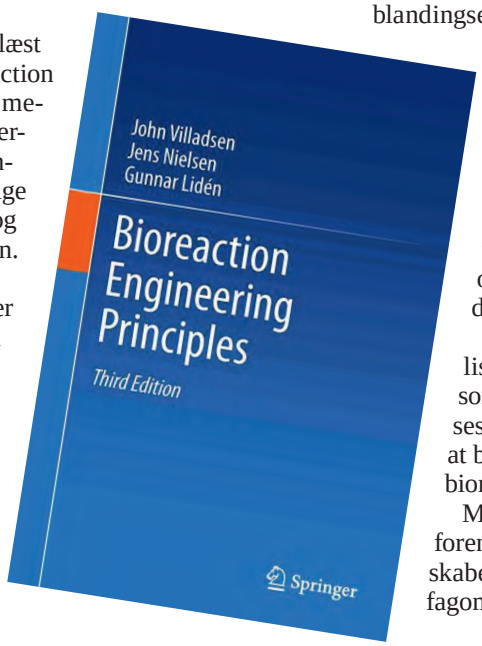
E-mail-adresse
Heidi Gade Andersen: heidi.andersen@cheminova.com

Kilder:
Miljøministeriets bekendtgørelse om miljøkvalitetskrav for vandområder og krav til udledning af forurenende stoffer til vandløb, søer eller havet (BEK nr 1022 af 25/08/2010).

Referencer:
1. DS 292:1985. Vandundersøgelse. Total phosphor – Fotometrisk metode.

Bioreaction Engineering Principles

John Villadsen, Jens Nielsen, Gunnar Lidén
Springer Verlag, 2011, 561 sider
ISBN 978-1-4419-9687-9, 74,85 euro



Det er med stor glæde, at jeg har læst 3. og reviderede udgave af Bioreaction Engineering Principles, og det er meget glædeligt at konstatere forfatternes holistiske syn på sammenhængen mellem den rent videnskabelige tilgang til biokemiske processer og den ingeniørmæssige side af sagen. Traditionelt bevæger disse to områder sig i hver sin cirkel, og det er også en udfordring at forene to så forskellige akademiske kulturer som Bioscience og Chemical Engineering uden at miste noget af begge områders kvaliteter og styrker.

Bogens kapitel 2 beskæftiger sig meget pædagogisk med en kort men tilstrækkelig introduktion til metabolismen i mikroorganismer og en række forskellige "pathways" og dermed metaboliske netværk.

Dette underbygger hermed behovet for at erkende nødvendigheden af at have et matematisk apparat, som kan håndtere disse mange reaktioner. Dermed har læseren bevæget sig in i et område, hvor det er nødvendigt at kunne håndtere matrix algebra. Det er nødvendigt med et matematisk beredskab for at kunne håndtere numerisk simulering, modellering og dataanalyse. Det vil være en udfordring for biostuderende, men for de traditionelle ingeniørstuderende er det en mindst lige så stor en udfordring at sætte sig ind i bioverdenens univers. Men det er nødvendigt at forene disse to universer, og her kommer denne bog til sin ret.

Med denne ballast bevæger forfatterne sig nu i kapitel 3 ind i området med massebalancer, støkiometriske koefficienter, redox balancer, udbytte koefficienter, black box støkiometri og dataanalyse, alt sammen forhold, som er nødvendige for at kunne få et overblik over, hvor substratet bliver af.

Kapitel 4 er en lige så naturlig følge, da der her ses på bioreaktioners termodynamik og hermed et så væsentligt begreb som Gibbs' fri energi, som er nødvendig for kunne skelne mellem forskellige "pathways". Dernæst kommer reaktionsenthalpien, hvor aerobe reaktioner er enthalpidrevne og anaerobe entropidrevne.

Fluxanalyse behandles i kapitel 5 og beskriver mere detaljeret, hvordan det indsatte substrat omsættes, og udbredes til store netværk. Dette er helt naturligt kombineret med vækstenergiforholdene i mikroorganismerne.

I kapitel 6 følger emner som enzymkinetik, herunder immobiliserede enzymer med de deraf afledede transportforhold i partikler, samt metabolisk kontrolanalyse. Kapitel 7 omhandler vækstkinetik, cellekulturer, morphologiske modeller samt transport over cellemembraner. Kapitel 8 omhandler populationsligninger.

I kapitlerne 9, 10 og 11 kommer vi frem til de traditionelle ingeniørmæssige færdigheder som design af fermenteringsreaktorer, batch, CSTR, plug-flow, loop eller fed-batch. Gas-væske-transport er en del af en fermentering og beskæftiger sig med k_La-værdier og boblestørrelser. Sidst følger opskaleringen af laboratorieprocesserne til industriel målestok, hvor blandingseffektiviteten er et meget væsentligt forhold.

Bogen er udstyret med omfattende eksempelmateriale. Det gør det muligt for alle, som beskæftiger sig med bioreaction engineering, at følge bogens indhold, uanset hvilken baggrund man kommer med, jf. indledningen i denne anmeldelse. Man kan også let følge den matematiske behandling, som er så vigtig. Matematikken er på mange felter det værktøj, der gør det muligt at sammenkæde observationer og derefter transformere dem gennem modeller og dataanalyse til processer, der kan bruges i stor skala.

Og så må man ikke glemme den fyldige litteraturliste og de mangfoldige gennemregnede eksempler, som bogen er udstyret med. Det er en meget anbefalelsesværdig læsning, og det er min faste overbevisning, at bogen bevarer sin position som en klassiker inden for bioreaction engineering principles.

Med denne bog er der skabt et solidt fundament til at forene to vidt forskellige akademiske verdener og dermed skabe en bioingeniør, som har et ben solidt plantet i begge fagområder.

Lars Wiebe, Danisco, lars.wiebe@danisco.com

Intelligent Water Analysis
Mantech PeCOD - BOD and Water Analysers
Gilson PLC2020 Personal LC
Gilson High Volume SPE
Genevac Rocket Evaporator

BIO LAB

Biolab A/S ·
Sindalsvej 29
DK-8240 Risskov
Telefon 8621 2866
Telefax 8621 2301
E-mail: sales@biolab.dk

Om svensk "rødfarve"

Historien og jernkemien bag de røde træhuse. Fra helleristninger til kobberminer.

Af Mikael Lund, Avdeling for Teoretisk Kemi, Lunds universitet

Enhver, der har begivet sig en tur over Øresund, vil utvivlsomt have bemærket, at man i det svenske har for vane at male sine træhuse røde. Farven har nogle hundrede år på bagen som husmaling. Her gennemgås det, hvad der gemmer sig bag den.

Den smukke, dybrøde kulør skyldes helt enkelt jern(III)oxid, Fe_2O_3. Kært barn har som bekendt mange navne, og når der som her er tale om et pigment, der har været anvendt i årtusinder, er det blevet til ikke så få: engelsk rødt, indisk rødt, persisk rødt, pariserrødt, todtenkopf, polerrødt osv. En stor fordel med et sådant *mineralsk* pigment er – i modsætning til organiske farvestoffer – at det hverken nedbrydes eller ændres af sollys, vejr og vind, da jernet ikke lader sig oxidere yderligere. Om vores forfædre, der levede for årtusinder siden, vidste dette, er uklart. Men det er fakta, at de brugte jernoxider til at male de helleristninger, hvorpå den karakteristiske røde farve stadig kan spores.

De svensk røde huse går dog "kun" tilbage til 1700-tallet, hvor man for alvor begyndte at male de ellers ubehandlede, grå træbygninger med *rödfärg*, som de kalder det lokalt. Det originale pigment, en nogenlunde lige blanding af jernoxid og kvarts, er et biprodukt fra kobberminerne tæt på Falun i Dalarna. Det er stadig her størstedelen af den nuværende produktion på ca. 700 ton/år foregår. Denne heldige – eller måske uheldige – forbindelse til kobberminerne betød, at det udvundne pigment indeholdt anseelige mængder divalente ioner, der effektivt beskyttede træet. Selvom pigmentet i dag er ganske tilforladeligt, og kun indeholder små mængder zink, kobber og bly [1], har det stadig glimrende træbevarende egenskaber. Disse skyldes i høj grad, at malingen er helt diffusionsåben og tillader træet at blive vådt, men, vigtigere - også tørt igen [2].

Rød sovs med vitriol, tak

Den flydende maling er en såkaldt slamfarve, dvs. en dispersion hvor det uopløselige pigment, vand og bindemiddel slemmes op til en lind blanding. Følgende er en gammel svensk opskrift, og som det ses, er der tale om en regulær (rød) sovs:

"2 kg. Järnvitriol löses i 50 liter kokande vatten; i lösningen invispas 2-2½ kg. finmalet rågmjöl, till vilken blandning, efter ¼ timmes kokning, sättes under flitigt omrörande 8 kg. Rödfärg, varefter färgblandningen, sedan den ytterligare kokat ¼ timme, är till anstrykning färdig."

Jernvitriol eller ferrosulfat, $FeSO_4 \times 7H_2O$ (*vitrum* betyder glas og henviser til saltkrystallernes udseende), tilsættes for at mod-

virke algeangreb, men gør også malingen mørkere – formodentlig pga. oxidation til jern(III). Melet virker som fortyknings- og bindemiddel ved at amylose frigives under opvarmningen. Ifølge fagfolk er rugmel – malet mellem rigtige møllesten, forstås – bedre end hvedemel, da førstnævnte indeholder mindre protein. Dette skulle mindske vækst af uønskede svampe, der ellers kan danne små, sorte prikker på malingen. Et argument lyder, at "franskbrød mugner hurtigere end rugbrød", hvilket jo nok stemmer, men om dette kan overføres til malet træværk, skal jeg ikke kunne sige.

I dag er det kun de færreste, der har mod på at koge deres maling selv, og man kan da også købe denne færdigblandet i ethvert svensk byggemarked. Her er der dog oftest tilsat ca. 10% linolie i en sæbeemulsion, der gør, at malingen hæfter bedre og derved ikke, som den originale blanding, smitter af ved berøring. Linolien gør også farven en smule mørkere.

Lys rød eller sort?

Nu er rød ikke bare rød, og undersøgelser af gamle huse viser, at man i begyndelsen brugte en lys variant, senere en mørk og i dag kan man endda få sort "rødfarve". Hvordan går det til? Opvarmes førnævnte jernvitriol, tabes først krystalvand, hvorefter:

$$2FeSO_4(s) \rightarrow \alpha\text{-}Fe_2O_3(s) + SO_2(g) + SO_3(g)$$

Ved at lede svovloxiderne gennem vand fås svovlsyre, der førhen derfor kaldtes "vitriololie". Det dannede α-Fe_2O_3, altså vores pigment, er rødt pga. dets korundstruktur og findes i mineralet hæmatit. Er opvarmningen kun moderat, fås en særlig lys farve forårsaget af udprægede krystaldefekter [3]. Ved yderligere opvarmning reduceres jern(III) delvist, og man får et *sort* dobbeltoxid med spinelstruktur:

$$6Fe_2O_3(s) \leftrightarrow 4Fe_3O_4(s) + O_2(g)$$

Under pigmentfremstillingen kan man altså gå fra lys rød mod sort ved at styre temperaturen.

Afslutningsvis skal det nævnes, at *rödfärg* er billigt, holdbart, let at arbejde med og gerne må påføres hårdhændet. Derfor, næste gang udhuset eller stakittet skal males, er det måske værd

Fakta om rødfarve:
- Anvendt i Sverige siden 1700-tallet
- Pigmentet, Fe_2O_3, kommer fra kobberminerne ved Falun
- Består af pigment, vand og mel
- Er diffusionsåben og tillader vand at trænge både ind og ud
- Anvendes på ru, uhøvlet træ

først at lægge vejen forbi broderlandet og samtidig sende en venlig tanke til vores forgængere fra jernalderen.

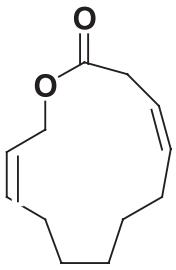
Tak til tidligere vejleder og køkkenkemiker, Thorvald Pedersen, hvis råd, "Er der noget du ikke véd, så skriv om det!", herved er taget til efterretning.

E-mail-adresse
Mikael Lund: mikael.lund@teokem.lu.se

Referencer
1. www.falurodfarg.com
2. www.bygningsbevaring.dk
3. Hägg, G. "Allmän och oorganisk kemi", Almqvist&Wiksell, Uppsala 1989, 772 sider.

Nyt om….
….Kakerlakken og flagspætten

Hunkakerlakker af arten *Parcoblatta lata* har små vinger og kan ikke flyve. Men de producerer et sexferomon, der tiltrækker hanner, som flyver fint. Hovedkomponenten i feromonet er den usædvanlige makrocykliske lakton parcoblattalakton. Kakerlakken er en blandt 11 andre arter i en slægt, der er vidt udbredt og talrig i Nordamerikas fyrreskove. Laktonen blev syntetiseret, og virkningen blev bekræftet i fysiologiske undersøgelser. Det viste sig, at også enkelte beslægtede arter



Parcoblattalakton eller (4Z,11Z)-oxacyclotrideca-4,11-dien-2-on eller kortere (3Z,10Z)-dodecadienolid. Den syntetiske forbindelse kan bruges til at vurdere kakerlakpopulationens størrelse.

reagerede. Forklaringen er, at naturligt feromon er en blanding, hvor parcoblattalakton er hovedkomponenten, men de enkelte arter har varierende mindre bestanddele.

Parcoblatta lata er hovedføden og udgør mere end 50% af diæten for den udryddelsestruede Rødpenslet Flagspætte *Picoides borealis*. For at redde flagspætten søges nu lokaliteter med mange bytteinsekter. Kakerlakmængden kan for de mandliges vedkommende lokkes til en "folketælling" vha. feromonet.

Carsten Christophersen

An unusual macrocyclic lactone sex pheromone of *Parcoblatta lata*, a primary food source of the endangered red-cockaded woodpecker. D. Eliyahu, S. Nojima, R. G. Santangelo, C. Cemeno, S. Carpenter, F. X. Webster, D. J. Kiemle, W. S. Leal og C. Schal. *PNAS* 2011 www.pnas.org/cgi/doi/10.1073/pnas.1111748109

Kunstigt fremstillede nanomaterialer

– nye udfordringer og muligheder

Kunstigt fremstillede nanomaterialer kan have egenskaber, der er svære at forudse, hvilket kan medføre konsekvenser for menneskers sundhed.

Af Henrik Rye Lam og Frank Leck Fotel,
Environment and Toxicology, DHI

Øget politisk fokus, viden, industrielle og økonomiske interesser har accelereret udviklingen og implementeringen af nanomaterialer i hverdagsprodukter, så disse kommer til at besidde nye teknologiske fordele. Nanomaterialer anvendes bl.a. inden for medicin (drug delivery-systemer), fødevarer, fødevareemballage, køkken- og produktionsudstyr, dyrefoder, elektronik, kosmetik, tekstiler, sportsartikler, og i informations- og miljøteknologi. Mere end 800 produkter baseret på nanoteknologi er tilgængelige i Danmark, internationalt og via nettet, hvilket betyder potentiel eksponering af forbrugerne.

En partikels overflade-volumen-forhold stiger ligefrem proportionalt med faldende partikelstørrelse (boks 1). Dette medfører, at en større andel molekyler vil befinde sig i overfladen af nanopartikler end tilfældet er for større partikler. Nanomaterialer kan derfor have andre fysisk-kemiske egenskaber og potentielt højere bioaktivitet og toksicitet.

Der er publiceret mange statusrapporter om nanomaterialers potentielle ricici fra forskellige officielle, internationale organisationer, f.eks. EU, US-FDA, US-EPA, FAO/WHO og OECD, i videnskabelig litteratur og fra forskellige NGO'er. Overordnet set er disse rapporter ikke substantielt forskellige mht. videnskabelige data, diskussion og konklusion vedr. risikovurdering. Denne artikel sætter fokus på vurdering af nanomarialers sundhedsrisiko og gennemgår specielle forhold for nanomaterialer.

Regulering og definition af nanomaterialer

I EU, herunder Danmark, dækkes reguleringen af nanomaterialer anvendt som kemiske stoffer af REACH (Regulation (EC) No 1907/2006) (European Commission 2006). Der er imidlertid ingen international fastsat og accepteret definition. En sådan er stadig under debat.

Ifølge den nyeste definition foreslået af EU-Kommissionen (European Commission, 2011) defineres et nanomateriale som et materiale, der:

- for mindst 50% vedkommende består af partikler med en størrelse på 1-100 nm,
- omfatter partikler i agglomerater eller aggregater, når partiklerne heri ligger i størrelsesintervallet 1-100 nm.

Ifølge Kommissionen bør denne definition tages op til revision inden december 2014.

Nanostørrelse er ekstremt lille. Den er sat i relation til kendte objekter i boks 2. Nanomaterialer kan klassificeres som nanoplader (en dimension i nanoskala), nanofibre (to dimensioner i nanoskala, herunder nanorør) og nanopartikler (tre dimensioner i nanoskala). Herudover er der quantum dots, som er specielle halvleder-nanopartikler med specifikke elektriske og/eller optiske egenskaber.

Boks 1

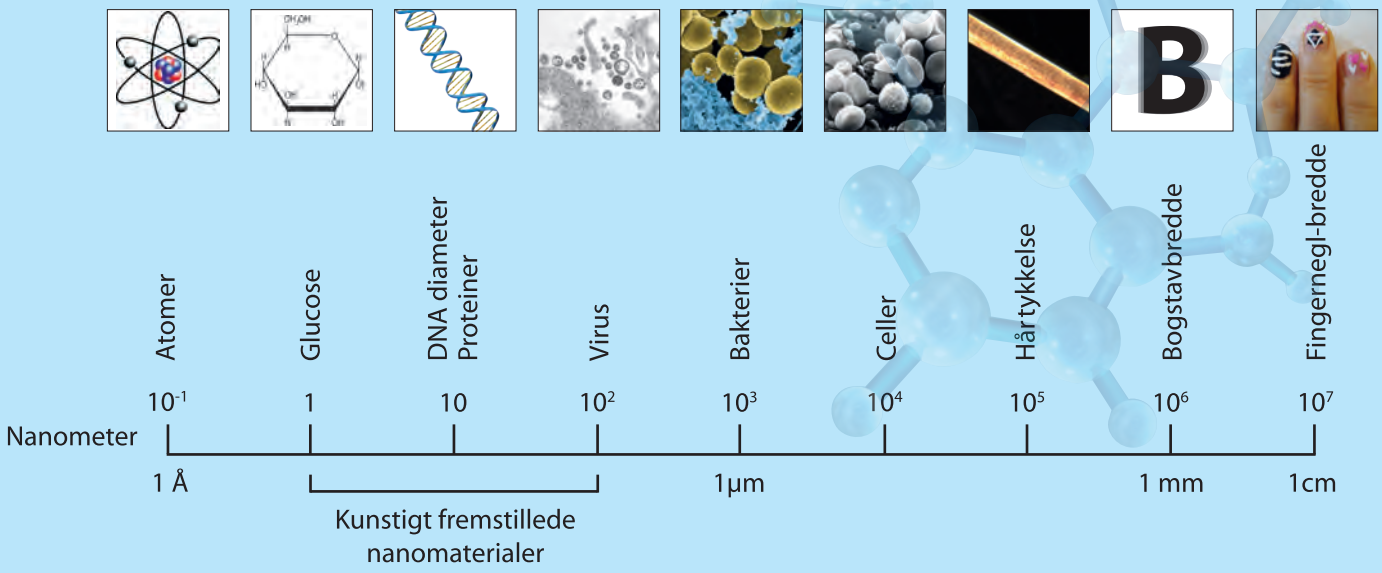
Tabellen viser hvad der sker, når en terning med en kantlængde på 1 cm opdeles i mindre terninger.

Kantlængde i nm	Overflade i nm^2	Volumen i nm^3	Overflade/volumen ratio	Antal partikler	Specifik overflade i nm^2
10^7	$6x10^{14}$	10^{21}	$6x10^{-7}$	1	$6x10^{14}$
10^6	$6x10^{12}$	10^{18}	$6x10^{-6}$	10^3	$6x10^{15}$
10^5	$6x10^{10}$	10^{15}	$6x10^{-5}$	10^6	$6x10^{16}$
10^4	$6x10^8$	10^{12}	$6x10^{-4}$	10^9	$6x10^{17}$
10^3	$6x10^6$	10^9	$6x10^{-3}$	10^{12}	$6x10^{18}$
10^2	$6x10^4$	10^6	$6x10^{-2}$	10^{15}	$6x10^{19}$
10	$6x10^2$	10^3	$6x10^{-1}$	10^{18}	$6x10^{20}$
1	6	1	6	10^{21}	$6x10^{21}$

1 nm = 10^{-9} m; 1 nm^2 = 10^{-18} m^2; 1 nm^3 = 10^{-27} m^2.
En håndboldbane måler typisk 20 m x 40 m = 800 m^2.
Med et samlet volumen på 1 cm^3, en kantlængde på 1 nm og en vægtfylde på 1 g/cm^3 er den specifikke overflade (m^2/g) 6000 m^2 eller svarende til 7,5 håndboldbaner.

Boks 2

Figuren viser størrelsesforholdet mellem nanomaterialer og forskellige kendte objekter.



Basis for risikovurdering

Et stort antal rådgivningskommitteer har anbefalet strategier for risikovurdering af nanomaterialer (f.eks. EFSA, 2009, 2011; SCENIHR, 2007, 2009; SCCP, 2007). Problemet er, at disse strategiers praktiske anvendelighed for indeværende ikke er særlig stor.

Traditionel risikovurdering består af fire niveauer (punkt 1-4 nedenfor) og det er den generelle indstilling, at dette fire-niveau paradigme også er et anvendeligt udgangspunkt for nanomaterialer.

1. Fare-identifikation

Indledningsvis vurderes om et kemikalie har iboende toksiske egenskaber. Det sker ud fra tilgængelige fysisk-kemiske data, biologiske og toksikologiske effekter. Man skal være opmærksom på, at der ikke automatisk kan ekstrapoleres fra viden om en konventionel formulering af et kemikalie til egenskaber for nanomaterialer af samme kemikalie.

Toksicitet: Skønt nanomaterialers specifikke karakteristika *per se* kan give mistanke om, at de kunne udgøre en sundhedsrisiko, så mangler der systematisk, sammenhængende viden herom.

Det er dokumenteret, at nanomaterialer ophobes og kan forårsage toksicitet i laboratoriedyrs lunger, benmarv, lever, milt, hjerte og hjerne ([1], mest omfattende oversigtsartikel). Derfor anses disse organer at udgøre de primære angrebspunkter. Induktion af oxidativt stress, apoptose (programmeret celledød) og inflammatorisk respons er centrale virkningsmekanismer.

Toxikokinetik: De mest sandsynlige eksponeringsveje er inhalation, oral og dermal eksponering. Derefter kan der via blodbanen ske fordeling til organismens organer. Nanomaterialernes fedtopløselighed og bionedbrydelighed er her vigtige faktorer.

Et nanomateriales egenskaber kan have indflydelse på optagelse og fordeling til organer, f.eks. hjernen, via veje og over barrierer, som er umulige for ikke-nanoformen. Der er imidlertid sparsom viden om disse fænomener og om nanomaterialernes nedbrydning i og udskillelse fra organismen.

Manglen på toksikologiske data betyder, at kendskabet til fysisk-kemiske egenskaber er vigtigt for at kunne identificere en eventuel fare.

De vigtigste fysiske parametre er størrelse, form (længde/bredde aspekt ratio), overfladeareal, -morfologi og -topografi, elektrokinetisk interfase potentiale (Zeta-potentiale) og opløselighed.

Nanomaterialer har tendens til at klumpe i agglomerater eller aggregater (holdt sammen af henholdsvis svage og stærke kræfter), hvorved egenskaber relateret til overfladen bliver sløret. Information herom er vigtig for vurdering af materialets toksicitet.

De vigtigste kemiske parametre er strukturformel, molekylstruktur, reaktive sites, forureninger, katalytiske egenskaber og kemisk modifikation til overfladestabilisering.

En detaljeret gennemgang af fysisk-kemiske egenskaber for fareidentifikation kan findes hos [2].

2. Farekarakterisering/dosis-respons-fastlæggelse

Derefter bestemmes relationen mellem eksponeringsniveau og graden af effekt (dosis-respons forhold) og om muligt estimeres et NOAEL (No Observed Adverse Effect Level) til vurdering af risiko.

Dosis-respons-beskrivelse besværliggøres for indeværende af, at der ikke er identificeret en optimal/generel målparameter for eksponering. Sædvanligvis anvendes mg/kg kropsvægt, men for nanomaterialers vedkommende synes overfladeareal, -form og -ladning samt partikelantal at være bedre parametre til beskrivelse af dosis-respons-forhold [1,3].

Toksikologiske undersøgelser og data: Nuværende toksikologiske effektparametre og internationale guideline undersøgelsesmetoder, som er udviklet og anvendt til konventionelle kemikalier, anses også anvendelige for nanomaterialer. Det er dog ikke endeligt bevist og nødvendig modificering er ikke identificeret.

Generelt stammer toksikologiske data om nanomaterialer fra ukoordinerede undersøgelser af forskellig lødighed og kan findes i offentligt tilgængelige databaser (PubMed, TOXNET).

3. Fastsættelse af eksponering
Her bestemmes eksponering af mennesker. Traditionelt kan dette gøres ved at analysere indholdet i f.eks. mad, vand, jord, luft og forbrugsartikler. Imidlertid findes der ikke pålidelige, praktisk anvendelige kvalitative og kvantitative metoder til at dokumentere og kvantificere nanoform i de forskellige matricer, herunder også i væv og vævsvæsker. Nogle enkelte, ekstremt avancerede og dyre teknikker kan anvendes på akademisk niveau, men der kræves en kombination af sådanne (f.eks. field flow fractionation kombineret med LC-MS og elektronmikroskopi af forskellig art).

Indirekte metoder som spørgeundersøgelser, opgørelser over produktion, brug og salg er ikke tilstrækkeligt nøjagtige.

Der er således et generelt problem med at fastsætte et pålideligt eksponeringsniveau.

4. Risiko-karakterisering
Til sidst integreres information fra de foregående tre niveauer til en konklusion omkring risiko under hensyntagen til usikkerheden gennem anvendelse af en usikkerhedsfaktor. Pga. manglende viden om fare og eksponering skal der foretages en case-by-case-vurdering udført af en erfaren ekspert, ofte med anvendelse af en højere usikkerhedsfaktor end traditionelt.

Den højeste risiko vurderes at foreligge ved eksponering for frie nanomaterialer i luft og væsker.

Praktisk risikovurdering

For at opnå praktisk anvendelighed er der foreslået forskellige semikvantitative supplementer/alternativer til konventionel risikokarakterisering. I en lovende arbejdsmiljømodel publiceret i [2] scores to parametre – for henholdsvis fare og eksponering - hver i fire niveauer.

For farealvorlighed bliver der lagt vægt på overfladekemi, partikelform, partikeldiameter, Zeta-potentiale, opløselighed, carcinogenicitet, reprotoksicitet, mutagenicitet, dermal toksicitet, generel toksicitet og toksicitet af ikke-nanoform. Ved scoring af eksponering-scores for sandsynlighed for og omfang af eksponering. Dette er detaljeret beskrevet af [2], hvortil særligt interesserede henvises.

DHI har modificeret og generaliseret dette system til praktisk anvendelse ved sin rådgivning vedrørende sundhedsrisiko forbundet med nanomaterialer.

Risikohåndtering

Risikoen vurderes til at være størst, når der er tale om eksponering ved inhalation af frie nanomaterialer, i aerosoler, sprayprodukter og væsker. Når nanomaterialer er bundet i produkter, anses risikoen for mindre. Generelt bør nanomaterialer leveres, håndteres og anvendes i forbrugsartikler i en ikke støvende form. For indeværende kan der ikke gives andre generelle retningslinjer, men forbehold bør overvejes fra nanomateriale til nanomateriale.

E-mail-adresse
Henrik Rye Lam: hrl@dhigroup.com
Frank Leck Fotel: flf@dhigroup.com

Referencer
1. G. Oberdörster, A. Maynard, K. Donaldson, V. Castranova, J. Fitzpatrick, K. Ausman, J. Carter, B. Karn, W. Kreyling, D. Lai, S.Olin, N. Monteiro-Riviere, D. Warheit, H. Yang, Part. Fibre Toxicol. 2 (2005) 1-35.
2. S.Y. Paik, D.M. Zalk, P. Swuste, Ann. Occup.Hyg. 52 (2008) 419-428.
3. W.S. Cho, R. Duffin, C.A. Poland, S.E. Howie, W. MacNee, M. Bradley, I.L. Megson, K. Donaldson, Environ. Health Perspect. 118 (2010) 1699-1706.

KORT & GODT - NYT & NAVNE

Ny professor med særlige opgaver i fødevareoxidation

Mogens Andersen Larsen er nu udnævnt til professor med særlige opgaver i fødevareoxidation ved Institut for Fødevarevidenskab på Det Natur-og Biovidenskabelige Fakultet ved Københavns Universitet. Mogens Larsen Andersen skal skabe ny viden om de oxidative og antioxidative mekanismer, der har betydning for de fysiske og kemiske egenskaber og ændringer i føde- og drikkevarers kvalitet og holdbarhed.

Ph.d.-forsvar

Den 15. marts forsvarede Celia Johanne Kjærby Hansen sit ph.d.-projekt "Prefrontal Neurotransmission in a Rodent Model of Schizophrenia Based on NMDA Receptor Hypofunction Induced During Neurodevelopment".

Afhandlingen kan ses på Fakultetets bibliotek og på www.farma.ku.dk/phd/defences

Den 18. april forsvarer Mikkel Aastrup Nørreslet sit ph.d.-projekt. The topic is: "Patients as Consumers – A Qualitative Study on Lay Perspectives on the Medical Management of Atopic Dermatitis".

Afhandlingerne kan ses på Fakultetets bibliotek og på www.farma.ku.dk/phd/defences

Ny direktør i Kem-En-Tec A/S

Henrik Tind Nielsen er fra den 1. marts ansat som ny direktør/CCO i Kem-En-Tec A/S. Henrik Tind Nielsen er kemiingeniør og har 23 års erfaring fra laboratorieverdenen, først hos Radiometer, siden Simonsen & Weel og senest som nordisk laboratorieansvarlig hos Mettler-Toledo.

Kem-En-Tec A/S blev dannet i 1987 af en gruppe af danske forskere fra Proteinlaboratoriet på Københavns Universitet. Firmaet er en 100% danskejet bioteknologisk virksomhed, som repræsenterer produkter inden for proteinteknologi, molekylær biologi og miljøforskning.

Ny Managing Director for Zacco Danmark

Nicka Kirstejn er fra 1. maj udnævnt til Managing Director for Zacco Denmark A/S. Nicka tager over fra Hans-Bertil Håkansson, CEO Zacco Group, der har været konstitueret Managing Director siden november 2011.

Nicka Kirstejn har stor erfaring inden for immaterielle rettigheder og IP-professionelle services fra Plougmann & Vingtoft, hvor han har stået i spidsen for deres Life Science og International Sales teams og indgik i ledelsesteamet.

Proteincentret får topforsker som ny direktør

Den 1. april får Novo Nordisk Foundation Center for Protein Research (CPR) på Københavns Universitet ny chef.

Jiri Lukas kommer fra en lederstilling hos Kræftens Bekæmpelse og som chef for Grundforskningsfondens Center for Genotoksisk Stress (GENOTOXIC) og skal være med til at styrke og udbygge proteincentret, der efter det blev etableret i 2007, nu er klar til at skrue helt op for forskningsaktiviteterne.

Gåden om diffusion i plast – diffusionsligningen duer

Det har været en gåde, hvorfor Ficks 2. lov tilsyneladende ikke beskrev diffusion af mindre molekyler som opløsningsmidler, olier og aromastoffer i plast. Læs her hvorfor diffusionsligningen holder.

Af Charles M. Hansen

Ficks 1. lov siger, at massetransporten, F, er lig diffusonskoefficienten gange koncentrationsgradienten. Hvis man begrænser diskussionen til transport i x-retningen i en plan film, fås:

$$F = -D_0(\partial c/\partial x) = -D_0(dc/dx)$$

De foretrukne enheder er: diffusionskoefficienten, D_0, cm^2/s, koncentrationen, c, g/cm^3 og afstanden, x, cm. F er således i $g/(cm^2 \times s)$. Diffusionsligningen, som beskriver koncentrationsændringen med tid, t (Ficks 2. lov), er:

$$\partial c/\partial t = \partial/\partial x(D_0 \partial c/\partial x) = d/dx(D_0 dc/dx)$$

Det er normalt at indføre dimensionsløse størrelser i generaliserede løsninger, hvor både den relative tykkelse og den relative koncentration varierer fra 0 til 1 [1].

$$T = D_0 t/L^2 \qquad X = x/L \qquad C = (c - c_0)/((c_\infty - c_0)$$

L er den frie films tykkelse i cm. Enheden for tiden, t, er sekunder. c_∞ er ligevægtskoncentrationen og c_0 er udgangskoncentrationen, som normalt er nul. T anvendes ofte til at bestemme konstante diffusionskoefficienter. Når det halve af ligevægtsmassen er optaget i absorption, eller tabt i desorption, findes T = 0,049, når diffusionsligningen løses med en konstant diffusionskoefficient, D_0. Herfra kan man bestemme D_0, når man kender L og halveringstiden, $t_{½}$.

$$D_0 = 0{,}049L^2/t_{½}$$

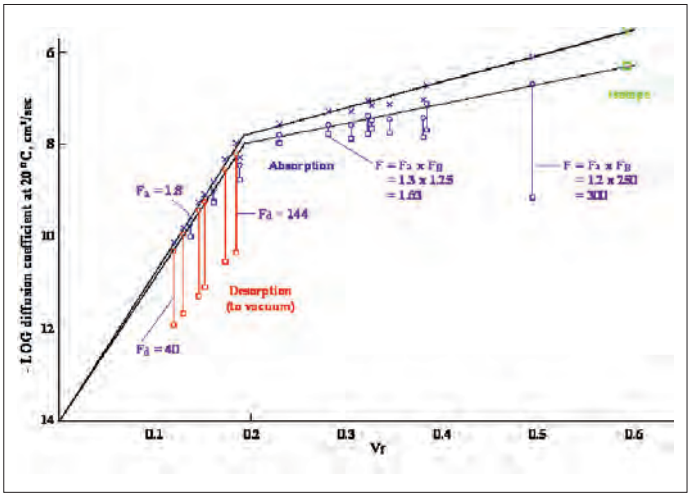
Eksponentielle diffusionskoefficienter

Diffusionskoefficienten varierer eksponentielt med koncentration for mindre molekyler i polymerer. De kan måles korrekt [1-7]. Cranks integrationsmetode [1] er noget mere besværlig end den metode, der er diskuteret i de andre henvisninger. Begge metoder giver samme resultat.

$$D = D_0 e^{kc}$$

Stigningen skyldes den forhøjede blødgørende effekt, som følger med stigende koncentrationer af mindre molekyler. Diffusionen begrænses af polymersegmenter, og med mere fri volumen kan disse nemmere bevæge sig, hvilket tillader det diffunderende stof at bevæge sig hurtigere.

Figur 1 illustrerer den eksponentiale afhængighed [7]. Her ses diffusionskoefficienter for chlorbenzen i poly(vinylacetat)



Figur 1. Diffusionskoefficienter for chlorbenzen i poly(vinylacetat) ved 23°C målt ved absorption og desorption i et kvartsfjederapparat suppleret med isotopmålinger. v_f er volumenfraktionen [6,7].

fra koncentrationen nul (D_0) til 0,6 volumenfraktion [2-7]. Den nederste kurve er relateret til tykkelsen af en tør film og den øverste til tykkelsen af en våd film. Den sidste kan extrapoleres til koefficienten for chlorbenzens selvdiffusion. De målte resultater er fortolket ud fra løsninger til diffusionsligningen for en eksponentiel D, sammenlignet med løsninger for en konstant. Forskellen i halveringstiden er F_a for absorption. For desorption bruges F_d. F_d er transporttiden for 25% af massen. En halvering af massen vil tage måneder/år. F_B er en justering baseret på løsninger til diffusionsligningen, hvor overfladeeffekter har betydning. Disse faktorer er meget større for desorption end for absorption.

De fleste eksperimenter finder sted ved koncentrationer, der er lavere end dem, der tilskrives forsøgene. To områder i figuren deles ved volumenfraktionen, v_f, lig 0,2. Filmen er fast ved lavere koncentrationer. Ved højere koncentrationer bliver den først gummiagtig (en elastomer), for at blive en polymer opløst i væsketilstand.

Massetransport gennem overfladerne

For absorption antages normalt, at overfladekoncentrationen, c_s, straks stiger til ligevægtskoncentrationen c_∞. Når D er konstant, fås en ret linje for absorptionen, afbildet mod kvadratroden af t. Det kaldes normalt "Fickian diffusion", mens andre absorptionsforløb kaldes "non-Fickian" eller "anomalous". Alle forløbene beskrives af diffusionsligningen med en randbetingelse, som beskriver massetransporten gennem overfladerne [8]. Massen,

der transporteres gennem overfladen, F_s, er både lig den som diffunderer ind i filmen, og den som passerer overfladen udefra:

$$-D(dc/dx) = h(c_\infty - c_s) = F_s$$

Massetransportkoefficienten, h i cm/s, omfatter disse overfladeeffekter, uanset årsag. Den dimensionsløse størrelse, B, beskriver betydningen af disse effekter.

$$B = \text{diffusionsmodstand/overflademodstand} = (L/D_0)/(1/h) = hL/D_0$$

h bestemmes ved en ekstrapolation af F til tiden nul:

$$h = [F/(c_\infty - c_s)]_{t=0}$$

Det er muligt at bestemme h ved tilpassede løsninger til diffusionsligningen (curve fitting). Der anvendes et program, som modellerer diffusionen [9]. Resultater vises i de efterfølgende figurer. Figurerne er konstruerede ved at vælge målte eller rimelige værdier for de indgående parametre. Alle koefficienter kan måles og har fysisk betydning. De valgte D'er ses øverst til højre. Koncentrationsgradienterne ses nederst til venstre, og absorptionskurven er nederst til højre.

Hvad skyldes en signifikant overflademodstand?

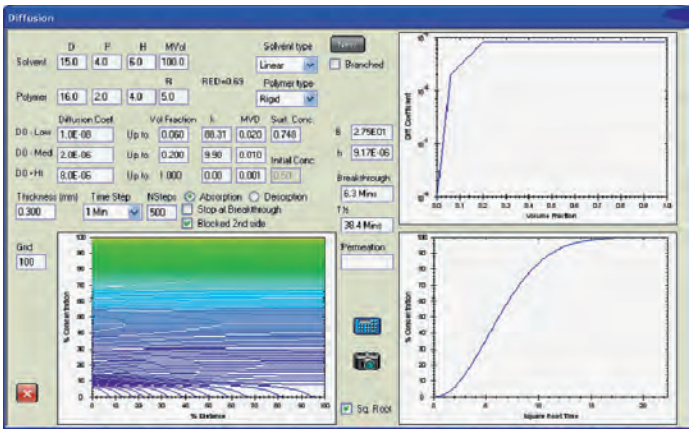
Flere faktorer kan være årsag til en signifikant overfladeeffekt. En er transport til overfladen i absorption, en anden fra overfladen i desorption. Det omfatter diffusion i luft, et stillestående grænselag, vindhastighed, osv. Varmetransport er vigtig i både absorption, hvor kondensationen opvarmer filmen, og i desorption, hvor varmen tilføres, for at fordampningen finder sted. Hvis ikke filmen holder en konstant temperatur bliver transportprocessen forsinket. Disse faktorer er årsagen til S-kurven (figur 2). Den beregnede absorptionskurve stemmer med data for absorption af vand i poly(vinylalkohol) under de samme forhold, som gives i figuren [10]. Her findes der en tilsyneladende tidsforsinkelse. De samme faktorer er måske på spil ved forholdene i figur 3, hvor h er lavere end i figur 2, og man finder absorption, som er lineær med lineartid (Case II). Figur 4 viser et stof, der optages lineært med tiden, efterfulgt af en pludselig stigning i optagelseshastigheden (Super Case II). Det skyldes en markant lavere h-værdi pga. af indgangsmodstanden (entry resistance) [8]. Den er vist for en COC-polymer (Topas 6013 fra Ticona). Nogle opløsningsmidler kan ikke absorberes, selvom andre med sammenlignelige (Hansen) opløselighedsparametre kan, omend med S-curve absorptionsforløb [7,12]. De afviste opløsningsmidler har benzenringe eller anden sterisk hindring, ift. de lineare og mindre molekyler. Det diskuteres i [7,12]. For hver polymer findes molekyler, som har svært ved at finde en velegnet plads i overfladen. De diffunderer senere gennem overfladen og ind i polymeren.

En polymer kan med besvær diffundere i sig selv, men mindre molekyler har ingen problemer. Imellem disse to scenarier er der molekyler, som kun kan absorberes med en vis forsinkelse.

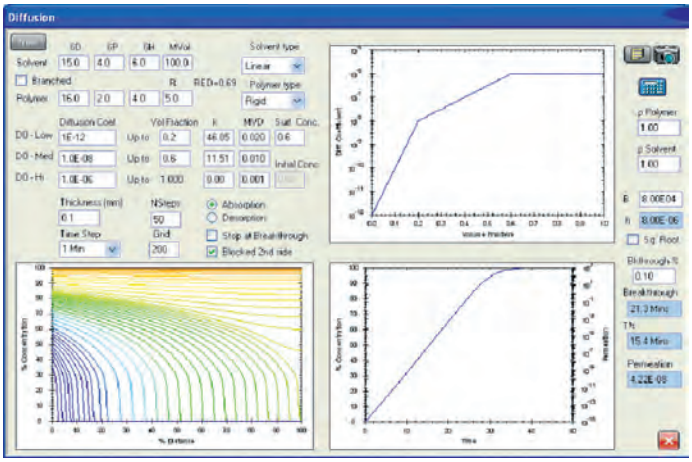
Diskussion

Med et rimeligt valg af målelige parametre beskriver diffusionsligningen forhold, der betragtes som anomalier i absorptionsforløbet. Der er to hovedtyper af løsninger. Nogle tilføjer et led til diffusionsligningen, fordi der opstår en kant af det diffunderende stof, når D'erne varierer over mange dekader. Det kaldes tidsafhængig diffusion eller tidsafhængig opløselighed. Denne ide støttes af mange [13].

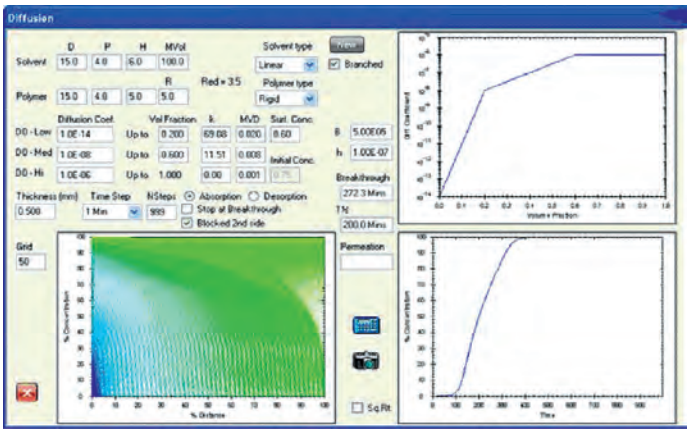
I den anden store gruppe af forklaringer anvendes stress relaxation, tidsafhængig stress relaxation, og lignende udtryk [14-16]. Disse meget matematiske argumentationer har ikke påvist D'er, som er eksponentielt afhængige af koncentrationen. Der findes rapporter for ligevægtspermeation, hvor overfladekoncentrationen ikke når ligevægtskoncentrationen pga. en signifikant overflademodstand for relativt tykke film. Samtidig, når der måles en koncentrationsprofil i tværsnit, findes en eksponentiel afhængighed af D på koncentrationen [17,18]. Ingen af teorierne forklarer anomalierne. Konklusionen er, at diffusionsligningen giver svarene. Den beskriver polymerfilmdannelse, når opløsningsmidler fordamper [19]. Her har man en signifikant overfladeeffekt med betydelige mængder af opløsningsmiddel i overfladen i en første fase, som efterhånden bliver uden betydning, når overfladen tørrer. Diffusionen ved de meget lave koncentrationer, specielt i nærheden af overfladen, dominerer det videre tørringsforløb i en anden fase. Her kan der ikke være tale om stress relaxation eller tidsafhængige D'er, fordi koncentrationerne går i den gale retning.



Figur 2. Simulering af vandabsorption i ubehandlet poly(vinylalkohol)-film. Kurven nederst til højre reproducerer data i [10], og der konstateres en h = 9.2(10)$^{-6}$ cm/s, som er tilpas lav til at være meget signifikant, og som antageligt stammer fra transport til filmens overflade i forsøgsapparatet. Der er kun signifikant diffusionsmodstand for koncentrationer mindre end ca. 0.1 v_f, som det kan ses af koncentrationsgradienterne nederst til venstre.



Figur 3. Simulering af Case II-diffusion. Absorptionskurven er en ret linje som funktion af tid. Det er typisk for Case II-absorption. Massetransportskoefficienten, h = 8(10)$^{-6}$ cm/s, er rimelig, og diffusionskoefficienterne er de samme som i figur 1. Halen findes ofte i litteraturen for denne type absorption [11]. Halen skyldes overfladeeffekter, som det kan ses af koncentrationsgradienterne nederst til venstre. Koncentrationen i overfladen når kun langsomt ligevægtsværdien.



Figur 4. Simulering af Super Case II-absorption. En meget signifikant overflademodstand, sammen med eksponentielle diffusionskoefficienter (de samme som i figur 1), fører til Super Case II-absorption. Her stiger optagelsen hurtigere end lineært med tiden. Se nederst til højre. Denne overraskende adfærd tilskrives en indgangs- eller overfladepassage modstand, som nærmer sig en udelukkelse. h = $1(10)^{-7}$ cm/s er valgt. Det kan dog være en kombination af flere overfladefaktorer, der har den samme matematiske effekt.

Modelleringsprogrammet, [9], finder diffusionskoefficienterne for flere opløsningmidler i gængse typer af beskyttelseshandsker. Permeationsdata fra litteraturen fandt koncentrationsafhængigheden i alle tilfælde. Det kræver ligevægtspermeationshastighed, filmtykkelse, ligevægtsoptag og gennembrudstid [9]. I et tilfælde med acetonitril i Viton-handsker var der en signifikant overfladeeffekt. Uden hensyntagen til dette kunne det hele ikke stemme. En tommelfingerregel for elastomerer er, at D stiger en faktor 10 i det gummiagtige (elastomere) område, for hver 0,15 volumenfraktion-stigning i opløsningsmiddelkoncentrationen. Dette er omtrent samme stigning, som vist i figur 1 for v_f mellem 0,2 og 0,6. Mellem nul og 0,2 v_f findes en stigning på en faktor 10, for hver 0,03 stigning i v_f.

Konklusion

Diffusionsligningen beskriver alle ”anomalier” i absorption, når bare massetransporten til/fra og igennem overfladen tages i betragtning. Diffusionsligningen beskriver også filmdannelsen ved fordampning af opløsningsmidler, både den initiale fase med opløsningsmiddel i overfladen, og den langvarige anden fase kontrolleret af diffusionen gennem polymerfilmen.

E-mail-adresse
Charles M. Hansen: charles.hansen@get2net.dk
www.hansen-solubility.com

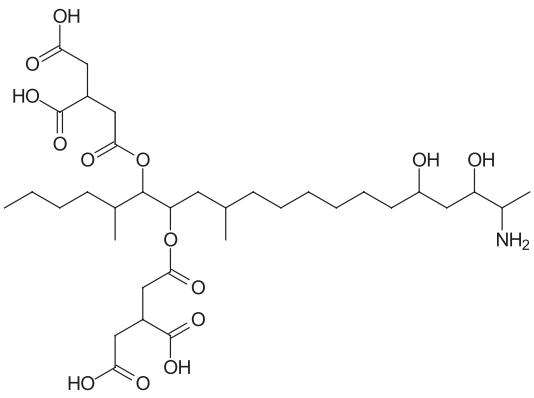
Referencer

1. Crank, J., *The Mathematics of Diffusion*, Oxford University Press, Oxford, 1956.
2. Hansen, C.M., Doctordisputats, *The Three Dimensional Solubility Parameter and Solvent Diffusion Coefficient: Their Importance in Surface Coating Formulation*, Danish Technical Press, Copenhagen, 1967. Denne findes på www.hansen-solubility.com.
3. Hansen, C. M., “The measurement of concentration-dependent diffusion coefficients – the exponential case”, Ind. Eng. Chem. Fundam., Vol.6, No. 4, 609-614 (1967).
4. Hansen, C.M., “Diffusion in polymers”, Polym. Eng. Sci., Vol.20, No.4, 252-258 (1980).
5. Hansen CM., “Diffusion coefficient measurements by solvent absorption in concentrated polymer solutions”, J. Appl. Poly. Sci.,Vol. 26, 3311-3315 (1981).
6. Hansen, C.M., “Aspects of solubility, surfaces, and diffusion in polymers” Prog. Org. Coatings, Vol. 51, No.1, 55-66 (2004).
7. Hansen, C.M., *Hansen Solubility Parameters: A User’s Handbook*, 2nd Ed., CRC Press, Boca Raton FL, 2007, Chapter 16.
8. Hansen, C.M. “The significance of the surface condition in solutions to the diffusion equation: explaining “anomalous” sigmoidal, Case II, and Super Case II absorption behavior”, Eur. Polym. J., Vol. 46, 651-662 (2010).
9. Abbott, S., Hansen, C.M., and Yamamoto, H., *Hansen Solubility Parameters in Practice*, 3rd Ed., 2010. www.hansen-solubilty.com.
10. Hasimi A., Stavropoulou, K.G., Papadokostaki, M., and Sanopoulou, M., “Transport of water in polyvinyl alcohol films: Effect of thermal treatment and chemical crosslinking” Eur. Polym. J., Vol.44, 4098-4107 (2008).
11. Jacques, C.H.M., Hopfenberg, H.B., og Stannett, V. i *Permeability of Plastic Films and Coatings*. Hopfenberg ,H.B., Ed., New York: Plenum Press; 1974, p.73.
12. Nielsen, T.B., and Hansen, C.M., “Significance of surface resistance in absorption by polymers”, Ind. Eng. Chem. Res., Vol. 44, No. 11, 3959-3965 (2005).
13. Petropoulos, J.H., “Interpretation of anomalous diffusion sorption kinetics in polymer-penetrant systems in terms of a time-dependent solubility coefficient” J. Poly. Sci. Polym. Phys. Ed., Vol. 22, 1885-1900 (1984).
14. Petropoulos, J.H., and Rousis, P.P., “Anomalous diffusion of good and poor solvents or swelling agents in amorphous polymers” J. Polym. Sci. Part C, Vol. 22, 917-26 (1969).
15. Petropoulos, J.H., “Application of the transverse differential swelling stress model to the interpretation of Case II kinetics” J. Polym. Sci. Polym. Phys. Vol.22, 183-189 (1984).
16. Sanopoulou, M. and Petropoulos, J.H., “Systematic analysis and model interpretation of micromolecular non-Fickian sorption kinetics in polymer films” Macromolecules, Vol. 34, 1400-1410 (2001).
17. Kim, S.N., and Kammermeyer, K., “Actual concentration profiles in membrane permeation” Separation Sci., Vol. 5, 679-697 (1970).
18. Hwang, S.T., and Kammermeyer K., “Effect of thickness on permeability” in *Permeability of Plastic Films and Coatings*, Hopfenberg, H.B. Ed., Plenum Press, New York, 1974, 197-205.
19. Hansen C.M., “A mathematical description of film drying by solvent evaporation” J. Oil. Colour Chemists’ Assn., Vol.51, No. 1, 27-43 (1968).

Nyt om …
… ”Muggen vin” med mycotoxiner i

Mycotoxiner som aflatoxin og ochratoxin har i mange år været kendt i talrige levnedsmidler som figner, jordnødder, druer og kaffe, fordi der har været svampe på de oprindelige planter, de har også været påvist i vin. En gruppe fra Center for Mikrobiel Bioteknologi på DTU har nu påvist en anden gruppe mycotoxiner, fumonisiner, som stammer fra svampen *Aspergillus niger*, der har været på druerne. Fumonisinerne er vist at kunne give lever- og nyreskader hos dyr. Man har fundet fumonisiner ikke blot i billige vine; men også i dyrere. Toppen af de undersøgte vine er en californisk Zinfandel fra 1998 med 25 µg/L efterfulgt af en rumænsk Pinot Noir fra 2006 med 20 µg/L ellers indeholder de fleste 1-7 µg/L.

Carl Th.



Fumonisin B_2

Widespread occurrence of the Mycotoxin Fumonisin B_2 in Wine, *Journal of Agricultural and Food Chemistry* 2010, DOI:10.1021/jf904520t

PARAFAC, NMR og lipoproteiner

PARAFAC er særlig velegnet til analyse af fluorescens-data, men metoden er også relevant for andre datastrukturer. Her vises, hvordan PARAFAC kan anvendes til at modellere diffusionsvægtede NMR-data med henblik på lipoprotein-profilering af blod.

Af Søren Balling Engelsen, Rasmus Bro, Institut for Fødevarevidenskab, Københavns Universitet og Lars Nørgaard, FOSS

Personer som lider af type II diabetes og fedme har en forøget risiko for alvorlige sygdomme. Risikoen for udvikling af hjertekarsygdomme har vist sig at være relateret til fordelingen af kolesterol og triglycerider i forskellige typer af lipoproteiner i blodet. Det er derfor vigtigt at være i stand til at måle og overvåge lipoproteinprofiler både mht. at diagnosticere individuel risiko samt for ernæringsstudier og ved afprøvninger af nye medikamenter.

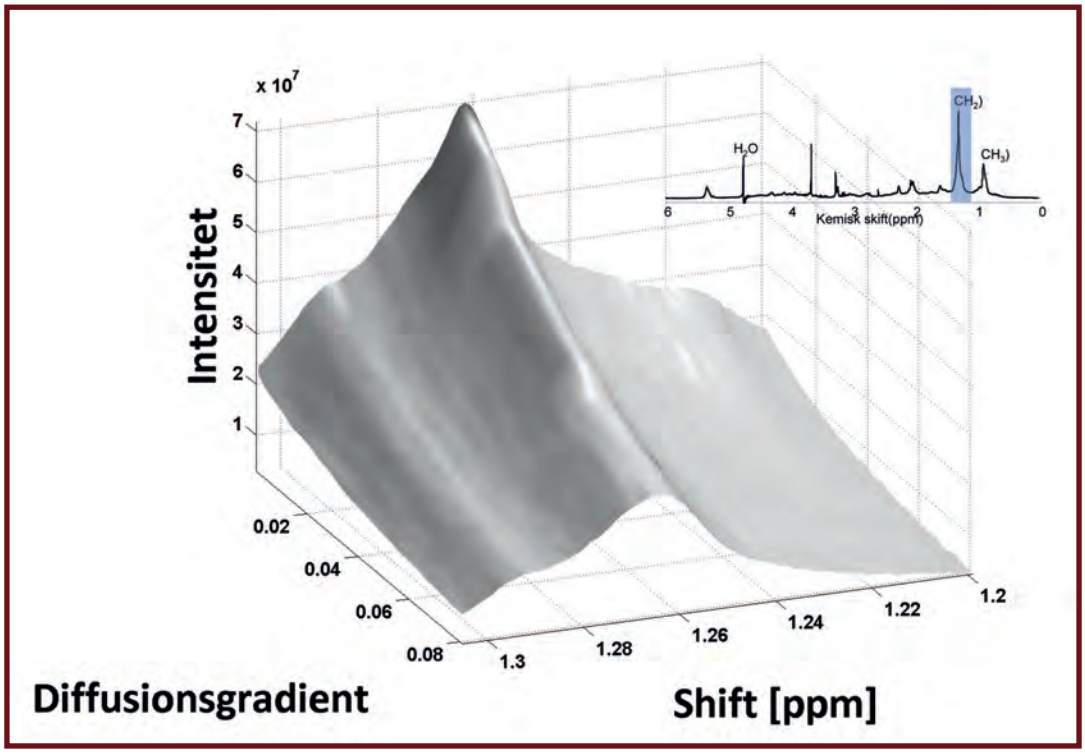
Lipoproteiner er micellulære triglycerid- og kolesterol-transportmolekyler, der kan inddeles i fire hovedgrupper baseret på deres densitet. Denne opdeling er delvist empirisk baseret og strækker sig fra Very-Low-Density-Lipoproteins (VLDL; mellem 0,940 og 1,006 mg/mL) over Intermediate-Density-Lipoproteins (IDL; mellem 1,006 og 1,019 mg/mL), Low-Density-Lipoproteins (LDL; mellem 1,019 og 1,063 mg/mL) og High-Density-Lipoproteins (HDL; 1,063 and 1,21 mg/mL).

Ultracentrifugering er den etablerede referencemetode til separation og dermed kvantificering af lipoproteiner.

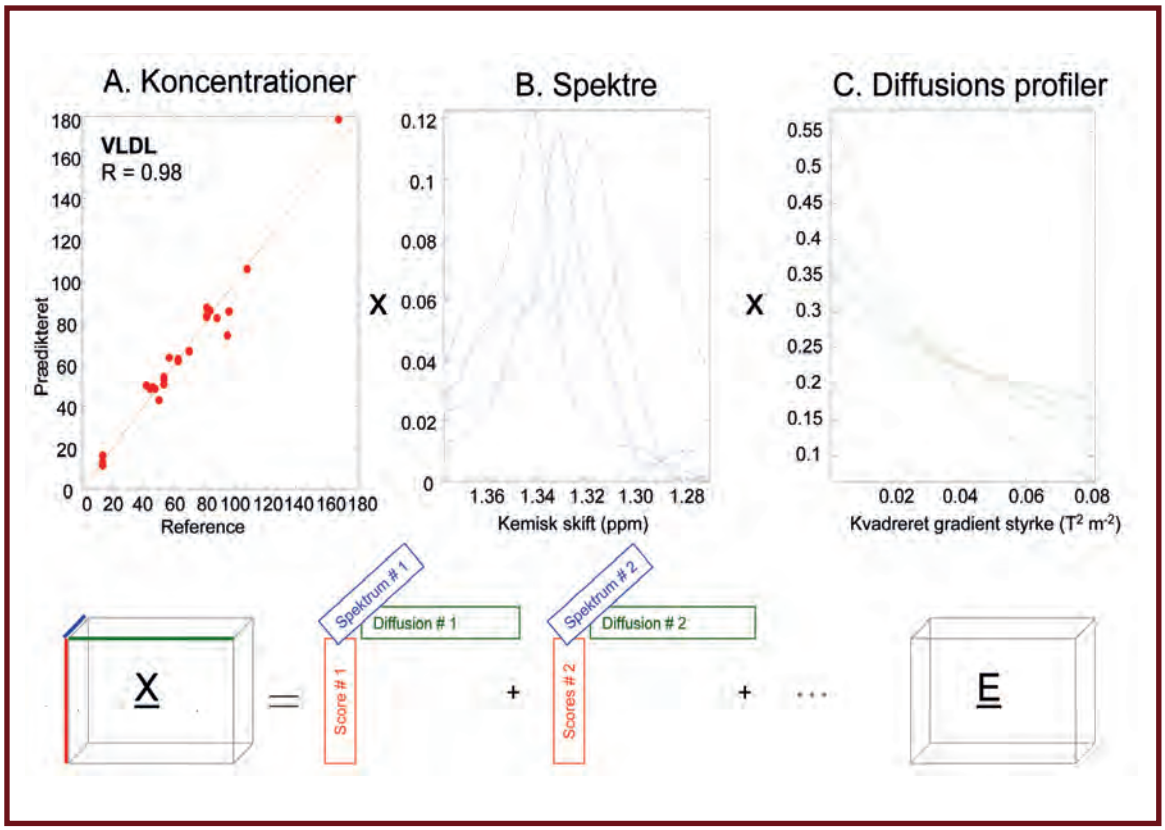
Det har imidlertid vist sig, at blodets lipoproteiner også kan måles med NMR-spektroskopi. De forskellige densiteter af lipoproteinerne giver anledning til små ændringer i deres lokale magnetiske felter og tilsvarende små skift i deres resonansfrekvenser. De resulterende spektre er meget komplekse og stærkt overlappende. Kvantificering af de forskellige lipoprotein-typer kan bedst foretages med kalibrering via f.eks. Partial Least Squares regression (PLS) til en referencemetode.

Til lipoprotein-profilering kan man imidlertid også udnytte en anden teknik i moderne NMR-spektroskopi nemlig diffusions-vægtet, såkaldt diffusionsediteret, NMR. Ved denne metode optages NMR-spektre som en funktion af molekylernes diffusionsegenskaber ved at påtrykke en gradvist stigende feltgradient. Molekyler, der diffunderer hurtigt, vil således ikke kunne refokuseres 100%, hvorved deres signal vil mindskes. Figur 1 viser et udsnit af et diffusionsediteret NMR-spektrum af en blodprøve.

Som det ses, har sådanne NMR-data to dimensioner: en kemisk skift-retning og en gradient/diffusionsretning. I lipoprotein-tilfældet vil de forskellige lipoproteiner diffundere forskelligt pga. af deres forskellige størrelser.



Figur 1. Et eksempel på 2D diffusionsediteret NMR-spektrum af methylensignalet. "Insert" øverst viser det normale 1D NMR-spektrum.



Figur 2. PARAFAC-modellen af diffusionsediterede NMR-spektre af plasmaprøver med fire komponenter. Nederst et skematisk diagram af PARAFAC-modellen. (A) eksempel på en korrelation mellem koncentrations profilen af en PARAFAC-komponent og VLDL. (B) de fire spektrale PARAFAC loadings og (C) diffusionsprofiler af de fire PARAFAC-komponenter.

Data

Data stammer fra et studie præsenteret i [1], hvor blodprøver fra 17 frivillige med en stor variation i totalt triglycerid-indhold blev udvalgt for at spænde over en stor variation i lipoprotein-subfraktioner. Blodet blev tilsat EDTA og centrifugeret. Ved ultracentrifugering blev lipoprotein-hovedfraktionerne VLDL, IDL, LDL og HDL separeret fra plasmaet og kvantificeret.

Plasmaprøverne blev præpareret i 5 mm NMR-rør, og de diffusionsediterede protonspektre blev optaget ved 318 K på et Bruker DRX500 ved 11,7 T.

PARAFAC

Når data fra komplekse blandinger modelleres med PARAFAC, behøver man ikke at antage noget om den spektrale form eller fordeling. De eneste antagelser, der er nødvendige for en PARAFAC-model, er

1. at data har lav rang og er trilinære, dvs. kan beskrives som et produkt af tre komponent-matricer,
2. at koncentrationerne og spektrene af de forskellige analytter er forskellige. Dette krav kan endda blødes op under nogle omstændigheder [2].

PARAFAC-løsningen bestemmes alene på grundlag af det valgte antal komponenter og de målte data.

Når man eksempelvis laver en model af området omkring kemisk skift 1,3, som afspejler CH_2, så finder man at fire PARAFAC-komponenter er passende.

Denne PARAFAC-model er illustreret i figur 2. I virkeligheden er der ikke tale om, at lipidernes spektre består af en kombination af fire "rene" spektre. I stedet er der i realiteten tale om et kontinuum af spektre. Imidlertid tilsiger PARAFAC-modellen, at disse målte spektre i praksis kan modelleres med fire arketype spektre.

Lipoprotein-fraktionerne er oprindeligt defineret ud fra ultracentrifugering og validiteten af PARAFAC-modellen kan vises ved, at scoreværdierne kan anvendes til at prædiktere eksempelvis VLDL-koncentration som vist i figuren.

I dette tilfælde kan man også validere PARAFAC-modellen ved at beregne diffusionskoefficienter og hydrodynamisk radius ud fra de fire resolverede komponenters diffusionsprofiler (figur 2). Det gøres ved at benytte Stoke-Einstein-relationen for diffusion af en sfærisk partikel. Resultatet giver hydrodynamiske radier på henholdsvis 29, 18, 12 og 6 nm, som er i god overensstemmelse med de i literaturen opgivne radius-intervaller [40-17,5], [17,5-12,5], [12,5-9] og [6-2,5] nm for VLDL, IDL, LDL og HDL [3]. Dette er et godt eksempel på ekstern fysisk-kemisk validering af en multivariat kemometrisk model.

Outro

I det viste eksempel tog det tre timer at optage diffusionsediterede NMR-spektre. Selvom det stadig er langt hurtigere og meget mere effektivt og mindre prøveforbrugende (mikroliter fremfor deciliter) end lipoprotein-bestemmelse ved ultracentrifugering, så kan denne situation nemt optimeres ved at optage med færre skanninger og ved færre gradientniveauer. Faktisk fungerer PARAFAC-modellen under ideelle omstændigheder helt ned til to gradientniveauer.

Referencer

1. M. Dyrby, M. Peteresen, A. D. Whittaker, L. Lambert, L. Nørgaard, R. Bro, & S. B. Engelsen. Analysis of lipoproteins using 2D diffusion-edited NMR spectroscopy and multi-way chemometrics. Anal.Chim.Acta 531:209-216, 2005.
2. N. D. Sidiropoulos, R. Bro. On the Uniqueness of Multilinear Decomposition of N-way Arrays. J.Chemom. 14 (3):229-239, 2000.
3. P.B. Duell, D.R. Illingworth, W.E. Connor, in: P. Felig, L.A. Frohman (Eds.), Endocrinology and Metabolism, 4th ed., McGraw-Hill, New York, 2001, p. 993.

Forsendelser under cryogene forhold

I den farmaceutiske og bioteknologiske industri bliver flere og flere biologiske prøver, væv eller genetisk modificerede blodprodukter sendt under cryogene betingelser (-196°C).

Temperaturovervågning er her afgørende, da det giver bevis for, at der under transporten har været de nødvendige betingelser. Eksempelvis ingen tab af flydende nitrogen eller vakuum forårsaget af en beskadiget cryo-container.

ELPRO præsenterer Libero TE1-P, der kan overvåge temperatur ned til -200°C. Dataloggeren kan automatisk producere en evalueringsrapport, ved at man indsætter den i USB-porten på en pc.

Fordelen ved overvågning af cryo-forsendelser er, at de transporterede varer kan tages i brug umiddelbart efter modtagelsen på bestemmelsesstedet. Med Libero er modtageren informeret via displayet, OK/ALARM-tilstand, og kan

få en evalueringsrapport i PDF-format som overholder FDA21CFR11 uden brug af software.

Bare send låget (Cork) af din cryogenbeholder til os. Monter beslaget, der holder PDF-loggeren på toppen af låget, og før sonden igennem et lille hul ind til forsendelsens dampfaseområde. Hele overvågningsløsningen er godt beskyttet af den ydre emballage af forsendelsen.

Yderligere information:
Elpro Nordic ApS
Tlf. 45 17 41 60
www.pdf-datalogger.com

New spectrophotometer

Jenway introduces the new Genova Plus life science UV/visible spectrophotometer. It features icon-driven software with soft key navigation and the ability to save results and methods to a USB memory stick. With dedicated modes for DNA/RNA analysis, pre-programmed methods for protein analysis plus standard spectrophotometer functions, the user-friendly Genova Plus is optimised for applications in biochemistry, forensic science, genetics, biotechnology and other life science laboratories.

The instrument incorporates a large graphical display built into the lid of the unit. Powerful icon-driven software and soft-key navigation ensure rapid analysis and ease of use. A large internal memory enables over 300 methods to be stored and for added convenience results and methods can be saved to a USB memory stick.

In addition to dedicated modes for DNA/RNA analysis, protein assays, nucleic acid purity and optical density, the versatile instrument can be used as a standard spectrophotometer with measurement modes for photometrics, concentration, multi-wavelength, spectrum scanning, quantitation and kinetics.

For determination of nucleic acid and protein concentrations in very small sample volumes, down to 0.7 µl, it is compatible with the TrayCell ultra-micro cuvette. It is covered by a 3-year warranty which includes the xenon lamp.

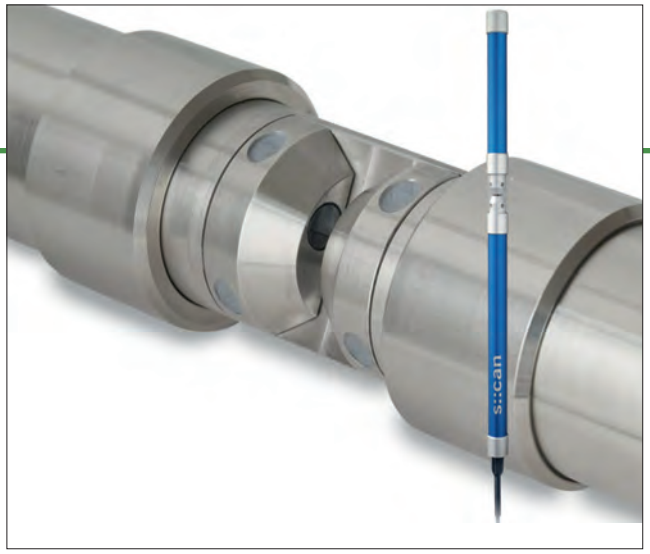
More information:
Bibby Scientific Limited
Tel: +44 (0) 1785 812121
E-mail:
info@bibby-scientific.com
www.bibby-scientific.com

Stationær gasalarm-central

GasDetect præsenterer Oldham´s stationære kontroller MX43. Den fås nu også med digitalt RS485 Modbus output og kan dermed kobles direkte sammen med et SCADA-system til visuel kontrol, hvilket giver øget overblik.

Yderligere information:
GasDetect
Tlf. 42 42 50 30
Søren Torsbjerg Møller
E-mail: stm@gasdetect.dk
www.gasdetect.dk

Spektrometrisk vandkvalitetsmåling



Måling og overvågning af vandkvalitet på ethvert niveau, fra ultrarent vand over drikkevand til husholdnings- eller industrispildevand, kan nu foretages kontinuerligt med det nyudviklede UV-VIS-spektrofotometriske udstyr fra S::CAN.

Det robuste spektrometer tåler total neddykning i vandet. De forskellige sensorer, som er operationsklare straks efter udpakningen, bruges til måling af enkeltkomponenter eller samlet forurening fra en sum af komponenter med stor nøjagtighed og pålidelighed.

Sensorerne neddyppes i mediet, der skal måles på, og holdes frit for pumper eller andre bevægelige dele. Systemet er stort set vedligeholdelsesfrit, ligesom der, ud over sensorerne, ikke er udskiftelige dele. Mange sensorer er multifunktionelle.

F.eks. kan Spectro::lyzer-sonden måle både NO_3/COD/BOD/TOC/FTU/TSS, mens f.eks. ledningsevne, pH, opløst ilt eller klorid måles med separate sonder.

Sonderne kommer med en langtidsholdbar, stabil fabrikskalibrering og et højeffektivt trykluftrensesystem.

Yderligere information:
Aquasense
Tlf. 42 42 50 30
E-mail: stm@aquasense.dk
www.aquasense.dk

Optimer maskindrift

Machineperformance.net præsenterer en anderledes tilgang til tilstandsbaseret drift af maskiner. Konceptet er at slutte internettet til driftsovervågningen og levere virksomhedens driftsdata på nettet i en cloud-baseret løsning.

Cloud-baserede løsninger benyttes allerede til f.eks. netbanker, facebook og g-mail og er en velkendt og afprøvet metode til at simplificere rapportering og optimere adgangen. Følsomme drifts- og vedligeholdsinformationer forlader ikke fabrikken.

Der kræves kun en lav startinvestering og en abonnementsaftale, hvor man kun betaler for de ydelser, der er behov for.

En overskuelig grafik giver et godt overblik over drifttilstanden af maskiner.

Yderligere information:
MACHINEPERFORMANCENET
Tlf. 32 21 02 00
Allan de Neergaard: 21 25 53 18
E-mail: info@machineperformance.net
www.machineperformance.net

Nyt navn

Sanyo er blevet medlem af Panasonic Biomedical Group. Det betyder, at hele produktprogrammet af ultralavetemperatur frysere samt udstyr til inkubation fra Sanyo pr. 1. april skiftede navn til Panasonic.

Der ændres ikke på teknologien samt den europæiske salgs- og serviceorganisation. Det betyder, at der i DFA Instruments A/S fortsat tilbydes driftsikre produkter inkluderet support.

Ud over navneskiftet introducerer Panasonic netop nu en -86°C skabsfryser med markedets laveste energiforbrug i sin klasse.

Den nye Model MDF-U76V har et forbrug på 13,77 kWh i døgnet, hvilket betyder en besparelse på op til 25% på elforbruget. Vælger man samme model i en vandkølet version, kan energiforbruget nedsættes med yderligere 20%. Læs mere om disse nyheder på www.dfa.dk.

Yderligere information:
DFA Instruments A/S
Tlf. 72 48 84 31
E-mail: ak@dfa.dk
www.dfa.dk

Leverandørregister

Analyse

B

Brugt analyse- og laboratorieudstyr

HAW Consulting
Bregnerødvej 132 B
3460 Birkerød
Tlf. 45 82 77 10 - Fax 45 82 77 09
haw@hawconsulting.dk
www.hawconsulting.dk
Analyse- og laboratorieudstyr, nyt og brugt

E

Elektronmikroskoper

DFA A/S/NIKON
Produktionsvej 26
2600 Glostrup
Tlf. 72 48 84 31 - Fax 72 48 84 33
ak@dfa.dk
www.dfa.dk

F

FTIR-udstyr

Bruker Optics Scandinavia AB
Vallgatan 5
SE-17067 Solna
Tlf. +46 8 655 25 30 -
Fax +46 8 655 25 99
www.bruker.com/nordic

G

Gasdetektorer

Dräger Safety Danmark A/S
Generatorvej 6 B
2730 Herlev
Tlf. 44 50 00 00 - Fax 44 50 00 01
draeger-safety.dk@draeger.com
www.draeger.dk

Gaskromatografer

Bruker Daltonics Scandinavia AB
Vallgatan 5
SE-17067 Solna
Tlf. +46 8 655 25 15
sd@bruker.se
www.bdal.de

Gasser

AGA A/S
Vermlandsgade 55
2300 København S
Tlf. 32 83 66 00 - Fax 32 83 66 01
www.aga.dk
Specialgasser

GC/MS/MS

Bruker Daltonics Scandinavia AB
Vallgatan 5
SE-17067 Solna
Tlf. +46 8 655 25 15
sd@bruker.se
www.bdal.de

I

ICP-MS

Bruker Daltonics Scandinavia AB
Vallgatan 5
SE-17067 Solna
Tlf. +46 8 655 25 15
sd@bruker.se
www.bdal.de

L

Laboratoriearmaturer

BROEN LAB DIVISION
Skovvej 30
5610 Assens
Tlf. 64 71 20 95 - Fax 64 71 24 76
lab@broen.com
www.broen.com

M

Massespektrometre

Bruker Daltonics Scandinavia AB
Vallgatan 5
SE-17067 Solna
Tlf. +45 20 21 54 44 -
Fax +45 47 31 74 44
www.bruker.com/nordic

Mikroskoper

Brock & Michelsen A/S
Blokken 76
3460 Birkerød
Tlf. 70 15 70 15 - Fax 70 25 70 25
info@zeiss.dk
www.zeiss.dk

DFA A/S/NIKON
Produktionsvej 26
2600 Glostrup
Tlf. 72 48 84 31 - Fax 72 48 84 33
ak@dfa.dk
www.dfa.dk

N

NIR-analyse/-udstyr

Bruker Optics Scandinavia AB
Vallgatan 5
SE-17067 Solna
Tlf. +46 8 655 25 30 -
Fax +46 8 655 25 99
www.bruker.com/nordic

N

NMR-analyseudstyr

Bruker BioSpin Scandinavia AB
Vallgatan 5
SE-17067 Solna
Tlf. +46 8 655 25 10
- Fax +46 8 655 25 99
www.bruker.com/nordic

O

Opvaskemaskiner

KEN A/S
Bøgebjergvej 60, Brobyværk
5672 Broby
Tlf. 62 63 10 91
www.ken.dk

Miele A/S PROFESSIONAL
Erhvervsvej 2
2600 Glostrup
Tlf. 43 27 11 00 - Fax 43 27 15 09
professional@miele.dk
www.miele.dk

Produktion

E

Etikettering

LSS Etikettering A/S
Normansvej 8
8920 Randers NV
Tlf. 70 20 25 00 - Fax 70 20 10 44
info@lss-dk.com
www.lss-dk.com

F

Faremærkning

pekema BarCom as
Hørkær 24
2730 Herlev
Tlf. 44 92 62 00 - Fax 44 92 53 00
barcom@pekema.dk
www.barcom.dk
Lovpligtig "GHS-CLP" faremærkning af produkter og prøver - med BarSafe™ etiketsystemet

G

Gasser

A Member of The Linde Group | AGA

AGA A/S
Vermlandsgade 55
2300 København S
Tlf. 32 83 66 00 - Fax 32 83 66 01
www.aga.dk

V

Vægte

CBH Vægte aps
Vonsildvej 207
6000 Kolding
Tlf. 75 56 73 10 - Fax 75 56 73 20
info@cbh-vaegte.dk
www.cbh-vaegte.dk

Å

Åndedrætsværn

Dräger

Dräger Safety Danmark A/S
Generatorvej 6 B
2730 Herlev
Tlf. 44 50 00 00 - Fax 44 50 00 01
draeger-safety.dk@draeger.com
www.draeger.dk

Service & miljø

P

Patenter

Awapatent A/S
Rigensgade 11
1316 København K
Tlf. 43 99 55 11 - Fax 43 99 99 11
kobenhavn@awapatent.com
www.awapatent.com

CHAS.HUDE

Chas. Hude A/S
H.C. Andersens Boulevard 33
1780 København V
Tlf. 33 19 34 00 - Fax 33 19 35 00
chashude@chashude.com
www.chashude.dk

LARSEN & BIRKEHOLM A/S
SKANDINAVISK PATENTBUREAU

Larsen & Birkeholm A/S
Skandinavisk Patentbureau
Banegårdspladsen 1
1570 København V
Tlf. 33 13 09 30 - Fax 33 13 09 34
adm@lbpatent.dk
www.lbpatent.com

R

Rådgivning

Awapatent A/S
Rigensgade 11
1316 København K
Tlf. 43 99 55 11 - Fax 43 99 99 11
kobenhavn@awapatent.com
www.awapatent.com

Er dit firma ikke allerede med i Dansk Kemi's leverandørregister så vær med fra næste nummer!

Det er målet med denne oversigt at give vore læsere mulighed for hurtigt at finde frem til de relevante leverandører af produkter og tjenesteydelser inden for kemien og beslægtede områder.

Priser på optagelse:

Pr. produkt: Kr. 230,-
Farvelogo: Kr. 220,-
Ekstra linjer: Kr. 60,-

Alle priser er pr. stk. pr. udgave ekskl. moms.

Vælg selv det eller de produkter, du ønsker at stå under. Vi opretter gerne et nyt produkt, hvis ikke der er et egnet i forvejen.

Optagelsen løber for et kalenderår ad gangen, men faktureres halvårligt.

Kontakt:
Heidi Thode,
Tlf. 43 24 26 62, direkte
E-mail: ht@techmedia.dk

Priseksempel på optagelse:

Fagbladsforlag

TechMedia

TechMedia A/S
Naverland 35
2600 Glostrup
Tlf. 43 24 26 28 - Fax 43 24 26 26
info@techmedia.dk
www.techmedia.dk
Nordens største fagbladsforlag

Samlet pris for ovenstående optagelse er kr. 510,-.

Alle priser er pr. stk. pr. udgave ekskl. moms

Statistik og kemometri hånd i hånd

Tirsdag den 8. maj 2012 kl. 13.00 – 17.00
DGI-byen, Tietgensgade 65, KøbenhavnV, lokale 10
(benyt indgangen til DGI-byens hotel)

Anvendelsen af kemometri (multivariabel dataanalyse) i industrien er stærkt stigende, bl.a. i QA laboratorier, R&D og inden for procesovervågning. Klassisk statistik kan med fordel anvendes sammen med kemometrien til vurdering og præsentation af resultater, dels fordi den klassiske statistik giver en anden forståelse for modellerne, dels fordi statistik og statistiske termer er velkendte og accepterede generelt i industrien. På dette møde vil der blive præsenteret teori og vist eksempler på anvendelse af statistiske metoder på kemometriske modeller.

Program

13.00	Velkomst *Lars P. Houmøller (Arla Foods Ingredients & DSK kontaktudvalg)*
13.10	Usikkerhedsbudget i multivariat kalibrering *Morten Arendt Rasmussen (Institut for Fødevarevidenskab, KU)*
13.40	Modelovervågning af at-line FT-IR kalibreringer *Marianne Toft (Novozymes)*
14.10	Pause med kaffe/kage
14.40	Multivariate Process Control with Autocorrelated Data *Murat Kulahci (DTU Informatik)*
15.10	Latente strukturer i brødfremstilling: Baseret på en virkelig case. *Helle Vium & Niels Christensen (Danisco)*
15.50	Pause
16.00	Ækvivalenstestning, limits of agreement, basal statistik: (Hvordan) kan vi bruge det i kemometri? *Per Bruun Brockhoff (DTU Informatik)*
16.30	Afslutning/evaluering

Pris: 250 kr.; studerende gratis.
Tilmelding på www.ida.dk, moede@ida.dk eller tlf. 33 18 48 18 – arrangement nr. 125862

Mødet arrangeres af Dansk Selskab for Kemometri (DSK) under K-Gruppen.

7. Danish Conference on Biotechnology and Molecular Biology

May 24 – 25, 2012 at Hotel Munkebjerg, Vejle

Microbial Communities in Biotechnology, Health and Biomedicine

It is just in the past few decades that the importance of microbial communities has been realized with numerous implications for life on Earth. New methods allowing investigations of complex microbial systems have revealed an extremely high diversity of microorganisms with novel properties and complicated interactions. A deeper understanding of microbial communities will allow us to cope better with the large challenges in regard to climate change, water management, renewable energy, recovery of resources, and public health.
There will be a poster session as well as a commercial exhibition
Regular fees: Members of DBS or DSBMB: 3200 Kr. Non-members 3700 Kr.
Reduced fees for Ph.D. and Master Students: Members of DBS or DSBMB 1600, Kr. Non-members 2100 Kr.
One-day participants 800 Kr.

Full program and registration: www.biokemi.org

Secretariat: Birgitte Magnér Egeberg, Phone: 33 18 46 46, e-mail: bme@ida.dk
Organisers: Dansk Bioteknologisk Selskab, Biokemisk Forening & BioPeople

14. Nordiske Filtreringssymposium

Det 14. Nordiske Filtreringssymposium afholdes den 30.-31. august 2012 i Utzon Centeret, Aalborg

Symposiet er for såvel akademikere som industrifolk med interesse i filtrering og separationsprocesser. Der vil være indlæg fra hele norden - denne gang med særligt fokus på separation i forbindelse med bioraffinaderier og renseanlæg. Derudover vil der være en hel sektion omhandlende keramiske membraner.
Hovedtalere:
Professor E. Drioli fra Department of Chemical Engineering and ITM-CNR at University of Calabria, i Italien vil holde et foredrag om ”*Membrane assisted crystallisation*”
Jaap Vente fra ECN, Petten fra Holland vil holde et foredrag om ”*Hybrid Ceramic Nanosieves: Stabilizing Nanopores with Organic Links*”
Symposiet arrangeres af ”The Nordic Filtration Society” i samarbejde med Ingeniørforeningen, IDA og Aalborg Universitet.
Yderligere information vil blive tilgængelig i bladet samt på websiden www.nordicfiltration.aau.dk.

dsk.2012

Hotel Nyborg Strand, 1.-2. november 2012

Dansk Selskab for Kemometri (DSK) under Kemiingeniørgruppen holder for tredje gang den nationale danske kemometrikonference, dsk.2012.
Konferencen vil byde på interessante foredrag på alle niveauer fra applikationer til avanceret kemometri.
Derudover vil der blive fokuseret på at gentage DSKs populære nætværksaktiviteter, såsom dsk.dating, samt de ph.d. studerendes mulighed for at profilere sig i konkurrencen dsk.faktor.
Flere informationer om dsk.2012 fås på hjemmesiden www.dsk2012.dk.

Kemiingeniørgruppen

www.kgruppen.dk - E-mail: bme@ida.dk

Interessegruppen for Gasanalyse og Kemiingeniørgruppen i IDA IGAS

afholder temamødet

Mikrobiel luftforurening

Torsdag den 24. maj 2012 kl. 13.00-17.00
Auditoriet, NFA (Det Nationale Forskningscenter for Arbejdsmiljø), Lersø Parkallé 105, DK-2100 København Ø

Alle er velkomne

Der er mange kilder til luftbårne mikroorganismer og de påvirker luftkvalitet, menneskers helbred og sågar det globale klima. Mikrobiel luftforurening er et område der ikke har særlig stor fokus som forskningsområde, til trods for at stort set alle mennesker hvert år bliver smittet med forkølelse, maveonder eller influenza via luftbåren smitte. Desuden bliver mange udsat for luftbåren smittefare via deres arbejde og fugtskadede huse indebærer en sundhedsrisiko. Alt i alt betyder det mange tusinde arbejdstimer hvert år går tabt. Vi har inviteret en række fremtrædende forskere og miljøprofessionelle til at belyse problemstillingerne og den nuværende viden på området.

13.00 Introduktion, *Per Axel Clausen, NFA*
13.05 Regulering af mikrobiel luftforurening
Susanne Høyer, Arbejdstilsynet
13.25 Recent results on indoor microbial pollution
National Institute for Health and Welfare, Finland
13.55 Organic dust toxicity (ODTS) blandt arbejdere på et græsrensningsanlæg
Anne Mette Madsen, NFA
14.15 Årstidsvariationen af luftbårne mikroorganismer i nogle danske boliger, *Mika Frankel, NFA*

14.35 Kaffepause

15.05 Eksponering for norovirus på kloakrensnings-anlæg, *Anne Mette Madsen, NFA*
15.15 Luftfugtighedens betydning for spredning af influenza virus, *Peder Wolkoff, NFA*
15.35 Måling af luftbårne mikroorganismer
Lisbet Larsen, Teknologisk Institut
15.55 Svampesporer og -partikler i indeklimaet
Birgitte Andersen, DTU
16.15 A new instrument for instantaneous measurement of airborne microorganisms
Patrik Bengtsson, TSI
16.35 Diskussion, *Per Axel Clausen, NFA*
17.00 Afslutning

Der er ingen mødeafgift. Tilmelding foretages *senest torsdag den 17. maj 2012* til

Per Axel Clausen
NFA (Det Nationale Forskningscenter for Arbejdsmiljø)
Lersø Parkallé 105
2100 København Ø
Tlf. 39 16 52 73
E-mail: pac@nrcwe.dk

Karsten Fuglsang
FORCE Technology
Park Allé 345
2605 Brøndby
Tlf. 4326 7148,
E-mail: kfu@force.dk

Eller til
IDAs mødetilmelding på:
tlf. 38 18 48 18
eller på:
www.ida.dk
Arr. nr. 125777

Mødekalender (4) 2012

24.-25. 5. 2012 Kemiingeniørgruppen, 7. Danish Conference on Biotechnology and Molecular Biology, Hotel Munkebjerg Vejle, Se dk 2012 (1/2, 3).
8.5. 2012 Kemiingeniørgruppen, Statistik og kemometri hånd i hånd, DGI-byen, København V. Se dk 2012 (4)
24.5. 2012 Interessegruppen for Gasanalyse og Kemiingeniørgruppen, temamødet Mikrobiel luftforurening, Auditoriet NFA, København Ø. Se dk 2012 (4)
7.6. 2012 Kemisk Forening, Årsmøde, SDU Odense.
30.-31.8. 2012 Kemiingeniørgruppen, 14. Nordiske Filtreringssymposium, Utzon Centret, Aalborg. Se dk 2011 (6/7, 12) dk2012 (3).
l.-2.11. 2012 Dansk Selskab for Kemometri (DSK), Kemiingeniørgruppen, Hotel Nyborg Strand. Se dk 2012 (4)

Kemiingeniørgruppen, Ingeniørforeningen i Danmark,
Kalvebod Brygge 31-33, 1780 København V
Tlf.: 33 18 48 48, Birgitte Magnér-Egebjerg. Fax.: 33 18 48 87

BRUKER

Bruker Daltonics

Maximum Performance

... at Maximum Speed

Analytical Power and Speed for:

- **Fast chromatography applications**
- **Trace analysis studies**
- **Small molecule ID**
- **Metabolomics**
- **Quantitative proteomics**

**** >40.000 FWHM resolution ** <1 ppm mass accuracy ** 20 spectra/second ****

It`s time to embrace a new concept of what is possible with a mass spectrometer. The maXis Ultra High Resolution (UHR) - TOF is the only tandem mass spectrometer able to provide maximum information at the very highest speeds delivered by latest Ultra Performance Liquid Chromatography. No other mass spectrometer is better equipped to acquire definitive data for small molecule identification, proteomics and metabolomics applications.

Contact us now and get involved with the maXis at www.bdal.com/maxis

think forward

UHR-TOF MS

Afsender: TechMedia A/S, Naverland 35, DK-2600 Glostrup