

Sidste nyt om din branche fra TechMedia

Kemisk Forening - Kemiingeniørgruppen

# dansk kemi

Nummer 5 - Maj 2012 / 93. årgang

Har planter næse?

Skadesvirkning ved  
forbrænding af  
forskellige brændsler



## Med laboratorietillæg - ta' ud og gem

***børn med kræft  
har brug for din hjælp***

For 2500 kr. om året kan jeres virksomhed gøre en forskel.  
Læs mere om støttemuligheder på:

***boernecancerfonden.dk***

**børne | cancer | fonden**

# INDHOLD



- 1** Forsidebillede: DDT har stor betydning for bl.a. bekæmpelse af malaria, men har også mange negative følgevirkninger, derfor leder man nu efter alternativer. Fotograf Karin Frykman.
- 6** Planter reagerer på alarmstoffer fra inficerede artsfæller ved at aktivere deres eget forsvar mod mikrober.
- 8** Aarhus Universitet har oprettet en ny 2-årig deltids masteruddannelse for erhvervsaktive. Uddannelsen fokuserer bl.a. på problemløsning inden for risikohåndtering og -styring.
- 10** Industrilisten over kemikalieklassificeringer er offentliggjort. Få svarene på hvordan listen skal læses og bruges.
- 12** Kumarin er smagsgiver i kanel, men kan man få for meget kumarin med kosten?
- 14** Vandige ekstrakter af den euforiserende plante kava har været anvendt på øer i Stillehavet gennem årtusinder uden at forårsage alvorlige bivirkninger. Men i Vesten har brug af kava medført leverskader. Hvorfor?
- 17** Laboratorietillæg med artikler relateret til analytisk kemi og med beskrivelse af forskelligt laboratorieudstyr. Fra side 27-31 vises et bredt udvalg af laboratorieudstyr.
- 20** Praktisk snilde, faglig forståelse og evnen til selv at programmere software har kendetegnet Christian Janfelts karriere. Han har bl.a. udviklet en DESI-imaging-ionkilde, der kan lave billeder af prøver med en opløsning ned til 100  $\mu\text{m}$ .
- 34** Skadesvirkning ved forbrænding af forskellige brændsler. I artiklen sammenlignes naturgas, træ og halm.
- 37** Kort & Godt – Nyt & Navne. Hvad er der sket i branchen siden sidst.
- 38** DDT har stor betydning for bl.a. bekæmpelse af malaria, men har også mange negative følgevirkninger, derfor leder man nu efter alternativer.
- 40** 100 år med røntgendiffraktion.
- 43** PARAFAC-modellen kan give unik indsigt i data, når den virker. Desværre har PARAFAC også nogle helt specielle matematiske egenskaber, som gør, at den ikke altid giver brugbare resultater.
- 47** Læs mere om de nyeste arrangementer fra Kemisk Forening (side 37) og Kemiingeniørgruppen i IDA.

## 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  
kbb@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 Brancheorganisation)  
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:

Elsie 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.dansk kemi.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

### Layout:

Susanne Amby

### Tryk:

KLS Grafisk Hus A/S

Trykt på miljøvenligt  
papir med vegetabiliske  
miljøfarver.

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

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 mate-  
riale, 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



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.





## HiChrom HPLC kolonner forhandles i Danmark af MD Scientific

Vi leverer >95% af  
verdens førende  
mærker af  
HPLC kolonner





” Samarbejdet med biologi giver mange spændende muligheder for kemifaget i gymnasiet, f.eks. i områder som medicinalkemi, bioteknologi og grøn og bæredygtig kemi

## Hvor er gymnasiefaget kemi på vej hen?

Det korte svar er, at gymnasiefaget kemi flytter mod et tættere samarbejde med biologisk orienterede fag i gymnasieskolen, hvor den tidligere stærkere tilknytning til fysik mindskes, men heldigvis uden at forsvinde. Dette ses både i kemifagets indhold, i undervisernes fagkombinationer og i elevernes valg af studieretninger. Valgene trækker mere mod kombinationer med biologi og kemi, hvilket forsøgsfaget bioteknologi viser.

Bioteknologi blev i 2008 indført som forsøgsfag i gymnasieskolen. Faget tilbydes både til elever i det almene gymnasium (stx) og htx. Forsøgsfaget er knyttet sammen med matematik på A-niveau og fysik på B-niveau, og det har et væsentligt kemi-fagligt indhold. Det sikrer, at en studieretning med forsøgsfaget bioteknologi giver eleverne adgang til de samme videregående uddannelser, som den klassiske kombination af matematik A, fysik B og kemi B. Bioteknologi blev bl.a. indført, fordi man ønskede at undersøge, hvorvidt fagområdet kunne få flere unge, især piger, til at vælge naturvidenskab i gymnasiet. Forsøget bliver snart evalueret. Men foreløbige resultater tyder ikke på, at der er sket et ryk mod naturvidenskab via bioteknologi, selvom mange elever har valgt faget. På trods af den store tilslutning til studieretningen med bioteknologi, så tyder elevernes valg mere på, at der sker en flytning af elever mellem de naturvidenskabelige studieretninger. Det tyder heller ikke på, at der er kommet flere piger inden for naturvidenskab, men nok at de er flyttet mod kombinationen af biologi og kemi. Dette kommer ikke som en overraskelse for de fleste gymnasielærere i kemi og biologi, da det svarer til deres erfaringer. En undersøgelse af sidste sommers skriftlige prøver i kemi bekræfter den vurdering, at mange piger gerne vælger kemi. Så selvom bioteknologifaget ikke ser ud til for alvor at rykke ved elevernes valg af naturvidenskab i gymnasiet, så viser fagets popularitet dog, at der er stor interesse blandt gymnasieeleverne for at arbejde med samspillet mellem biologi og kemi. Det samme gælder for mange gymnasier og gymnasielærere, som har lagt en stor indsats i at udvikle faget bioteknologi.

Kemi har generelt klaret sig pænt i gymnasiet efter reformen i 2005, selvom kemi A-niveau i stx har en vigende tendens. Generelt samler elevernes valg af kemifaget sig på B-niveauet. Vi ved endnu ikke, hvordan mønstret i elevernes valg vil påvirkes af forsøgsfaget bioteknologi, selvom det kan forventes, at både kemi B og A bliver påvirket.

Samarbejdet med biologi giver mange spændende muligheder for kemifaget i gymnasiet, f.eks. i områder som medicinalkemi, bioteknologi og grøn og bæredygtig kemi. Men det er samtidig meget vigtigt at fastholde samarbejdet med fysikfaget og udvikle samarbejdet med det fjerde naturvidenskabelige fag i gymnasiet, naturgeografi. Så selvom kemi i gymnasieskolen er lillebror til de store naturvidenskabelige fag biologi og fysik, så har kemi fortsat en central rolle og muligheder i gymnasieskolens naturvidenskabelige profil.

Keld Nielsen, keld.nielsen@uvm.dk

Fagkonsulent i kemi og bioteknologi i de gymnasiale uddannelser

AWARDED THE PITTCON 2012  
EDITORS' GOLD AWARD FOR BEST NEW PRODUCT

waters.com

# INTRODUCING ACQUITY UPC<sup>2</sup>

YOUR TOUGHEST SEPARATIONS.  
NOW, EXPONENTIALLY EASIER.



## UltraPerformance Convergence Chromatography.™

With the Waters ACQUITY UPC<sup>2</sup>™ System, and the emergence of a new category of separation science, you can finally prepare, analyze and understand compounds that were simply too complex for traditional LC and GC technology. Now, by going beyond LC and GC techniques, you're opening the door to meeting completely new challenges. Making the seemingly impossible, a matter of routine. This is ACQUITY UPC<sup>2</sup>. A world of exponential possibilities. **To discover what's possible in your world, visit [waters.com/UPC2](http://waters.com/UPC2).**

Waters A/S Tel: 46598080 [www.waters.com/denmark](http://www.waters.com/denmark)

Waters

THE SCIENCE OF WHAT'S POSSIBLE.™

Pharmaceutical & Life Sciences | Food | Environmental | Clinical | Chemical Materials

©2012 Waters Corporation. Waters, UltraPerformance Convergence Chromatography, ACQUITY UPC<sup>2</sup> and The Science of What's Possible are trademarks of Waters Corporation.



Planter meddeler sig til hinanden vha. kemiske signaler.  
Foto: Carsten Christophersen.

## Har planter næse?

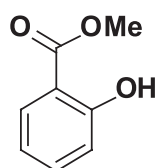
Planter reagerer på alarmstoffer fra inficerede artsfæller ved at aktivere deres eget forsvar mod mikrober.

Af Carsten Christophersen, carsten@techmedia.dk

Limabønner *Phaseolus lunatus* reagerer på infektion med bakterier, f.eks. den patogene *Pseudomonas syringae*, ved at udsende flygtige forbindelser. De opfattes af naboplanterne og udløser en aktivering af forsvarssystemer og resistens. Forløbet minder om dyrs reaktion på dufte, der tit fører til ændret adfærd.

### Hurtigt versus langsomt

I modsætning til dyr, der reagerer på duftstoffer i løbet af sekunder, så tager planter sig god tid – ofte mange timer. Med nonanal i koncentrationer på 1 og 8 mg/L i luften reagerer plan-



Methylsalicylat har en behagelig lugt og smag og bruges i parfume og i bolsjer. Den er flygtig med et kogepunkt på 220-224°C og en opløselighed i vand på omkring 1 g i 1,5 L. Molekylvægten er 152.

## ■ Kommunikation

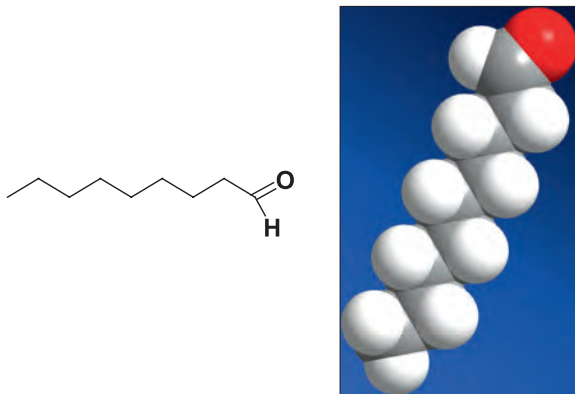
Sunde planter forøger deres forsvar mod planteædere, sygdomsfremkaldere eller fysisk stress, når de udsættes for flygtige organiske forbindelser fra stressede naboplanter. Signalerne virker kun på korte afstande mellem 30 og 100 cm. De må derfor hurtigt nedbrydes eller fortyndes til uvirksomme koncentrationer. Det er da også karakteristisk, at virkningen hurtigt ophæves, når der er ozon til stede. Det skyldes utvivlsomt, at signalstofferne fjernes oxidativt.

terne i løbet af 6 timer med en betydelig hæmning af infektioner. Samme resultat findes efter 24 timers påvirkning. Men der er ingen forskel på virkningen af de to koncentrationer.

I tilfældet methylsalicylat giver 6 timers påvirkning med 4 mg/L kun en forsvindende effekt, men der er en klar forøgelse, når koncentrationen hæves til 8 og 80 mg/L. Efter 24 timer observeres en meget høj effekt, men den er uafhængig af koncentrationen af den oprindelige stimulering.

## De har ingen næse

Hvordan planten opfatter signalstofferne, og hvordan de omformes til interne signaler er helt ukendt. Den mangler et organ, der svarer til en næse, men man kunne sige, at hele planten er en næse. Forbindelserne koncentrerer i bladene, hvor de beskytter mod angribere. Men de stimulerer samtidig planten til at starte produktionen af identiske signalmolekyler og derfor er det sandsynligt, at de biokemiske reaktioner startes af en receptorpåvirkning i stil med den, der ligger til grund for lugtesansen.



Nonanal eller pelargonaldehyd dufter som rosenolie og bruges i parfumer og fødevarer. Aldehydet koger ved 190-192°C og har en molekylvægt på 142.

## Forklaring søges

Både nonanal og methylsalicylat virker antibiotisk. Da planten reagerer på forbindelserne ved selv at starte produktionen af dem så stiger koncentrationen, hvilket resulterer i en antimikrobiel effekt. Det er nok ikke hele forklaringen, men der mangler yderligere undersøgelser. Planterne inficeres først med bakterier fem dage efter eksponering, hvor de oprindelige signalstoffer må antages at være omsat. Bakteriemængden i bladet bestemmes først fire dage senere.

### Kilde

Volatile Dose and Exposure Time Impact Perception in Neighboring Plants P. S. Girón-Calva, J. Molina-Torres og M. Heil. *Journal of Chemical Ecology* 2012, Bind 38, Side 226-228. doi:10.1007/s.10886-012-0072-3.

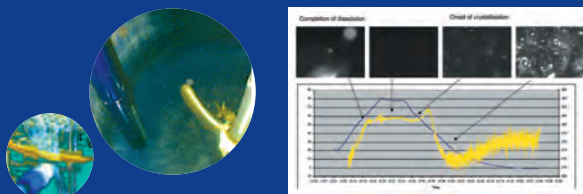
# SE IND I PROCESSEN

med TOMOGRAFI systemer fra



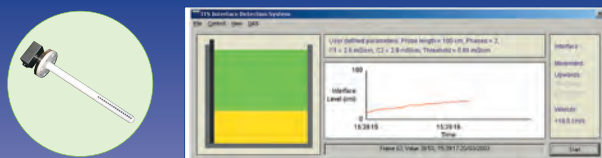
## REACTIVE SYSTEMS

CRYSTALLISATION



## SEPARATION

INTERFACE DETECTION



# LISC Analytical

Naverland 2 · DK-2600 Glostrup  
+45 3990 3905 · sales@liscotech.dk  
[www.liscotech.dk](http://www.liscotech.dk)

# Forskningsbaseret risiko- håndtering af miljø- og sundhedsproblemer

Aarhus Universitet har oprettet en ny 2-årig deltids masteruddannelse for erhvervsaktive. Uddannelsen fokuserer på kompetencer baseret på tværfaglig, forskningsbaseret viden og på problemløsning inden for risikohåndtering og -styring.

Af Peter Borgen Sørensen<sup>1</sup>, Hans Sanderson<sup>2</sup>,  
Anne Jensen<sup>2</sup>, Aarhus Universitet

<sup>1</sup>Institut for Bioscience, <sup>2</sup>Institut for Miljøvidenskab

I den moderne verden stilles der stigende krav til effektiv håndtering af risici i forbindelse med produktion, formulering, salg, m.v. af kemiske produkter og ingredienser fra myndigheder, kunder og handelspartnere. Håndtering af risici er en kompleks og tværfaglig opgave, der både kræver en tilbundsgående viden om de eksterne og interne krav til risikohåndtering samt en dyb forståelse af de tekniske krav. Som en vigtig komponent skal risikoanalyse kommunikeres og omsættes til praksis i hverdagen.

Denne udfordring tager Aarhus Universitet op med lanceringen af en ny master, Master i Risikostyring inden for Miljø og Sundhed. I private virksomheder berører udfordringen kommunikation om og ledelse af virksomhedens risikostyring inden for miljø og sundhed samt udvikling og dokumentation af virksomhedens sociale og miljømæssige bæredygtigheds- og CSR-strategier. I offentligt regi er masteren relevant for ansatte i de institutioner – såsom styrelser, kommuner, regioner og miljøcentre – der varetager og administrerer risikostyring af aktiviteter, der er under offentlig kontrol, samt indgår som godkendende myndighed af produkter og aktiviteter.

I konsulentbranchen er masteren relevant for personer, der udarbejder og vurderer VVM-redegørelser samt andre anvisninger og vurderinger til sikring af miljø og sundhed inkl. egentlig risikovurdering. Tillige er masteren relevant for personer i de interesse- og brancheforeninger, som inddrages for fagligt at påvirke beslutningsprocesser omkring beskyttelse af miljø og sundhed.

For at opfylde reguleringsmæssige og tekniske krav til risikoanalyse, og samtidig optimere nytteværdien af risikoanalyse ved f.eks. produktudvikling kan en efteruddannelse på masterniveau således være en god mulighed. Her kan tværfaglig synergi mellem forskellige forskningsområder bruges til at løse de problemstillinger, man beskæftiger sig med på arbejdet.

## Hvad får man kompetencer inden for?

Risikostyring af miljø og sundhed er en voksende udfordring, der som samlet disciplin fordeler sig over en række fagområder og derfor ikke passer særligt godt i ind i den konventionelle opdeling af faggrænser på universiteterne. Masteren opfylder behovet for at koble og formidle forskningsbaseret viden i en tværfaglig synergi. Begrebet risikostyring har mest været brugt inden for

økonomi og projektstyring, men denne master anvender begrebet til området miljø og sundhed og øger deltagernes kompetencer til at:

1. Identificere og vurdere mulige skadelige effekter på miljø og sundhed.
2. Vurdere og beregne sandsynligheden for at disse effekter indtræffer.
3. Identificere og prioritere tiltag, der kan modvirke, at skadelige effekter indtræffer.
4. Planlægge risikorelaterede aktiviteter, under hensyn til risikokommunikation og forskelle i risikopfattelser mellem grupper og kulturer.
5. Håndtere skader, der er opstået, herunder minimere skaderne og medtænke samfundets reaktion på skaderne.

Masteren er en værktøjsuddannelse, der vægter en god brugbar forståelse af vigtige metodiske sammenhænge. Uddannelsen indrager en lang række konkrete problemstillinger inden for miljø og sundhed. Det kan f.eks. være problemer med prioritering, udvikling og godkendelse af produkter samt med planlægning og godkendelse af aktiviteter og projekter i både offentlig og privat regi. Undervisningen vil tage udgangspunkt i kursisternes egne arbejdsmæssige forhold. Det skal sikre relevans og at alle betydelige og potentielt betydelige miljøeffekter vil indgå i masteren. Det dækker over både globale og lokale effekter på alle hovedtyper af økosystemer (terrestrisk, ferskvand, marin).

Miljøeffekterne kan skyldes frigivelse af stoffer, nano-materialer, genmodificerede organismer eller direkte påvirkning ved menneskelig aktivitet. Sidstnævnte inkluderer miljømæssige konsekvenser af produktion, forbrug, ulykker og udnyttelse af naturressourcer. Sundhed er inddraget i det omfang, at det omgivende nær- og fjernmiljø bidrager til en trussel mod menneskers sundhed. Disse trusler dækker over utilsigtet eksponering med potentielt farlige (fysisk/kemisk/radioaktive) stoffer og nano-materialer fra luft, jord, vand, mad og forbrugerprodukter.

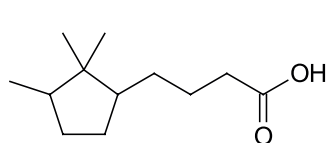
Masteren udbydes med studiestart i forårssemestret 2013 i Emdrup på Aarhus University Campus Emdrup, læs mere om masteruddannelsen på: <http://scitech.au.dk/mrms/>

E-mail-adresse

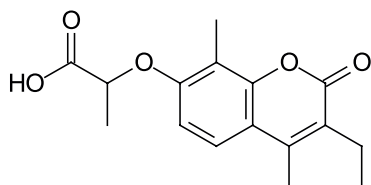
Peter Borgen Sørensen: [pbs@dmu.dk](mailto:pbs@dmu.dk)

## Nyt om... ... Blokering af bitter smag

Af sundhedsmæssige årsager ønsker man ofte at formindske mængden af kulhydrater i føden. Den søde smag er imidlertid for de fleste af os nødvendig, for at vi nyder maden. Man forsøger at reducere indholdet af kulhydrater ved at tilsætte



GV3727



GV3616

kunstige sødestoffer, der ikke giver et kaloriebidrag til føden, men blot en sød smag. Uheldigvis har de fleste kunstige sødemidler en bitter bismag. Man forsøger derfor at finde stoffer, der kan blokere de receptorer, vi bruger til at opfatte en bitter smag. Den multinationale koncern for duft- og smagsstoffer Givaudan har lanceret to nye stoffer GIV3727 og GIV3616, der blokerer 6 af de 27 kendte bitterreceptorer hos mennesker. De er i stand til at reducere den bitre smag hos fire



af de almindeligt anvendte sødemidler saccharin, aspartam, sucralose og acesulfam-K. Man håber på, at disse to stoffer vil blive godkendt til anvendelse i fødemidler i slutningen af året.

*Carl Th.*

Blocking Bitterness *Chemical and Engineering News*, 2011 (14), side 36.

# FOOD TECH

Processing & Packaging  
13.-15. november 2012



### Book din stand nu

Kontakt John Jensen  
Tlf.: +45 9926 9938  
E-mail: [jj@mch.dk](mailto:jj@mch.dk)



# Industrilisten over kemikalie-klassificeringer er offentliggjort

Hvordan læses og bruges listen. Få svarene her.

Af Lars Bugge, Chymeia

Industrilisten gør det muligt at søge klassificeringer (dvs. angivelse af farligheden) på samtlige farlige stoffer i EU. Derfor har listen været ventet med længsel. Spændingen blev udløst, da listen blev lanceret den 13. februar i år. Det skete efter at deadline for offentliggørelsen var blevet udskudt flere gange.

Det var ikke en nyhed, der trak overskrifter i den landsdækkende presse. Men for alle der arbejder med kemikaliesikkerhed, er listen et stort fremskridt. Tidligere kunne man nemlig kun søge klassificeringer på de stoffer, der var på "Den harmoniserede liste" eller "Listen over farlige stoffer". Men med Industrilisten er det nu muligt også at søge CLP-klassificeringer på selvklassificerede stoffer. Det gør arbejdet lettere for mange, og på sigt vil det sandsynligvis medføre et kvalitetsløft i stoffernes klassificering.

## Regulerede/harmoniserede stoffer og selvklassificerede stoffer

Vores viden om farligheden af et stof kan komme to steder fra. Det kan være på den harmoniserede lovgivningsliste (= CLP-versionen af "Listen over farlige stoffer"), og man taler om en harmoniseret klassificering. Men hvis et stof ikke er omfattet direkte af denne lovgivning, så skal vores viden om kemikaliets farlighed komme fra leverandøren. Disse stoffer kalder man selvklassificerede. De defineres som alle andre end de regulerede/harmoniserede stoffer. Selvklassificeringen skal foretages af den, der bringer stoffet på markedet i EU (dvs. producent eller importør til EU).

Mange har prøvet at indkøbe samme kemikalie fra to forskellige leverandører for at opdage, at det samme stof blev leveret med to forskellige klassificeringer. Det kan man opleve som en fejl, men faktisk kan det blot være udtryk for, at de to leverandører har forskellige data til rådighed for at vurdere farligheden.

Typisk har stoffer en objektiv farlighed. Den kender vi bare ikke. Derfor må vi forsøge at afdække farligheden via forsøg og teori. Hvis to leverandører har forskellige data til rådighed, så vil det være svært at sige hvem, der har ret, uden at fortage et større studie af de forskellige forsøg. Det er grunden til, at man i kemikalielovgivningen (REACH) stiller krav til, at leverandører skal dele data i de såkaldte SIEF-grupper. Denne forpligtelse til at dele data og blive enige om en fælles klassificering gælder for de fleste registreringspligtige (høj-tonnage) stoffer.

## Hvordan læses et opslag i Industrilisten

I Industrilisten kan man finde både harmoniserede og selvklassificerede stoffer. Hvis man foretager et opslag på et lovgivningsreguleret stof, vil man få et resultat, der er delt i to. Øverst vises den klassificering, der er på den harmoniserede liste. Nedenunder vises alle notificeringer på det pågældende stof.

De notificerede klassificeringer er ikke altid lig med den har-

moniserede klassificering i CLP-forordningen. Det skyldes, at den harmoniserede liste ikke er en facitliste, men kun en minimumsliste. Hvis man har data, der underbygger en strengere klassificering, så skal den strenge klassificering notificeres. Man må dog ikke klassificere mildere, selvom man har data, der kan underbygge dette.

Når man laver et opslag på et selvklassificeret stof, ser resultatet i Industrilisten lidt anderledes ud. Her ser man således kun de notificerede klassificeringer, og der vil typisk være mange forskellige klassificeringer for samme stof - fordi forskellige leverandører har vurderet farligheden forskelligt.

I listen kan man også se, hvilke klassificeringer der hyppigst anvendes ved selvklassificeringen. En klassificering kan være anmeldt af 216 leverandører - en anden kan være anmeldt af 1129 leverandører osv. Se eksempel i illustrationen. Men hyppigheden af en klassificering siger ikke nødvendigvis noget om validiteten (gyldigheden) af de data, der ligger bag klassificeringerne. Selvom en klassificering kun er anmeldt af én leverandør, kan disse data i princippet godt være bedre end den klassificering, der er anmeldt af 117 andre.

Der er dog en kvalitetsindikator i listen. Ud for nogle af klassificeringerne vil man se et grønt flueben. Det betyder, at denne notificering er udført af en SIEF-gruppe. Dvs. at flere leverandører har delt data med hinanden, inden de anmeldte klassificeringen. Det er alt andet lige en kvalitetsindikator.

## Hvad kan Industrilisten bruges til?

Når Industrilisten ikke uden videre kan bruges som en facitliste, så er det fordi et grundprincip i kemikalielovgivningen er, at data skal følge stoffet. Selvom det kan være fristende at hente data fra Industrilisten frem for at bruge data fra ens leverandør, så kan man ikke bare gøre det. For de data, der følger med stoffet/produktet, skal som udgangspunkt bruges.

Hvordan man bruger listen afhænger dog af, hvem man er. Hvis man er konsulent/ekspert, der skal udarbejde en klassificering for et produkt, så er listen et fremragende værktøj i den

### ■ Baggrund

Senest januar 2011 skulle samtlige farlige stoffer på det europæiske marked notificeres (anmeldes) med en klassificering. Kravet omfattede alle, der bragte et stof på markedet i EU uanset mængde. Notificering skulle ske til ECHA (det europæiske kemikalieagentur). Hvis nye stoffer bringes på markedet, eller eksisterende stoffer ændrer klassificering, skal det ligeledes notificeres. Industrilisten opdateres altså løbende. For nye stoffer skal notificeringen ske senest en måned efter, at stoffet er markedsført.

## Notified classification and labelling

## General Information

| EC Number | CAS Number | IUPAC Name          |
|-----------|------------|---------------------|
| 215-137-3 | 1305-62-0  | CALCIUM DIHYDROXIDE |

## Notified classification and labelling according to CLP criteria

| Classification                    |                          |                          | Labelling                              |                                | Specific Concentration limits, M- Factors | Notes | Number of Notifiers | Joint Entries | View |
|-----------------------------------|--------------------------|--------------------------|----------------------------------------|--------------------------------|-------------------------------------------|-------|---------------------|---------------|------|
| Hazard Class and Category Code(s) | Hazard Statement Code(s) | Hazard Statement Code(s) | Supplementary Hazard Statement Code(s) | Pictograms Signal Word Code(s) |                                           |       |                     |               |      |
| Eye Dam. 1                        | H318                     | H318                     |                                        | GHS05 Dgr                      |                                           |       | 1129                |               |      |
| Skin Corr. 1B                     | H314                     | H314                     |                                        | GHS05 Dgr                      |                                           |       | 764                 |               |      |
| Skin Irrit. 2                     | H315                     | H315                     |                                        |                                |                                           |       |                     |               |      |
| Eye Dam. 1                        | H318                     | H318                     |                                        | GHS07 GHS05 Dgr                |                                           |       | 746                 | ✓             |      |
| STOT SE 3                         | H335                     | H335                     |                                        |                                |                                           |       |                     |               |      |
| Eye Dam. 1                        | H318                     | H318                     |                                        | GHS07 GHS05 Dgr                |                                           |       | 216                 |               |      |
| STOT SE 3                         | H335                     | H335                     |                                        |                                |                                           |       |                     |               |      |

Uddrag af opslag i Industrilisten på calciumdihydroxid.

ekspertvurdering, der skal ligge til grund for den klassificering, der formidles.

Hvis man er en virksomhed, der bruger stoffet i sin produktion, så kan man bruge Industrilisten til at foretage et opslag, hvor man kontrollerer den klassificering, man har fra sin leverandør. Hvis man kommer i tvivl om leverandørens klas-

### Her findes listen

Listen kan findes på ECHA's hjemmeside "echa.europa.eu" - vælg [Information on Chemicals] - og vælg [Search the C&L Inventory database], som er Industrilistens engelske navn.

sificering er korrekt, så skal man reagere på samme måde, som hvis man finder fejl i leverandørens oplysninger: Man skal tage kontakt til leverandøren. Med baggrund i Industrilisten kan man spørge sin leverandør, hvorfor en given klassificering afviger fra, hvad der synes at være normen (f.eks. baseret på hyppighed).

I dag er Industrilisten kendetegnet ved mange forskellige notificeringer af samme stof. Men nu hvor klassificeringerne er offentlige, så vil det i sig selv føre til øget dialog, og man vil forvente, at der vil ske en ensretning med tiden.

I det Europæiske Kemikalieagentur (ECHA) arbejdes der på at etablere en platform, hvor virksomhederne kan diskutere klassificeringen af stoffer på listen og udveksle informationer. Forhåbningen er, at dette på sigt vil føre til en større grad af harmonisering, hvad angår de selvklassificerede stoffer.

### Overblik

Den opmærksomme læse vil have bemærket, at der i artiklen er anvendt tre forskellige stofgrupper i relation til lovgivningen. Et

overblik kræver således, at man forstår forskellene mellem de tre grupper af stoffer.

**De regulerede/harmoniserede stoffer** er de stoffer, der er optaget i lovgivningen med en klassificering, dvs. de stoffer som er på CLP-forordningens bilag VI, tidligere kendt som "Listen over farlige stoffer".

**De notificerede stoffer** er alle stoffer (i EU), men listen er særlig interessant for de selvklassificerede stoffer, altså alle dem som ikke kan findes i CLP-forordningens bilag VI. Det er ikke en facitliste, men en liste der viser spændvidden i klassificeringerne. Listen vil også komme til at indeholde de ikke-klassificerede stoffer, der er registreret under REACH.

**De registrerede stoffer** er de stoffer, som har været gennem den registreringsproces, der er en del af REACH. Arbejdet sker hovedsageligt i såkaldte SIEF-grupper, som deler og indhenter data, indtil de får registreret en klassificering af stoffet. Stofferne kan kendes på, at de har et fået REACH registreringsnummer.

E-mail-adresse

Lars Bugge: lb@chymeia






**www.retsch.dk**  
birte@skanlab.com



# Kumarin – en smagsgiver i kanel

Kan man få for meget kumarin med kosten?



Ceylonkanel.

Af Kirsten Pilegaard, seniorrådgiver,  
Afdelingen for Toksikologi og Risikovurdering,  
DTU-Fødevareinstituttet, DTU

Kassia-kanel, som er den mest anvendte kanelart i Danmark, har et højt naturligt indhold af kumarin. Der er fastsat en grænse (tolerabel daglig indtagelse (TDI)) for hvor meget kumarin et menneske kan tåle dagligt hele livet igennem uden sundhedsmæssig risiko. Det er muligt at få for meget kumarin med kosten. En kvart teskefuld kanel på havregrøden ca. 4 gange ugentligt til et 1-årigt barn giver en lille overskridelse af TDI. Grænsen kan være overskredet hhv. 2 og 4 gange, hvis et 4-årigt barn drikker 2,5 dl kanelte eller en voksen drikker 1 liter. Nogle kosttilskud og kager med kanel kan også indeholde meget kumarin. Det anbefales, at storforbrugere af Kassiakanel sætter forbruget ned.

## Kilder til kumarin

Kumarin (1,2-benzopyron) er et naturligt forekommende aromagivende stof med en lugt som frisk hør, skovmærke eller vanilje. Stoffet findes i planter som kanel, tonkabønne (*Dipteryx odorata* (Aubl.) Willd.) og skovmærke (*Galium odoratum* (L.) Scop.). Kumarin findes også i stor mængde i æteriske olier som kanelolier, lavendelolie og pebermynteolie. Det rene kemiske stof må ikke tilsættes til fødevarer, så kumarin i maden stam-

mer fra tilsatte naturlige kilder. Der er fastsat EU-grænseværdier for kumarin i bagværk, morgenmadscerealier og desserter.

## Kumarin i forskellige arter af kanel

Der findes flere forskellige arter af kanel. Det vi i daglig tale kalder kanel stammer fra barken af Ceylonkanel (*Cinnamomum verum* J.Presl. synonym *C. zeylanicum* Blume) og Kassiakanel (*C. cassia* J.Presl. synonym *C. aromaticum* Nees). Det er hovedsageligt barken fra Kassiakanel, der anvendes i Danmark.

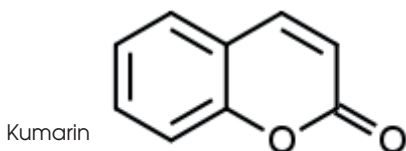
### ■ Den tolerable daglige indtagelse

Den tolerable daglige indtagelse (TDI) benyttes til stoffer, som vi er nødt til at tolerere i et vist omfang. Den tolerable daglige indtagelse er den mængde af stoffet, som et menneske vurderes at kunne indtage dagligt hele livet igennem uden sundhedsmæssig risiko. TDI for kumarin er fastsat til 0-0,1 mg/kg/legemsvægt af Den Europæiske Fødevarsikkerhedsautoritet (EFSA). EFSA har udtalt, at en overskridelse på op til 3 gange af TDI'en i 1 til 2 uger ikke giver anledning til bekymring for sikkerheden.



Bark fra Kassiakanel (t.v.) og fra Ceylonkanel (t.h.). Barken fra Kassiakanel er tykkere (1-2 mm) end den fra Ceylonkanel (0,2-0,7 mm). En kanelstang fra Ceylonkanel indeholder flere tynde lag bark, der er rullet sammen, mens Kassiakanel består af færre lag. Foto: Bo Herbst.

Kumarinindholdet er meget højere i Kassiakanel end i Ceylonkanel. Indholdet af kumarin i Kassiakanel kan variere fra 700-12.200 mg/kg, mens barken fra Ceylonkanel indeholder fra ikke målelige mængder til 297 mg/kg. Ceylonkanel, som er væsentligt dyrere end Kassiakanel, anvendes næppe i større omfang. Hvis man køber hel kanel, er det muligt at kende forskel på de to arter (se foto). Forbrugere, der spiser stødt kanel, kan næppe kende forskel på de to arter, selvom de har forskellig smag.



### Toksiske effekter af kumarin

I dyreforsøg har indtagelse af kumarin givet anledning til forskellige effekter, primært leverskader, men også effekter på nyrerne. Der er også set forskellige kræftformer hos forsøgsdyr. Da man ved, at kræftudviklingen ikke sker via påvirkning af arveanlæggene (ikke-genotoksisk), har det været muligt at fastsætte en indtaksgrænse, hvorunder denne effekt ikke optræder. Hos mennesker er der set reversible leverskader efter indtagelse af kumarin anvendt som lægemiddel. Når effekten beskrives som reversibel betyder det, at de uheldige effekter på leveren normalt forsvinder, hvis man holder op med at spise kumarin.

### Indtaget af kumarin med kosten

Der findes ikke danske undersøgelser af indtaget af kanel eller indholdet af kumarin i Kassiakanel og kanelholdige produkter, men der findes undersøgelser fra 2 nabolande.

En tysk undersøgelse viser en sæsonvariation, så indtagelse af kanelholdige produkter stiger i juletiden. De tyske myndigheder har advaret mod, at småbørn (vægt 15 kg) allerede indtog en kumarinmængde svarende til TDI, hvis barnet indtog 20 g af en tysk julesmåkage med højt kanelindhold. Kun få voksne tyskere havde en let overskridelse af TDI i juletiden. I Tyskland har man advaret mod indtagelse af nogle kanelholdige kosttilskud med højt indhold af kumarin og en praksis med at indtage

op til 6 g kanel dagligt i en tro på mulige sundhedsgavnige virkninger.

I Norge er der også set på indtagelsen af kumarin. I beregningerne er indgået, at 1 teskefuld stødt kanel vejer 2,7 g. Indholdet af kumarin er sat til 3000 mg/kg. Kostundersøgelser viser, at børn på 1 år i gennemsnit får havregrød 4,2 gange om ugen, men nogen får havregrød op til 14 gange ugentligt. En ¼ teskefuld kanel på grøden 4,2 ugentligt giver et indtag af kumarin på 0,12 mg/kg legemsvægt/dag (dvs. TDI overskrides lidt), mens en 1-årig, der får 1 teskefuld kanel på grøden 14 gange om ugen indtager 1,63 mg/kg legemsvægt/dag (dvs. at TDI overskrides 16 gange). For voksne, der indtager havregrød drysset med 2 teskefulde kanel 4,5 gange om ugen, er TDI også overskredet (kumarinindtaget er 0,17 mg/kg/legemsvægt pr. dag). Hvis en voksen drikker 1 liter kanelholdig te, overskrides TDI 4 gange, mens 2,5 dl kanelte til en 4-årig betyder, at TDI overskrides 2 gange. Indholdet af Kassiakanel i teen var 55-61%. 2 ud af 14 undersøgte kosttilskud med kanel gav et dagligt indtag af kumarin svarende til TDI.

### Konklusion og anbefalinger

De fleste danskere spiser næppe kanel i mængder, der giver anledning til sundhedsmæssige betænkeligheder. Der kan være voksne eller børn, der sammensætter deres kost på en sådan måde, at de overskrider TDI for kumarin. I risiko for at få for meget kumarin er småbørn, der ofte får havregrød med kanel og voksne, der indtager kanel, fordi de tiltror krydderiet sundhedsgavnige egenskaber. Indholdet af kumarin kan også være højt i kanelte, noget julebagværk og nogle kanelholdige kosttilskud. Levereglerne "alt med måde" og "det er godt med variation i kosten" gælder også for indtagelse af Kassiakanel.

E-mail-adresse

Kirsten Pilegaard: kpil@food.dtu.dk

### Kilder

Abraham K, Wöhrlein F, Lindtner O, Heinemeyer G, Lampen A (2010) Toxicology and risk assessment of coumarin: focus on human data. *Mol Nutr Food Res* 54: 228-239.

Alt om kost: Kanel storforbrugere af kanel bør begrænse brugen [http://www.altomkost.dk/Fakta/krydderier\\_og\\_krydderurter/Kanel/forside.htm](http://www.altomkost.dk/Fakta/krydderier_og_krydderurter/Kanel/forside.htm) BfR (Bundesinstitut für Risikobewertung)(2006) Verbraucher, die viel Zimt verzehren, sind derzeit zu hoch mit Cumarin belastet. *Gesundheitliche Bewertung des BfR Nr. 043/2006 vom 16. Juni 2006.*

BfR (Bundesinstitut für Risikobewertung) (2006) High daily intake of cinnamon: Health risk cannot be ruled out. *Health Assessment no. 0.44/2006, 18 August 2006.*

EFSA (European Food Safety Authority)(2008) Coumarin in flavourings and other food ingredients with flavouring properties. *Scientific Opinion of the Panel on Food Additives, Flavourings, Processing Aids and Materials in Contact with Food (ACF). Adopted on 8. July 2008. The EFSA Journal* 793: 1-15.

EFSA (European Food Safety Authority)(2004) Opinion of the Scientific Panel on Food Additives, Flavourings, Processing Aids and Materials in Contact with Food (ACF) on a request from the Commission related to Coumarin. *The EFSA Journal* 104: 1-36.

Europa-parlamentets og Rådets forordning (EF) Nr. 1334/2008 af 16. december 2008 om aromaer og visse fødevaringredienser med aromagivende egenskaber til anvendelse i og på fødevarer og om ændring af Rådets forordning (EØF) nr. 1601/91, forordning (EF) nr. 2332/96, forordning (EF) nr. 110/2008 og direktiv 2000/13/EF). *Den Europæiske Unions Tidende L* 354/34.

Fotland TØ, Paulsen JE, Sanner T, Alexander J, Husøy T (2012) Risk assessment of coumarin using the bench mark dose (BMD) approach: children in Norway which regularly eat oatmeal porridge with cinnamon may exceed the TDI for coumarin with several folds. *Food Chem Toxicol* 50: 903-912

Wichtl M (2002) Teedrogen und Phytopharmaka. *Wissenschaftliche Verlagsgesellschaft mbH.*



# Mysteriet om kavas toksicitet

Vandige ekstrakter af den euforiserende plante kava har været anvendt på øer i Stillehavet gennem årtusinder uden at forårsage alvorlige bivirkninger. Men i Vesten har brug af kava medført leverskader. Hvorfor? Nye undersøgelser tyder på, at toksiciteten skyldes, at organiske opløsningsmidler har erstattet vand ved fremstilling af ekstrakterne.

Af cand.pharm. Line Olsen, ph.d.-studerende, Institut for Farmaci, dr.pharm. Steen Honoré Hansen, professor, Institut for Farmaci og Analytisk Kemi, ph.d. Claus Cornett, lektor, Institut for Farmaci og Analytisk Kemi, ph.d. Christian Skonberg, research scientist, ADME afdelingen, Novo Nordisk

Vandige ekstrakter af planten kava har været anvendt i ceremonielle sammenhænge i flere årtusinder på øer i Stillehavsregionen. Drikken har en beroligende og let euforiserende virkning, men påvirker ikke de mentale funktioner. Den traditionelle drik forekommer relativt sikker, idet den mest udbredte bivirkning er et skælet udslæt, som kaldes kava-dermopati. Men efter introduktion af produkter baseret på kava på det europæiske og amerikanske marked blev flere tilfælde af leverskader observeret. Mange af skaderne blev forbundet med indtag af kava, og produkter indeholdende kava blev derfor forbudt i en række lande, heriblandt Danmark.

Mekanismen bag levertoksiciteten er ukendt og beskrives derfor som idiosynkratisk. Dvs. at kun meget få personer rammes, og at man ikke kan påvise en sammenhæng mellem dosis og giftvirkning. Nye forskningsresultater tyder imidlertid på, at leverskaderne observeret i Vesten kan skyldes, at kava her ekstraheres i organiske opløsningsmidler frem for i vand, som

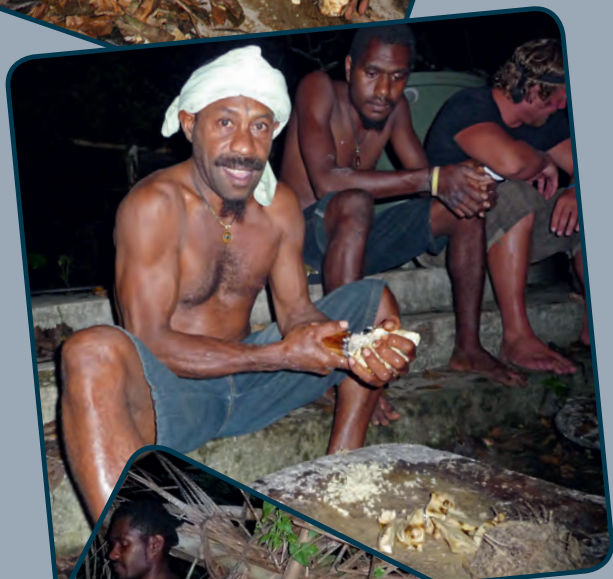
bruges på Stillehavsøerne. Desuden sandsynliggør vore resultater, at en gruppe pigment-stoffer i ekstraktet er involveret i processen.

## James Cook beskrev planten

Kava eller Kava-Kava blev første gang beskrevet i litteraturen af kaptajn James Cook under hans sejlads i Stillehavsområdet fra 1768 til 1771. Ekstrakter af planten bliver anvendt i ceremonielle sammenhænge og effekten beskrives som beroligende og sammenlignes ofte med alkohol, dog uden at medføre afhængighed eller ophidselse.

På sin anden rejse i Stillehavsområdet fra 1772 til 1775 havde James Cook en ung botaniker med, Johann Georg Forster, som navngav planten *Piper methysticum*. Forster gav samtidig en udførlig beskrivelse af fremstillingsmetoden af ekstraktet. Traditionelt bliver ekstrakterne fremstillet ud fra roden, som skæres i små stykker, hvorefter stykkerne tygges – evt. af landsbyens jomfruer – og saften spyttedes ud i en stor skål. Her blandes saften med vand eller kokosmælk, hvorefter ekstraktet drikkes. Mere hygiejniske fremstillingsmetoder er også beskrevet, hvor roden udblødes eller knuses og sies gennem palmeblade.

Kava blev indført i Europa i løbet af det næste århundrede og blev optaget i forskellige farmakopéer, bl.a. i den britiske farmakopé i 1914 til behandling af gonoré. Den dag i dag kan



Traditionel fremstilling af et kavaekstrakt.  
Øverst: Roden skæres i mindre skiver.  
I midten: Skiverne findeles og æltes, indtil fibrene er adskilt.  
Nederst: Fibrene blandes med lidt koldt vand, og saften vrides ud. Ekstraktet er en brunlig væske.



man stadig blive tilbudt traditionelt fremstillede kavaekstrakter på Stillehavsøerne.

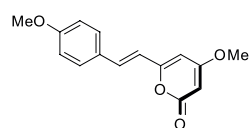
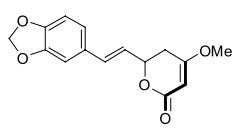
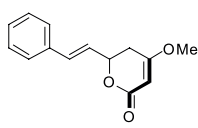
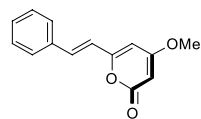
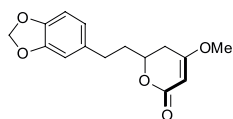
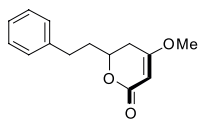
### Svært at forklare giftvirkninger

Kava indeholder flere forskellige kemiske stoffer, hvoraf de mest dominerende er laktoner, som udgør 3-20% af tørret kavarod og op til 96% af et organisk ekstrakt. Laktonerne er ansvarlige for kavas beroligende effekt. Ud over laktoner indeholder planten forskellige alkaloider samt en gruppe af pigmenter, som kaldes flavokavainer. I vestlige lande fremstilles primært standardiserede organiske tørrede ekstrakter med et laktonindhold på 30-70%.

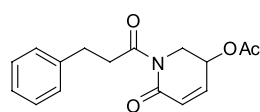
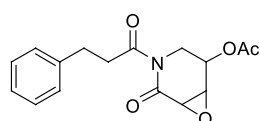
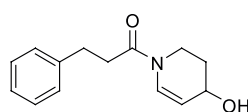
I løbet af 1990'erne steg kavas popularitet i den vestlige verden, og samtidig blev en stigning i antallet af leverskader observeret i forbindelse med indtag af ekstrakterne. Denne sammenhæng førte til et forbud mod salg af kavaprodukter i en række europæiske lande samt i Canada, og i USA mærkes alle kavaprodukter med advarsler. En større undersøgelse udført af WHO konkluderede i 2007, at der var en mulig sammenhæng mellem brug af kavaprodukter og levertoksicitet, men den konkrete årsag til leverskaderne kunne ikke fastslås, og man kunne heller ikke påvise nogen sammenhæng mellem toksicitet og dosis eller eksponeringstid. Forekomsten af leverskader blev estimeret til at være et tilfælde blandt 2500 brugere. Siden er adskillige studier blevet udført med henblik på at forklare den bagvedliggende mekanisme for toksiciteten, men til dato uden succes.

At kava har været anvendt i flere årtusinder på Stillehavsøerne uden at medføre en øget forekomst af levertoksicitet, har været et mysterium for alle involverede forskere, fordi der ikke synes at være andre forskelle på kommercielle produkter og traditionelle ekstrakter end selve fremstillingsmetoden. Vandige og organiske ekstrakter er blevet testet både i laboratorieforsøg med cellekulturer og i dyreforsøg, men uden entydige resultater. Konklusionen har i mange tilfælde været, at kavainduceret levertoksicitet er idiosynkratisk, hvilket er karakteriseret ved, at der ikke kan påvises dosisafhængighed, og at kun meget få individer rammes.

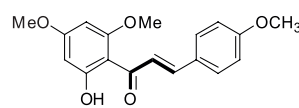
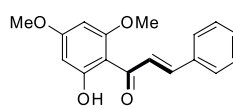
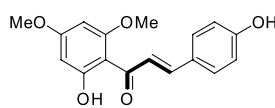
Figur 1a: Kavalaktoner

Yangonin  
Molecular Weight: 258.27Methysticin  
Molecular Weight: 274.27Kavain  
Molecular Weight: 230.26Desmethoxyyangonin  
Molecular Weight: 228.247,8-Dihydromethysticin  
Molecular Weight: 276.287,8-Dihydrokavain  
Molecular Weight: 232.28

Figur 1b: Kava alkaloider

Pipermethystine  
Molecular Weight: 287.313 $\alpha$ ,4 $\alpha$ -epoxy-5 $\beta$ -pipermethystine  
Molecular Weight: 303.31Awaine  
Molecular Weight: 231.29

Figur 1c: Flavokavainer

Molecular Weight: 314.33  
Flavokavain AMolecular Weight: 284.31  
Flavokavain BMolecular Weight: 300.31  
Flavokavain C

De vigtigste indholdsstoffer i kava er kavalaktoner, alkaloider og flavokavainer. Både laktoner og flavokavainer indeholder en såkaldt  $\alpha,\beta$ -umættet keton (tegnet med fede linier). Dette strukturelle element er potentielt kemisk reaktivt. Reaktive kemiske forbindelser kan være årsagen til de sjældne tilfælde af levertoksicitet, som er observeret i Vesten. Her fremstilles kavaekstrakt ved brug af organiske opløsningsmidler, og sådanne ekstrakter indeholder bl.a. flavokavainer i langt større mængder end i de traditionelle drikke på Stillehavsøerne, hvor kava ekstraheres i vand.

## Idiosynkratisk toksicitet

Giftvirkninger af kava kan ikke påvises i dyremodeller. Dette kan skyldes, at mennesker og dyr omdanner lægemidler og rusmidler forskelligt i stofskiftet, så det ofte er forskellige metabolitter af et stof, som dannes i forskellige arter. Bl.a. derfor er involvering af reaktive metabolitter en udbredt teori i forklaringen af idiosynkratisk toksicitet hos mennesker ved indtagelse af kava. Hvis der dannes reaktive forbindelser i leveren, kan de reagere med leverens proteiner, hvilket kan ødelægge proteinerens funktion eller fremkalde et immunrespons.

Idiosynkratiske reaktioner har ofte ligheder med allergiske reaktioner, og det kan ikke forudsiges, hvilke personer der vil reagere. Omdannelse af indholdsstofferne i kava foregår for en stor del i leveren, som ofte er involveret ved idiosynkratisk toksicitet. En del lægemidler omdannes således til reaktive metabolitter i leveren. Et eksempel er det smertestillende stof, paracetamol, men her dannes metabolitterne dosisafhængigt, og kun når de dannes i store mængder, vil de give anledning til at levercellerne tager skade. Leverens robusthed skyldes i høj grad, at cellerne indeholder høje koncentrationer af stoffet glutathion. Glutathion kan nemlig reagere med de dannede metabolitter, før cellen bliver angrebet, og på den måde forhindre, at cellen tager skade.

Vores forskergruppe har i mange år arbejdet med at identificere og karakterisere kemisk reaktive omsætningsprodukter af lægemiddelstoffer i leveren, primært med fokus på karboxylsy-

reholdige lægemidler. Det er især smertestillende medicin, de såkaldte NSAID – non steroide antiinflammatoric drugs – som kan danne reaktive acylglucuronider og acyl-Coenzym A-ader. Disse lægemidler kan reagere med såvel glutathion som proteiner i leveren. Forskningsgruppen har endvidere arbejdet med chalconer, en stofgruppe som omfatter lægemiddelkandidater mod bl.a. malaria, og som i lighed med flavokavainerne indeholder en  $\alpha,\beta$ -umættet keton, der reagerer med glutathion.

## Reaktive flavokavainer

Flavokavainerne og laktonerne er potentielt reaktive, fordi de indeholder en molekylær struktur, en  $\alpha,\beta$ -umættet keton, som villigt indgår i kemiske reaktioner. Flavokavainerne findes kun i små mængder i kavaplanten, men pigmenterne er de mest toksiske indholdsstoffer. Nyere forskning har vist, at denne type af stoffer har potentiale som lægemidler til behandling af visse kræftformer, fordi de inducerer kontrolleret celledød. Denne effekt kan ophæves ved at behandle cellerne med *N*-acetylcystein. *N*-acetylcystein har i denne forbindelse samme beskyttende egenskaber, som glutathion har i leveren.

Opløseligheden af både laktoner og flavokavainer er meget højere i organiske opløsningsmidler som ethanol og acetone end i vand. Indholdet af flavokavainer i et standardiseret vestligt ekstrakt vil således være højere end i et vandigt ekstrakt, som

Fortsættes på side 33 ►

# dansk kemi

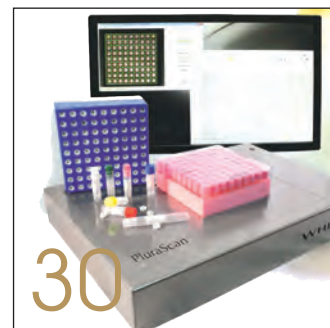
Nummer 5 - Maj 2012 / 93. årgang

Mine metoder  
skal kunne bruges

Ny teknik  
til prøveoplukning

Laboratorietillæg  
- ta' ud og gem

# INDHOLD



**20** Praktisk snilde, faglig forståelse og evnen til selv at programmere software har kendetegnet Christian Janfelts karriere. Han har bl.a. udviklet en DESI-imaging-ionkilde, der kan lave billeder af prøver med en opløsning ned til 100 nm.

**22** Ny teknik til mikrobølgesupporteret prøveoplukning. Det betyder at man nu kan syreoplukke direkte i autosamplerrør. Det giver mulighed for at oplukke flere typer prøver simultant på kortere tid og med lavere blankværdier.

**27** Grøn og hurtig metode til COD-bestemmelse  
Ny gasdetektor

**28** Nyt ICP-MS-system  
Ny dansk agent for Q-Lab-testkamre  
Online glucosemåling

**29** Regulatorer til trykregulering af farmaceutiske systemer  
Multiplade pipettering

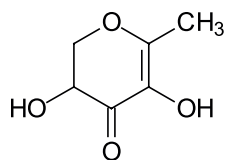
**30** 2D Barcode Reader for Biobanking Operations  
Gennembrud for GC-analyser  
Nyt navn til biomedicinske produkter

**31** Magnetic Stirrer  
Håndholdt automatisk analytisk sprøjte

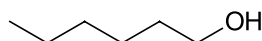


## ■ Nyt om... ... Kakerlakker elsker dovent øl og peanut butter

Kakerlakker er et alvorligt problem i mange etageejendomme, hvor de kan bevæge sig rundt i bygningen via rørgennemføringer. Da de lige så gerne opholder sig i affald som i friske fødevarer, bringer de let patogene bakterier med sig rundt. Det har vist sig, at de har to favoritter nemlig dovent



DDMP



HEXAN-1-OL

øl og peanut butter. En gruppe ved Simon Fraser University i Britisk Columbia har nu identificeret hexan-1-ol fra peanut butter samt 2,3-dihydro-3,5-dihydroxy-6-methyl-4H-pyran-4-on (DDMP) og ethanol fra den dovent øl som de tiltrækkende stoffer ved hjælp af GCMS og GC-EAD (GasChromatography-ElectroAntennograficDetection), en sofistikeret metode, hvor man anvender kakerlakkernes følehorn som detektorer. Ideen er så, at man kan bruge disse stoffer som lokkestoffer i fælder.

Carl Th.

General Food Semiochemicals Attract Omnivorous German Cockroaches,  
*Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 59, 2011, side 1330

## Intelligent Purification

Gilson Trilution LC-MS Purification  
Gilson PLC2020 Personal LC  
Genevac Rocket Evaporator



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

## DANDIAG

### INTEGRA VIAFLO 96

Book et demobesøg!

Viaflo96 er en hurtig og effektiv 96 kanals elektronisk pipette, med mulighed for udskiftning af pipetteringshovedet.

- Volumen område 0,5-1250µl.
- Betjenes let og uden brug af PC.



### Biohit Roboline™ - your automate

Book et demobesøg!

Biohit Roboline er en unik enkelt kanals robot, der klarer de mindre afpipetteringer i både plader og rør.

- Volumen område fra 5-200µl.
- Er støjsvag
- Lille "footprint"

Dandiag A/S | Mårkærvej 9 | 2630 Tåstrup  
T: 4343 3057 | www.dandiag.dk | dandiag@dandiag.dk

# Mine metoder skal kunne bruges

Praktisk snilde, faglig forståelse og evnen til selv at programmere software har kendetegnet Christian Janfelts karriere. Han har bl.a. udviklet en DESI-imaging-ionkilde, der kan lave billeder af prøver med en opløsning ned til 100  $\mu\text{m}$ .

Af Katrine Meyn, km@techmedia.dk

- Det er vigtigt for mig at skabe resultater med min forskning. Dvs. når jeg udvikler nye analysemetoder, så er det vigtigt for mig, at de kan bruges af fagfolk inden for andre områder, fortæller Christian Janfelt.

Hans vej inden for kemi startede på Vejen Gymnasium, hvor han havde en inspirerende kemilærer.

- Det var den klassiske historie. Min kemilærer var en fremragende underviser, og han fik virkelig vakt min interesse og lyst til at gå videre ad den vej, siger han.

Christian Janfelt valgte at læse kemi og fysik på Syddansk Universitet. I Odense havde de en studieopbygning som gjorde det nemt at sammensætte en bred uddannelse med forbindelser til flere fagområder. Han tog fysik som hovedfag og kemi som sidefag. En kombination han lige siden har haft stor glæde af. Fagene har mange fælles grænseflader, bl.a. inden for kvantekemi og materialeforskning. I sit speciale undersøgte han reaktioner på siliciumoverflader. Den kemiske del bestod bl.a. af computerberegninger af overfladen, hvilket han kombinerede med at undersøge overfladerne fysisk vha. bl.a. STM og fotoelektronspetroskopi.

## Nyt bekendtskab med MS

Christian Janfelts interesse for programmering og instrumenter betød, at professor i analytisk kemi Frants Lauritsen fik øje på ham. Han tilbød en ph.d. på Københavns Universitet. Han havde brug for en, der kunne udvikle miniature-MS'er til brug i felten.

- Tanken om at designe instrumenter var lige mig. Jeg vidste ikke meget om massespektrometri på det tidspunkt, så jeg startede med at sætte mig ind i det nye område, fortæller Christian Janfelt.

På instituttet var der indkøbt et nyt MS, men desværre var styringssoftwaren både langsom og besværlig. Christian Janfelts tidligere erfaring fra kvantekemien havde givet ham noget træning i programmering, og det lykkedes ham med succes at lave bedre software til det lille massespektrometer.

## Den helt store øjenåbner

- Det var en stor faglig oplevelse og øjenåbner, da jeg som en del af min ph.d. i 2006-2007 var 7 måneder hos professor Graham Cooks på Purdue University.

Hans gruppe var førende inden for to afgørende områder, nemlig udvikling af små MS'er og den nye DESI-teknik, som de havde publiceret den første artikel om to år tidligere.

- Det var meget inspirerende at være en del af Cooks' store

gruppe på ca. 40 mand, og det gav mig et godt netværk. Det er vigtigt at ph.d.'er og postdoc'er tager ud og oplever verden og ser, hvordan man gør tingene andre steder. Ud over det var det en stor oplevelse at komme i en international anerkendt gruppe med store midler. Det giver nogle helt andre muligheder for at forfølge spændende ideer, når de opstår, siger han.

Også på hjemmefronten var det en udfordrende tid. Christian Janfelt var netop blevet far, og med sig på turen havde han en datter på 4 uger og sin kæreste.

- Det er svært at tvinge folk udenlands, når de har fået børn. Ved at kombinere mit udenlandsophold med min kærestes barsel, fik vi det til at hænge sammen, så vi alle havde en spændende tid i USA (en øvelse familien gentog tre år efter, da datter nummer to var kommet til verden, og turen gik til Tyskland).

## Adjunkt på Farmaceutisk Fakultet

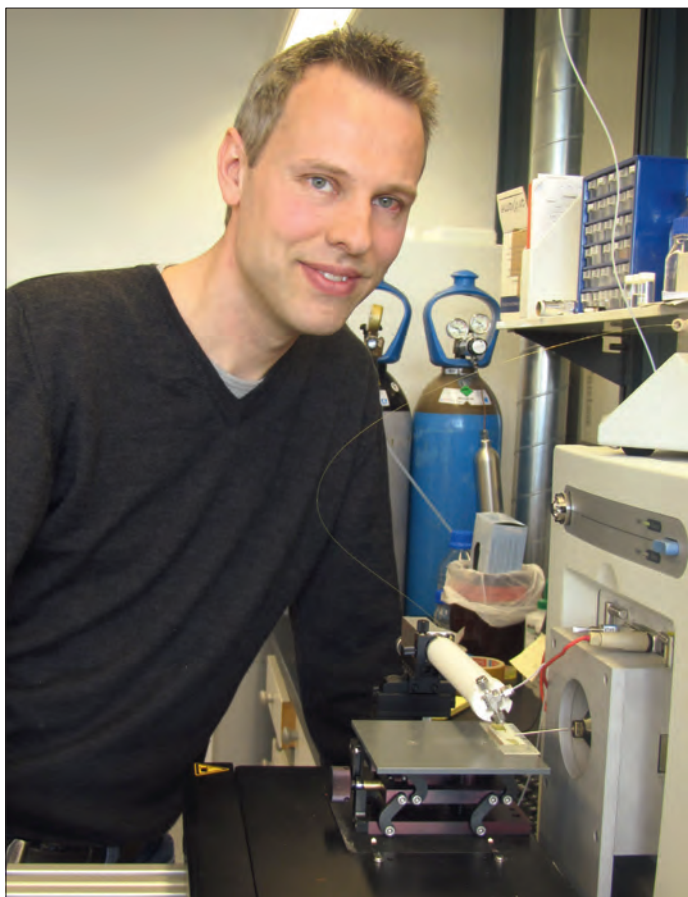
Tilbage i Danmark søgte Christian Janfelt en stilling som adjunkt i analytisk kemi på Det Farmaceutiske Fakultet. Professor Steen Honoré Hansen så mange muligheder i DESI-teknikken og opfordrede ham til at søge den 4-årige stilling.

- Jeg har undervist i en del år efterhånden, og kan godt lide det – som underviser gør man en vigtig forskel ved at uddanne Danmarks fremtidige arbejdskraft. Og så er undervisning noget meget konkret og derfor også en god afveksling fra forskningsarbejdet, som nogle gange på godt og ondt er lidt mere uforudsigeligt, siger han.

### ■ DESI-imaging

DESI: Desorption Electrospray Ionization.

Med DESI-MS-metoden behøver prøven ikke at være på væskeform. Der bruges en elektrisk ladet spray, som rettes mod prøvens overflade, og som ioniserer molekylerne på overfladen, hvorefter de analyseres i massespektrometret. Med metoden kan man springe ekstraktionen over og måle stoffer direkte fra et blad eller en vævsprøve, hvilket giver en analysetid på ned til få sekunder. Samtidig bliver stofferne målt på det sted, hvor de befinder sig, i modsætning til ved en ekstraktion, hvor molekyler fra hele prøven blandes i samme ekstrakt, så man derved mister information om præcis, hvor i prøven molekylerne oprindeligt var placeret. Ved at bevæge prøven systematisk, mens massespektrometret optager spektre, kan man holde øje med præcis, hvor og hvornår stoffet af interesse viser sig i spektrene. Fra de optagne spektre kan man så generere billeder, som viser fordelingen af stoffer i prøven.



#### ■ Christian Janfelt

2005: Kandidat i fysik og kemi, Syddansk Universitet  
2006: 7 måneder som ph.d.-studerende hos professor Graham Cooks, Purdue University, USA  
2008: Ph.d. i analytisk kemi, Københavns Universitet  
2008: Adjunkt i analytisk kemi, Institut for Farmaci og Analytisk Kemi, Det Farmaceutiske Fakultet, Københavns Universitet  
2009: 6 måneder i professor Bernhard Spenglers forskningsgruppe ved Justus Liebig Universität, Giessen, Tyskland

#### Udvikling af vigtigt software

I 2009 valgte han at tage et halvt år til Professor Bernhard Spengler i Giessen, lidt nord for Frankfurt. Her mødte han Zoltán Takáts, der et par år før ham også havde arbejdet hos professor Cooks, hvor han var hovedperson i opfindelsen af DESI. Zoltán Takáts havde i Giessen en halvfærdig DESI-imaging ionkilde. De indgik et givtigt samarbejde, hvor Christian Janfelt bl.a. udviklede softwaren til styring af prøvens bevægelse.

Inden han tog af sted til Tyskland, havde han i september 2009 indsendt en ansøgning til Forskningsrådet om et projekt indenfor netop DESI-imaging. Bevillingen kom i december 2009, og med penge fra den brugte han nu de sidste måneder i Tyskland på at designe og bygge sin egen imaging-kilde og tilpasse softwaren til den. Den sidste dag i februar kørte han DESI-imaging-kilden hjem til Danmark i sin bil.

#### DESI-imaging klar til brug

Hjemme i Danmark viste der sig mange anvendelsesmuligheder for analysemetoden.

Steen Honoré havde arbejdet med prikbladet perikon, *Hypericum perforatum*, og mente at den ville være interessant at analysere med DESI-imaging. Planten bruges til behandling af mild depression pga. dens indhold af hypericin og hyperforin, og blev udgangspunktet for en ny analysemetode til imaging af plantemateriale.

- Vha. DESI-imaging fik vi et billede af stoffernes fordeling i både bladene og blomsterne. Lignende analyser lavede vi på pigæblets blade, hvor det lykkedes os at vise, at stoffet atropin især findes i bladets ledningsstrenger, siger Christian Janfelt.

Analysemetoden har ført til et samarbejde med forskere på Institut for Plantebiologi og Bioteknologi, hvor det især er fordelingen af cyanogene glucosider i byg og lotusplanten, som er blevet undersøgt.

DESI-imaging kan også bruges til f.eks. analyse af hjernevæv fra rotter, hvilket har ført til et andet samarbejde med farmakologerne på naboinstituttet. Man kan f.eks. følge et lægemiddel rundt i kroppen på et forsøgsdyr og se hvor og hvordan det omdannes undervejs. Teknikken kan også bruge til at undersøge ændringer i vævet i forbindelse med sygdom, f.eks. under væksten af kræftsvulst.

- Vi har netop afsluttet en undersøgelse af hvilke molekyler ændringer, der sker i hjernevævet som følge af iltmangel i en del af hjernen. Men det beskrives nærmere i en kommende artikel i Dansk Kemi, fortæller Christian Janfelt.

#### Fremtidige indsatsområder

Ved DESI-imaging scannes den valgte prøve, række for række, punkt for punkt, og der optages massespektre for hvert enkelt punkt, som til sidst kan stykkes sammen til billeder af stofferne i spektrene. Derfor resulterer en imaging-analyse typisk også i rigtig mange billeder af stoffer, som viser interessante fordelinger, men som man ikke altid ved, hvad er.

- For bedre at kunne identificere nogle af de ukendte stoffer har vi brug for et nyt og bedre massespektrometer, end det vi har i dag. Derfor er et af mine store mål at skaffe finansiering til et sådant højopløsende massespektrometer. Samtidig har vi også brug for at komme længere ned i rumlig opløsning, så vi kan se mindre detaljer, end vi kan i dag. En mulig løsning på det kan være en helt ny metode kaldet nanoDESI, som vi har nogle idéer til, hvordan man kan forbedre. Endelig er det selvfølgelig også spændende, hvilke nye forsknings-samarbejder vi bliver involveret i. Der er jo ikke meget ved at udvikle nye teknikker og metoder uden også at have nogen gode anvendelser til dem, fortæller Christian Janfelt.

## Pipetteservice

Akkrediteret kalibrering  
Reparation • Vedligeholdelse

**Gilson Center of Excellence • Certificerede teknikere • 20 års erfaring**  
• Alle førende fabrikater • Elektroniske certifikater • Serviceaftaler

**Biolab A/S,**  
Sindalsvej 29, DK-8240 Risskov,  
Tlf: 8621 2866 Fax: 8621 2301  
E-mail: pipetteservice@biolab.dk  
www.biolab.dk

**DANAK**  
Cal. Reg. Nr. 482

# Ny teknik til mikrobølge- supporteret prøveoplukning

Enkeltreaktionskammeret (SRC) gør det nu muligt at syreoplukke direkte i autosamplerrør, hvilket giver mulighed for at oplukke flere typer prøver simultant på kortere tid og med lavere blankværdier.

Af Application Manager Tim Michel, Milestone, oversat af Brian Wohlert, Holm & Halby A/S

Mikrobølgesupporteret prøveoplukning i en lukket beholder anses almindeligvis for at være den mest effektive teknik til prøveoplukning med henblik på analyse af metaller vha. atomabsorption i grafitovn (GFAA), optisk emissionsspektroskopi med induktivt koblet plasma (ICP-OES) og massespektrometri med induktivt koblet plasma (ICP-MS). Metoden virker ved meget højere temperatur (og tryk) end en opvarmet reaktionsblok, og derfor kan den anvendes i forbindelse med mange flere forskellige typer af prøver. Ved mikrobølgesupporteret oplukning er prøverne lukket inde, således at der ikke sker krydskontaminering eller tab af volatile komponenter, og med beholderen fremstillet i materialer af høj kvalitet begrænses kontamineringen.

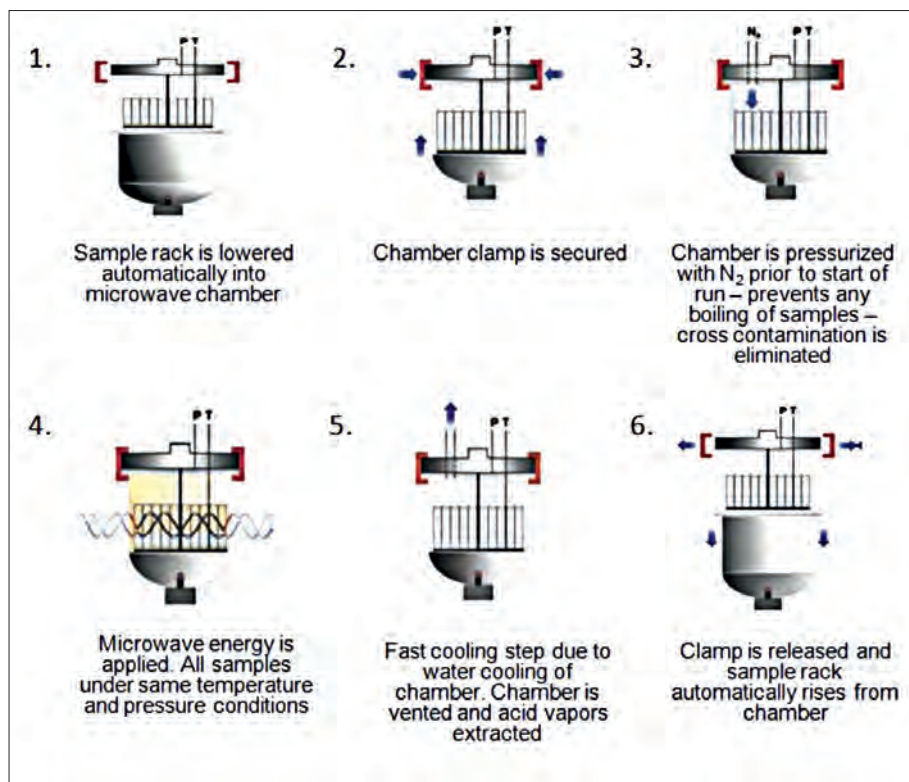
For laboratorier, hvor der analyseres et stort antal prøver, har mikrobølgesupporteret oplukning i en lukket beholder dog sine begrænsninger. Hver gang oplukningsbeholderen skal anvendes, skal den først rengøres (normalt vha. en rengøringscyklus i mikrobølgeovnen med en syre). Beholderne skal samles og skilles ad igen, hvilket kræver en stor arbejdsindsat, og prøveopløsningen skal overføres til en anden beholder forud for analysen, hvilket betyder mere kontakt med prøven og øger risikoen for kontaminering. Den høje temperatur og det store tryk, som opnås ved oplukningen, nedbryder beholderen over tid og fører dermed til betragtelige forbrugsomkostninger. Endelig skal prøvens vægt, matrixtype og anvendt syre være ens for alle prøver i samme kørsel for at sikre fuld kontrol med oplukningen. Det betyder, at der skal foretages en separat kørsel for hver enkelt prøvetype. Laboratorier, hvor der analyseres et stort antal prøver, og som har flere forskellige prøvetyper, anvender ofte forskellige oplukningssystemer.

## Mikrobølgesupporteret prøveoplukning i et enkelt reaktionskammer (SRC)

Mikrobølgesupporteret SRC-oplukning blev introduceret kommercielt for ca. 5 år siden med Milestones UltraCLAVE, et gulvstående system, som har kapacitet til at oplukke 40 prøver ad gangen (eller

77 mikroprøver). UltraCLAVE er i rutinebrug i mere end 100 laboratorier verden over.

Med SRC gribes mikrobølgesupporteret prøveoplukning an på en ny måde. Som navnet antyder, er SRC ét stort reaktionskammer af rustfrit stål, hvori der er et højt tryk. I dette reaktionskammer anbringes alle prøver og oplukkes samtidig. Med SRC bliver reaktionsbeholderen faktisk mikrobølgekaviteten, og dermed kan intensiteten og fordelingen af mikrobølgeenergien optimeres til formen af reaktionsbeholderen. På den måde sikres en ensartet opvarmning, og dermed forsvinder behovet for at vende prøverne under oplukning. Da prøverne er anbragt inde i en beholder under tryk, er der ikke noget behov for individuelle trykbeholdere. Prøverne vejes over i rør af autosampler-typen sammen med den behørig syre, der skal anvendes til oplukningen, og anbringes i et rack, som ligner et roterende autosampler-rack. Rør i Quartz og TFM (PTFE-copolymer med stor ydeevne) kan også anvendes. Hætteerne sættes på rørene for at undgå, at kondens fra kammerets loft drypper ned i prøverne (der anvendes løstsiddende hætte for at sikre, at



Figur 1. Diagram over SRC-processen.



Figur 2. Prøverack fjernes efter oplukning.

der sker en trykdulning med kammeret). Racket anbringes i toppen af kammeret. Kammeret forsejles dernæst automatisk og sættes under et tryk på 40 bar vha. nitrogen forud for mikrobølgeopvarmning. Dermed sikres det, at prøveopløsningen ikke sprutter eller kommer i kog, og krydskontaminering og tab af volatile komponenter forhindres. Eftersom prøvernes temperatur stiger i løbet af mikrobølgeprogrammet, stiger også trykket i kammeret. Derfor forekommer kogning aldrig. Kammeret er beklædt indvendigt med PTFE for at forhindre, at syreholdige dampe skal tære på det. Når programmet er gennemført, trykudlignes kammeret og racket tages ud. Prøverne fortyndes til den rigtige volumen i rørene og er nu klar til måling.

I tilgift til mindre håndtering og en lavere arbejdsindsats er en af fordelene ved SRC-oplukning ift. oplukning i en lukket beholder, at processen foregår ved meget høj temperatur og tryk – op til 300°C og 199 bar - og således opnås totaloplukning af selv de mest besværlige prøvetyper. Derudover kan en hvilken som helst kombination af prøvetyper (eller vægt) oplukkes på samme tid, eftersom alle prøver er i den samme beholder. Der er ikke noget behov for at samle prøverne i batches med henblik på at oplukke ens prøvetyper for sig. Metodeudviklingen er stort set elimineret, eftersom et enkelt program kan anvendes til næsten alle prøvetyper. Standard referencemateriale kan oplukkes sammen med prøver, hvilket for første gang giver mulighed for, at der udføres kvalitetskontrol af oplukningsprocessen, mens denne kører.

Direkte kontrol med tryk og temperatur i kammeret giver direkte kontrol med hver enkelt prøve. Dermed fjernes behovet

## Sikrer analyserent laboratorieudstyr med intelligent og effektiv rengøringsproces

**NYHED** laboratorieopvaskemaskine PG 8536

- ▶ **Grundig og effektiv teknik** kan rengøre meget kraftigt tilsmudset glasapparat
- ▶ **Intelligent måling** sikrer at det ønskede niveau for renhed opnås
- ▶ **Effektivt flow** af udstyr ved hjælp af hurtig og effektiv tørring (op til 115°C)
- ▶ **Kompakt** og kan placeres direkte i laboratoriet
- ▶ **Brugervenlig og doseringsanlæg** med plads til 4 stk. beholdere

Lad vores dygtige specialister hjælpe med at finde den optimale løsning på, hvordan I sikrer rengøringsprocessen af laboratorieudstyret – sikkert og økonomisk fordelagtigt.



Miele Professional A/S · Erhvervsvej 2 · 2600 Glostrup  
Tlf. 43 27 15 00 · [www.miele-professional.dk](http://www.miele-professional.dk)

**Miele**  
PROFESSIONAL

for at anvende langsommere og mindre nøjagtig indirekte temperaturkontrol (IR) eller indirekte trykkontrol. Med muligheden for et højt tryk er der også mulighed for at oplukke prøver med en større vægt end ved oplukning i en lukket beholder. Det gælder især for prøver med et stort fedtindhold, da disse genererer et højt tryk ved oplukning pga. dannelsen af CO<sub>2</sub>. Forbrugsomkostningerne er markant lavere: Ved SRC-oplukning anvendes billige engangsrør, mens systemer med en lukket beholder typisk kræver årlig udskiftning af alle beholdere, skærme og hætter. Ved SRC-oplukning anvendes også mindre syre (typisk 4 ml, hvorimod oplukning med en lukket beholder kræver 8 ml), hvilket reducerer forbrugsomkostningerne og også formindsker niveauet af reagensblank.

## Fremgangsmåde ved SRC-oplukning

SRC-processen er ekstremt simpel og højt automatiseret. Processen er beskrevet i figur 1. Prøverne vejes over i rør, syre tilsættes, og prøverne anbringes i prøveracket. Racket anbringes i toppen af kammeret (1), som automatisk sænkes ned i kammeret. Prøverne er omgivet af en væske, hvilket giver en ensartet modtagelse af mikrobølgeenergien. Det sikrer en jævn distribution og ensartede betingelser for alle kørsler. Kammerets lukkemekanisme låses (2), og kammeret sættes under et tryk på 40 bar vha. N<sub>2</sub> (3). Det mikrobølgeprogram, der anvendes, er stort set det samme for alle typer af prøver og omfatter kun den tid, det tager at opnå temperaturen (ramp time), og den tid, temperaturen fastholdes (hold time) Når programmet stopper, nedkøles kammeret hurtigt med vand, trykket slippes forsigtigt, og gas og dampe ledes væk via aftræk (5). Lukkemekanismen frigøres, og prøveracket løftes automatisk frit af kammeret (6) (figur 2). De oplukkede prøver fortyndes blot til den rigtige volumen og bliver i røret, det er ikke nødvendigt at overføre prøverne igen.

## SRC-teknologien i miniature

UltraWAVE (Milestone) (figur 3) er en miniatureudgave, bordversion, af UltraCLAVE, og har ca. samme størrelse som et konventionelt mikrobølgesystem med en lukket beholder.

Kabinettet er lavet af rustfrit stål, og arbejdsområdet er omgivet af en tyk akrylskærm, som automatisk hæver og sænker sig sammen med toppen af SRC-kammeret. Sikkerhedsanordninger forhindrer, at processen sættes i gang, med mindre kammerets lukkemekanisme er på plads og låst. Mikrobølgegeneratoren på 1500 W forsyner et 1-liters-kammer med mikrobølgeenergi (3,5 l i UltraCLAVE). I kammeret er der plads til 15 x 15 ml rør (eller 22 x 10 ml rør til mikroprøver). Selvom prøvekapaciteten er mindre end i UltraCLAVE, betyder det mindre kammer i UltraWave også, at afkølingstiden er betydeligt kortere. En effektiv vandafkøling af kammeret betyder, at afkølingen af prøverne også går hurtigere end ved systemer med en lukket beholder trods den højere temperatur ved prøveoplukning. Den maksimale driftstemperatur er 300°C, og det maksimale tryk er 199 bar, og dermed opnås totaloplukning af selv de mest besværlige prøvetyper. Kammeret er udstyret med forseglet beklædning af PTFE, hvilket forhindrer, at syredampe medfører tæring, og derfor kan alle oplukningssyrer eller -blandinger anvendes. Op til 1,25 g organisk prøvemateriale kan oplukkes i 15 ml rørene. Til prøver med en større vægt findes der andre prøverack med større rør. Der tilbydes prøverør i glas, quartz eller TFM.

## Sammenligning af prøvekapacitet:

### UltraWAVE vs. prøveoplukning i lukket beholder

Når man måler prøvekapaciteten ved mikrobølgesupporteret prøveoplukning, skal der tages højde for tidsforbruget i for-



Figur 3. UltraWAVE mikrobølgesupporteret SRC-prøveopluknings-system.

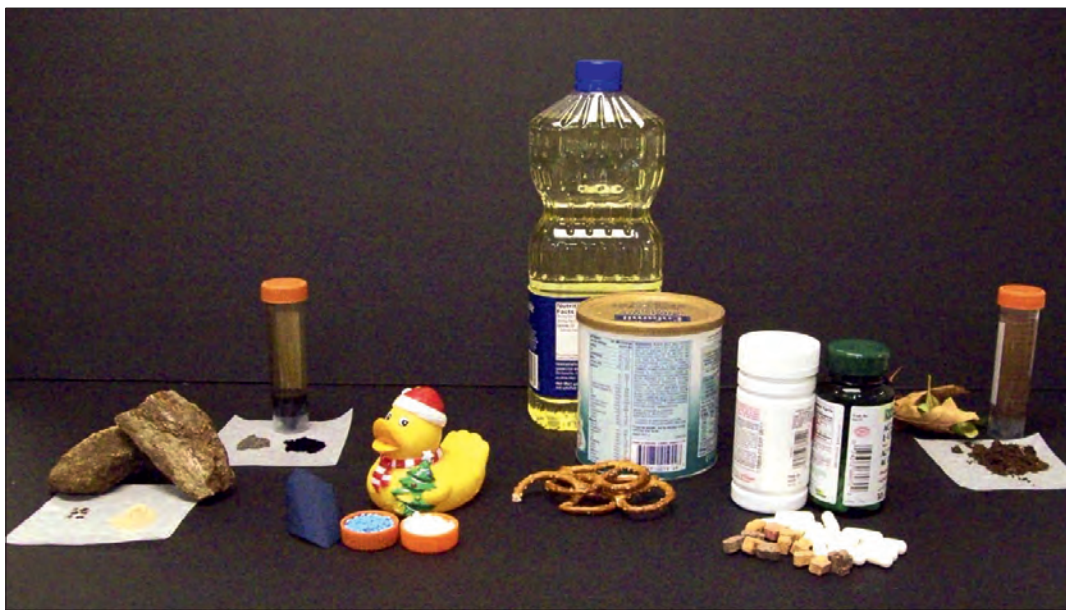
bindelse med afvejning af prøvemateriale, tilsætning af syre, samling af beholderen, mikrobølgeprogrammet, afkøling, og adskillelse af beholderen. Forudsat at der anvendes to roto-

| Lukket beholder med to højtryksrotorer (12 positioner)                                                                                    |           | UltraWAVE med to rack (15 positioner)                                                                                                          |            |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| Afvej 12 prøver, tilsæt syre, saml beholderen, sæt i rotoren (0,25 g prøve + 8 ml HNO <sub>3</sub> , 2 ml H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> ) | 24 min.   | Afvej 15 prøver, tilsæt syre, og sæt hætte på, anbring rør i rack (0,25 g prøve + 4 ml HNO <sub>3</sub> , 1 ml H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> ) | 10 min.    |
| Mikrobølgeprogram: 20 min. til 210 °C, hold i 20 min.                                                                                     | 40 min.   | Mikrobølgeprogram: 10 min. til 210 °C, hold i 20 min.                                                                                          | 30 min.    |
| Afkøling til 65 °C                                                                                                                        | 20 min.   | Afkøling til 65 °C, fjern tryk fra kammer                                                                                                      | 15 min.    |
| Skil beholderen ad                                                                                                                        | 12 min.   | Skil beholderen ad                                                                                                                             | N/A        |
| Total kørselstid                                                                                                                          | 96 min.   | Total kørselstid                                                                                                                               | 55 min.    |
| Efterfølgende kørsler (saml den 2. rotor under den første kørsel)                                                                         | 72 min.   | Efterfølgende kørsler (saml den 2. rotor under den første kørsel)                                                                              | 45 min.    |
| Antal kørsler i en 8-timers-vagt                                                                                                          | 6,3       | Antal kørsler i en 8-timers-vagt                                                                                                               | 10,4       |
| <b>Det totale antal prøver oplukket i en 8-timers-vagt</b>                                                                                | <b>76</b> | <b>Det totale antal prøver oplukket i en 8-timers-vagt</b>                                                                                     | <b>157</b> |

Tabel 1. Oplukning af HDPE-polymere; lukket beholder med højtryksrotor vs. UltraWAVE.

| Lukket beholder med to højtryksrotorer (24 positioner)                                                                                    |            | UltraWAVE med to rack (15 positioner)                                                                                                          |            |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| Afvej 24 prøver, tilsæt syre, saml beholderen, sæt i rotoren (0,25 g prøve + 8 ml HNO <sub>3</sub> , 2 ml H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> ) | 35 min.    | Afvej 15 prøver, tilsæt syre, og sæt hætte på, anbring rør i rack (0,25 g prøve + 4 ml HNO <sub>3</sub> , 1 ml H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> ) | 10 min.    |
| Mikrobølgeprogram: 20 min. til 180 °C, hold i 10 min.                                                                                     | 30 min.    | Mikrobølgeprogram: 10 min. til 180 °C, hold i 10 min.                                                                                          | 20 min.    |
| Afkøling til 65 °C                                                                                                                        | 30 min.    | Afkøling til 65 °C, fjern tryk fra kammer                                                                                                      | 12 min.    |
| Skil beholderen ad                                                                                                                        | 15 min.    | Skil beholderen ad                                                                                                                             | N/A        |
| Total kørselstid                                                                                                                          | 110 min.   | Total kørselstid                                                                                                                               | 42 min.    |
| Efterfølgende kørsler (saml den 2. rotor under den første kørsel)                                                                         | 75 min.    | Efterfølgende kørsler (saml den 2. rotor under den første kørsel)                                                                              | 32 min.    |
| Antal kørsler i en 8-timers-vagt                                                                                                          | 6          | Antal kørsler i en 8-timers-vagt                                                                                                               | 14,7       |
| <b>Det totale antal prøver oplukket i en 8-timers-vagt</b>                                                                                | <b>144</b> | <b>Det totale antal prøver oplukket i en 8-timers-vagt</b>                                                                                     | <b>220</b> |

Tabel 2. Oplukning af plantemateriale; lukket beholder med højtryksrotor vs. UltraWAVE.



Ultrawave kan oplukke forskellige typer prøver simultant med ét og samme program.

rer, kan den anden rotor fyldes op, mens den første kørsel er i gang. Tabel 1 viser en sammenligning af prøvekapaciteten for prøveoplukning i hhv. en lukket beholder og med UltraWAVE i forbindelse med oplukning af prøver bestående af HDPE-polymerer (højtrykspolyethylen). Når HDPE-prøver oplukkes i en lukket beholder, er det nødvendigt med en højtryksrotor

– typisk anvendes en rotor med 12 positioner. Da UltraWave-beholderen ikke skal samles eller skilles ad igen, og da afkølingstiden er kortere, kan der oplukkes dobbelt så mange prøver med UltraWAVE som i en lukket beholder.

Tabel 2 viser en lignende sammenligning, her med en rotor med stor kapacitet, 24 positioner, til oplukning af plantemate- ►



Kan du se forskellen? Det kan vi heller ikke.

**DFA**  
INSTRUMENTS

I DFA markerer vi navneskiftet med attraktive priser på et udvalg af vores mest populære modeller.

Læs mere på [www.dfa.dk](http://www.dfa.dk)

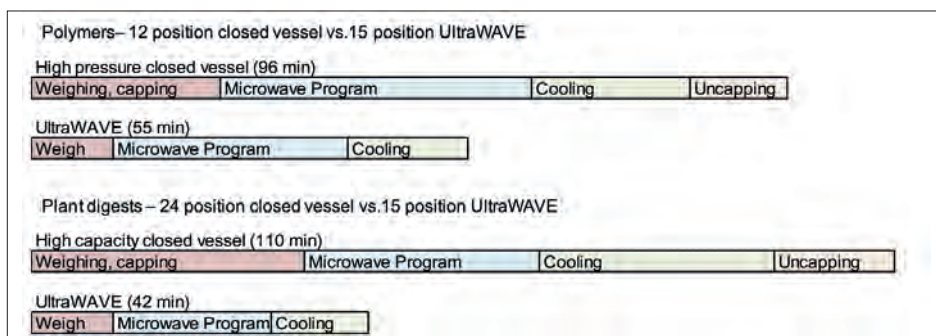
Og så alligevel! Sanyo er blevet medlem af Panasonic Group og produkterne skifter navn til Panasonic. Der ændres ikke på den europæiske salgs- og serviceorganisation, så i DFA kan vi forsat fremover tilbyde bedste priser samt optimal support. Vores vision om at designe og producere de bedste biomedicinske produkter er i den nye organisation yderligere forstærket.

**Panasonic**

det nye navn for **Sanyo**



Figur 4. Grafisk sammenligning af kørselstid.



Figur 5. Grafisk sammenligning af det antal prøver, der kan oplukkes i løbet af en 8-timers vagt.



Artiklen af Tim Michel er publiceret i American Laboratory, November/December 2010

riale. Trods det, at denne applikation kan anvende en rotor med større kapacitet, er UltraWAVE stadig 1,5 gang så produktiv. Figur 4 er en grafisk fremstilling; bemærk, at tiden til at skille beholderen ad, fuldstændigt elimineres med UltraWAVE. Figur 5 er en grafisk sammenligning af det antal prøver, der kan oplukkes vha. de to teknikker i løbet af en 8-timers vagt. Det skal også bemærkes, at skønt rotoror med 40 positioner kan benyttes i forbindelse med prøveoplukning i en lukket beholder, så er det sjældent, at deres fulde kapacitet udnyttes, fordi det tager meget længere tid at nå temperaturen pga. den belastning, der er på mikrobølgerne, og i nogle tilfælde ville maksimumtemperaturen slet ikke blive nået.

Ovenstående sammenligning tager slet ikke højde for den tid, man skal bruge i systemet med den lukkede beholder til rengøring af beholderen. I forbindelse med ICP-OEC-analyse skal beholderne rengøres dagligt, og i forbindelse med sporstofanalyse vha. ICP-MS skal de rengøres forud for hver kørsel, ideelt set vha. en mikrobølgesupporteret kørsel af en blankprøve med syre. De glasrør, der anvendes med UltraWAVE, bortskaffes ganske enkelt, når prøven er blevet analyseret. Sammenligningen tager heller ikke højde for den ekstra produktivitet, der opnås med UltraWAVE som følge af, at den kan køre batcher af blandede prøver – hvilket er en meget stor fordel for de laboratorier, der oplukker mange forskellige prøvetyper.

| Beholdere              | Arsen (µg/l) | Kadmium (g/l) | Kviksølv (µg/l) | Bly (µg/l) |
|------------------------|--------------|---------------|-----------------|------------|
| Quartz (kan genbruges) |              |               |                 |            |
| Min.                   | 0,03         | 0,01          | < 0,01          | 0,29       |
| Max.                   | 0,05         | 0,02          | 0,02            | 0,48       |
| Gennemsnit             | 0,04         | 0,01          | 0,01            | 0,40       |
| Glas (til engangsbrug) |              |               |                 |            |
| Min.                   | < 0,01       | < 0,01        | < 0,01          | 0,05       |
| Max.                   | 0,01         | 0,01          | 0,03            | 0,13       |
| Gennemsnit             | < 0,01       | 0,01          | 0,02            | 0,09       |

Tabel 3. Indhold i blankprøver i et blandet batch (data fra UltraCLAVE).

## Undersøgelse af rørenes betydning for indhold i blankprøver

Med henblik på at bekræfte, at der ikke forekommer nogen krydskontaminering, og for at kontrollere glasrørenes betydning for blankprøverne, blev quartz- og glasrør med reagensblank (4 ml HNO<sub>3</sub> af høj renhed) anbragt i et batch med blandede prøver til oplukning, hhv. legetøj, forbrugerprodukter og farmaceutiske prøver. Rørene blev ikke rengjort før anvendelse. Tabel 3 viser koncentrationerne af de 4 centrale analytter i blankprøverne, de blev målt vha. kollisionscelle ICP-MS. I alle tilfælde var indholdet i blankprøverne på lavt til mellem ppt-niveau. Der forekom ingen krydskontaminering, og for disse analytter er glasrør til engangsbrug tydeligvis anvendelige.

## Sammendrag

SRC-teknologien ændrer det traditionelle arbejdsflow i forbindelse med mikrobølgesupporteret prøveoplukning, idet den fjerner de begrænsninger, der er i forbindelse med systemer med en lukket beholder. Prøvekapaciteten er op til to gange så stor, og arbejdsindsatsen er signifikant mindre, da beholderen kræver mindre håndtering og rengøring. Det er ikke nødvendigt, at samle prøver med samme matrix og køre dem i batche, og det er en stor fordel for laboratorier, der oplukker forskellige prøvetyper. Metodeudviklingen er stort set elimineret, og den høje temperatur og det høje tryk bevirker, at der opnås en prøveoplukning af særdeles god kvalitet for de mere besværlige prøvetyper. Forbrugsomkostningerne er markant lavere, og forbruget af syre til oplukning reduceres med 50%. Endelig er UltraWAVE lille, så den er lige så bekvem at installere som et system med en lukket beholder.

E-mail-adresse  
Brian Wohler: bw@holm-halby.dk

# Grøn og hurtig metode til COD-bestemmelse

Biolab A/S præsenterer PeCOD™-teknologien. Kernen i teknologien er PeCOD™-sensoren, som består af UV-aktiverede nanopartikler af  $\text{TiO}_2$  (titandioxid) i en sensorenhed. Det giver et højt elektrokemisk potentiale at anvende  $\text{TiO}_2$ .

Metoden er hurtig (ca. 5 minutter pr. prøve), og den eliminerer anvendelse af farlige kemikalier, øger sikkerheden for laboratoriets personale og reducerer bortskaffelsesomkostninger.

PeCOD-metoden er velegnet til spildevandsbranchen, da de hurtige resultater kan give vigtige oplysninger for procesovervågning og kontrol. Konstant COD-overvågning kan beskytte renseanlæg fra høje COD-niveauer ved at give hurtigt varsel om et problem.

Selv havvandsprøver kan analyseres. Komplet oxidation af organiske arter sikrer høj nøjagtighed og reproducerbarhed, og PeCOD har ppb-følsomhed og god

reproducerbarhed. Kan også kombineres med andre parametre såsom pH, alkalinitet og turbiditet til multi-parameter analyse fra en enkelt prøve. Det er muligt at automatisere op til 71 prøver pr. batch.

Yderligere information:

Biolab A/S

Tlf. 86 21 28 66

E-mail: [sales@biolab.dk](mailto:sales@biolab.dk)

## Ny gasdetektor

GasDetect præsenterer Oldham's nyudviklede, digitale gasdetektor OLTC 10N til detektering af gasserne  $\text{O}_2$ , CO, NO,  $\text{NO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{S}$  og  $\text{NH}_3$  i lavrisiko-områder.

OLTC 10N's output er kompatibelt med virksomhedens MX43 kontroller og giver, når de anvendes sammen, fuldt udbytte af den digitale teknologi: Op til 32 detektorer pr.

kanal eller linje, unik og dedikeret sensoradresse, som giver individuel registrering af signalet, flere detektor-/sensortyper kan kanaliseres ad samme linje, reducerede installationsomkostninger.

ATEX- og LEL-versioner til overvågning af brændbare gasser vil om kort tid blive inkluderet i leveringsprogrammet.



Yderligere information:

GasDetect

Søren Torsbjerg Møller

Tlf. 42 42 50 30

E-mail: [stm@gasdetect.dk](mailto:stm@gasdetect.dk)

[www.gasdetect.dk](http://www.gasdetect.dk)



## ALSIDENT® udsugningssystemer

– gør arbejdsmiljøet renere!

 **alsident®  
system**

[www.alsident.com](http://www.alsident.com)

Finlandsvej 10 · DK-8450 Hammel · Tlf. +45 86 96 50 00

## Nyt ICP-MS-system

Thermo Fisher Scientific præsenterer et nyt ICP-MS-system, iCAP-Q, som indeholder en række nye teknologiske løsninger. Systemet tilbyder avanceret "high performance" med hurtige analyser, overbevisende prøvetolerance og høj "opetid".

iCAP-Q er velegnet til at arbejde i laboratorier inden for farma, klinik, metaller, geokemi og miljø. Den nyudviklede kollisionscelleteknik med QCellen giver forbedret strålefokusering, hvilket resulterer i høj følsomhed og markedets laveste baggrund. Samtidig er det muligt at analysere over hele masseområdet i single mode uden at skulle "switch". Resultatet er meget stor prøveomsætning, da et fuldt skan med triplikat-udlæsning kun tager 1 minut.

Sammen med Qtegra softwarepakken udgør iCAP Q ICP-MS et intuitivt

system, som forenkler operationen og forbedrer effektiviteten af analyserne og af arbejdet i laboratoriet. Systemet er fuldt automatiseret med adgang til valgte analyser med kun et klik med musen.

Alle opgaver med vedligehold og prøvehåndtering foregår i bordsøjde – et væsentligt tiltag og god ergonomi. Renhold og udskiftning af torch, sample/skimmer cones og ion-linse sker som plug & play med et minimum forbrug af tid. Alle tilslutninger sidder på systemets sider – ingen på bagsiden. iCAP-Q kan derfor placeres helt op til bagvæggen og derved være med til at spare plads i laboratoriet.

Den nyudviklede Qtegra softwareplatform til sporelement-analysesystemer rummer funktioner for let tilslutning af tilbehør og såkaldte hyphenated techniques: IC-ICP-MS, HPLC-ICP-MS, GC-ICP-MS og LA-ICP-MS.



Yderligere information:  
Thermo Fisher Scientific  
Tlf. 36 36 90 90  
Produktspecialist Thomas Røll  
Tlf. 20 26 88 81  
E-mail: thomas.roll@thermofisher.com  
E-mail: analyze.dk@thermo.com

## Ny dansk agent for Q-Lab-testkamre

Q-Lab, en af verdens største producenter af udstyr til bestemmelse af bl.a.:

- Korrosionsbestandighed - salttåge- & kondensationskamre
- Sollys - Florida- & Arizona-test, UV- & Zenon-test m.fl.
- Testpaneler til vejrbestandighedstest samt udendørs rack-stativer

har pr. 1. april valgt PA-Teknik som ny dansk distributør.

Q-Lab's produkter anvendes i dag inden for såvel farve- & lak, fødevarer-, plast- og polymerbranchen, tekstiler, pakke- & bygningsmaterialer m.fl. PA-Teknik præsenterer i forvejen BYK-Gardner, der er kendt for bl.a. farve-, glans- og lagtykkelsesmåle-

udstyr. Der tilbydes service og kalibrering af såvel nyt som eksisterende udstyr.

Yderligere information:  
PA-Teknik  
Tlf. 21 20 38 72  
E-mail: pa@pa-teknik.dk  
www.pa-teknik.dk

## Online glucosemåling

Aage Christensen A/S præsenterer BioPAT® Trace fra Sartorius Stedim Biotech, der bruges i laboratorier til simultan online-måling af glucose og lactat, f.eks. ved industrielle dyrkninger af mikroorganismer eller mæmmale celler.

Målingerne sker kontinuerligt og egner sig både til batchvis og kontinuerlige processer. Målefrekvensen er op til 1 analyse/minut.

Data logges via standard analog-output (0 til 20 mA, 0 til 10 V eller 4 til 20 mA), RS-232, eller Ethernet-forbindelse, som via netværk forbinder BioPAT® Trace til pc'er. Den medfølgende software muliggør lagring og grafisk visning af måleresultater.

Der findes 2 forskellige sensorer. En filter-probe, hvor prøven suges ud og

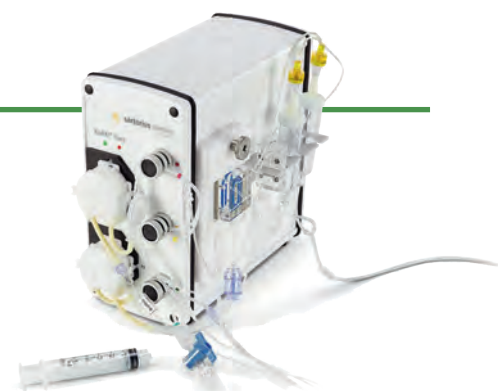
analyseres i apparatet, og en dialyseprobe til direkte måling af glucose/lactat-koncentrationen. Proberne fås til 12 mm, 19 mm og 25 mm porte. Begge typer egner sig naturligvis til steril prøveudtagning.

Analysefunktionerne er baseret på en kombination af enzymatiske reaktioner og anode-oxidation, hvorpå glucose- og lactat-koncentrationer kan detekteres som funktion af ledningsevnen.

Designet er enkelt, og betjening kræver blot en ganske kort demonstration.

Detektionsintervallet for glucose spænder fra 0,01 g/l til 40 g/l og for lactat fra 0,05 g/l til 5 g/l. Prøvevolumen er på 1,5 ml/prøve ved filtermåling og X ml/prøve ved dialysmåling.

- Online glucose- og lactatmåling.
- Substratanalyse i fermentor.



- Fuldautomatisk og selvkalibrerende.
- Plug & Play.
- Genanvendelige prober.
- Brugte sensorer & kassetter bortskaffes som standard affald efter autoklavering.

Yderligere information:  
Aage Christensen A/S  
Tlf. 36 44 24 44  
E-mail: info@aagechristensen.dk  
www.aagechristensen.dk

# Regulatorer til trykregulering af farmaceutiske og biotekniske systemer

Swagelok præsenterer Swagelok® RHPS PRSTC-modellen af fjederbelastede trykreducerende regulatorer, der sikrer præcis regulering af tryk på gas og væsker i farmaceutiske og biotekniske systemer. Indløbstryk på op til 230 psig (16 bar) kan reguleres til udløbstryk fra 4,3 til 130 psig (0,3 til 9 bar). Driftstemperaturområdet er fra -31° til 284°F (-35° til 140°C).

Der findes tre ventilstørrelser: ½, 1, og 1½ in., alle med hygiejniske clamp-samlinger.

Flow-koefficienter ( $C_v$ ) er 0,70 (½ in.), 1,95 (1 in.), og 5,48 (1½ in.). Designet til hygiejnisk service, overfladebehandlingen af regulatorens indvendige overflader lever op til standarden 16 µin. (0,4 µm)  $R_a$ .

Ventil og fjederhus er konstrueret i 316L rustfrit stål. Membran, sæde, og O-ringe opfylder FDA, EPDM. Alle regulatorer er testet 100% fra fabrikken, affedt med ultralyd og rensset. Rensning i henhold til ASTM-G93 Level C/CGA 4.1 kan vælges til.



Yderligere information:  
Swagelok Danmark  
Regulator specialist Peter Rask  
Tlf. 76 12 19 50  
E-mail: pr@swagelok.dk  
www.swagelok.dk

## Multiplade pipettering

Viaflo præsenterer med Viaflo 96 et nyt koncept inden for multiplade pipettering.

Viaflo96 er en elektronisk 96 kanals pipette med mange forskellige pipetterings- og dispenseringsmuligheder.

Viaflo96 bruges som en almindelig håndholdt pipette, men understøttes af en servostyringsmekanisme, der sikrer hurtig, præcis og stressfri multikanals pipettering.

Ved et let skub af håndtaget, bevæges pipetteringshovedet i den ønskede retning.

Det kompakte design, gør instrumentet nemt at placere i laboratoriet eller i en lab-bænk.

Med 4 forskellige multikanalshoveder, kan det anvendes til voluminer fra 0,5 µl og op til 1250 µl.

Det lette skift mellem hovederne tager under 1 minut. Der anvendes Viaflo96



GripTips, der loades vha. et tryksystem, der mindsker brug af egen kraft. Det sikrer en korrekt tilpasning af alle 96 spidser på én gang. Der anvendes altid filtertips, som beskytter pipettehovedet mod aerosoler og anden kontaminering.

Viaflo96 bruges til plader i standard SBS-format, hvilket betyder at gængse Deep-well og 96/384 brøndsplader kan anvendes.

Instrumentet er brugervenligt og fordele som produktivitet, komfort og korrekt ergonomi ses straks.

Yderligere information:  
Dandiag A/S  
Kontakt: Kirsten Thuesen  
Tlf. 43 43 30 57  
E-mail: dandiag@dandiag.dk

## 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



## LUFTSTRÅLE SIGTEAPPARAT AS 200 JET

**Retsch**  
Solutions in Milling & Sieving

- Hurtig sigtning af fint pulver
- Præcise, reproducerbare resultater
- Stort måle område fra 10 µm til 4 mm

**SKANLAB**

Kvinderupvej 30 · 3550 Slangerup · Tlf: 4738 1014 · www.retsch.dk



## 2D Barcode Reader for Biobanking Operations

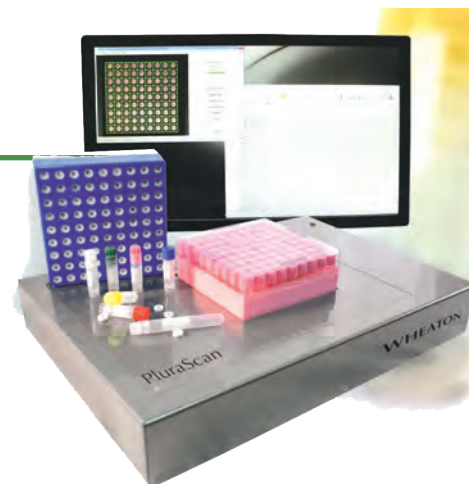
Wheaton introduces PluraScan, a new device for scanning and reading 2D data matrix barcodes on multiple cryo tubes simultaneously through open-bottom freezer boxes.

The PluraScan is a barcode scanner designed to capture data stored as 2D data matrix barcodes on cryogenic storage vials, thus saving time while reducing data entry errors. The PluraScan Barcode Reader comes with an out-of-the-box software decoder system to import repository samples into the existing laboratory management software package.

Capable of scanning up to 100 samples simultaneously, the PluraScan Barcode Reader can scan and read individual barcodes on each vial stored in an open-bottom cryogenic storage box simply by

placing the box on the scanner. A frost reduction system allows the PluraScan Barcode Reader to scan up to 40 WHEATON KeepIT® 81 or 100 Boxes immediately after removal from ultra-low temp storage (3,240 or 4,000 samples, respectively). The acquired, decoded 2D data are imported directly into most laboratory information management systems (LIMS) and databases, ensuring a reliable method of storing, tracking and retrieving sample vials.

The PluraScan Barcode Reader scans 2D data from any vial or ampule, and is adaptable for use with many different rack and box formats. It connects easily to a computer with a standard USB 2.0 interface and integrates smoothly with Windows® operating systems.



More information:

Wheaton

Phone: 800 225 1437 in the USA or 856 825 1100 for international callers  
www.cryofeed.com and click on the "Products" tab

## Gennembrud for GC-analyser

Thermo Scientific præsenterer den nye TRACE™ 1300 series GC, der er den første og eneste gaskromatograf med bruger-udskiftelige miniaturiserede, instant connect-injektorer og -detektorer, der redefinerer brugervenlighed i rutinemæssige og high-throughput laboratorier.

Det modulære design giver øjeblikkelig adgang til injektorer og detektorer, fjerner vedligeholdelses- og nedetid og giver brugeren mulighed for hurtigt at skræddersy instrumentet til specifikke applikationer og daglige arbejdsopgaver.



- Modular, instant connect-detektorer og -injektorer
- Nem metodeimplementering
- Uovertruffen injektor robusthed
- Høj detektorfølsomhed
- Chromeleon™ CDS instrument-kontrol

Yderligere information:

Thermo Fisher Scientific  
Willy Bjørklund  
Tlf. 70 23 62 60

E-mail: analyze.dk@thermo.com  
www.thermodanmark.dk

## Nyt navn til biomedicinske produkter

Den 1. april 2012 skiftede alle Sanyos biomedicinske produkter navn til Panasonic Biomedical. Det skete som et resultat af sammenlægningen af Sanyo Biomedical Group og Panasonic Biomedical Group.

DFA A/S har i over 20 år leveret og servicert Sanyo frydere, inkubatorer og køleskabe til mange danske laboratorier. Og virksomheden fortsætter med at tilbyde produkterne, nu hedder de blot Panasonic. Sanyo frydere servicerer fortsat.

Navneskiftet fejres med en række pris-tilbud frem til 30. maj. Panasonic-mo-



dellerne er meget lavt energiforbrugende frydere. Der gives 5-års totalgaranti samt

andre omkostningsfrie ydelser med i købet.

Navneskiftet fejres ligeledes med en konkurrence, hvor man kan vinde et Panasonic Lumix DMC-FZ48 kamera.

Yderligere information:

DFA Instruments A/S  
Tlf. 72 48 84 31

E-mail: ak@dfa.dk  
www.dfa.dk

# Magnetic Stirrer

Bibby Scientific Limited introduces the new SM5 Mini Stirrer. The versatile and economical magnetic stirrer is very simple to operate, providing stirring speeds of 350 to 2,000 rpm. The SM5 is lightweight yet strong, constructed from polypropylene with a chemically resistant polycarbonate top.

The SM5 has a robust casing which

incorporates silver-based BioCote® anti-microbial protection for enhanced safety. It can mix 1 litre at adjustable speeds. It has a choice of three different fascia designs: Blue with the Stuart logo, a Bibby Scientific image or an abstract blue swirl.

More information:  
Bibby Scientific Limited



Tel: +44 (0) 1785 812121  
E-mail: [info@bibby-scientific.com](mailto:info@bibby-scientific.com)  
[www.stuart-equipment.com](http://www.stuart-equipment.com)  
[www.bibby-scientific.com](http://www.bibby-scientific.com)

# Håndholdt automatisk analytisk sprøjte

Mikrolab A/S præsenterer fra SGE verdens første fuldautomatiske analytiske sprøjte eVol®. Sprøjten er skabt ved at kombinere en analytisk sprøjte med en digital kontrolenhed. Den digitale enhed betyder, at nøjagtigheden ved væskehåndtering, som pipettering og dispensering, bliver uafhængig af brugeren, og derved kan procedurer udføres ens hver gang. Det øger repeterbarheden og mindsker antallet af falsk-positive prøver.

## Nøglefunktioner:

- Dispenserer fra 200 nL op til 500 µl med kun 3 forskellige sprøjter.
- eVol® har farvedisplay, og er udstyret med "touch wheel interfacet".
- Menuerne er brugervenlige, og parametrene kan hurtigt og effektivt indstilles.
- eVol® har indbygget kalibreringsfunktion og lever bl.a. op til GLP, GMP og FDA. Anvendelsesområder er typisk forberedelse af kalibreringsstandarder, tilførsel af inter-

ne standarder, præcisionsdispensering af ikke-vandige væsker og fortyndingsrækker.

Yderligere information:  
Mikrolab A/S  
Tlf. 86 29 61 11  
E-mail: [ml@mikrolab.dk](mailto:ml@mikrolab.dk)



BC Bella Center  
Copenhagen



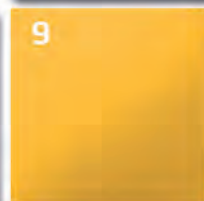
# Scanlab

25. - 27. SEPTEMBER 2012

[scanlab.dk](http://scanlab.dk)

## EXPLORE THE CHEMISTRY BETWEEN PROFESSIONALS

Sæt kryds i kalenderen allerede nu. Oplev Scanlab 2012, udvid dit netværk og søg ny viden på laboratoriebranchens fagmesse i Bella Center.





VI GENTAGER SUCCESSEN FRA 2011  
OG AFHOLDER LABDAGE IGEN  
D. 22. OG 23. MAJ.

*- kom over  
stregen med  
Holm & Halby*

Vi gentager succesen fra 2011 og afholder LabDage igen d. 22. og 23. maj.

I år afholdes LabDage i de flotte lokaler hos Bojesen hos Axelborg. Centralt på Vesterbrogade i København, lige over for Hovedbanegården – meget nemt at komme til.

Denne gang bliver der endnu flere seminarer, målrettet netop efter dine behov.

Du kan læse mere, og tilmelde dig, på vores hjemmeside [www.labdage.dk](http://www.labdage.dk)



*I år kickstartes LabDagene af Arne Nielson med foredraget; "Viljen til sejr"*

**SEMINARER MED VÆGT PÅ FAGLIGHED**

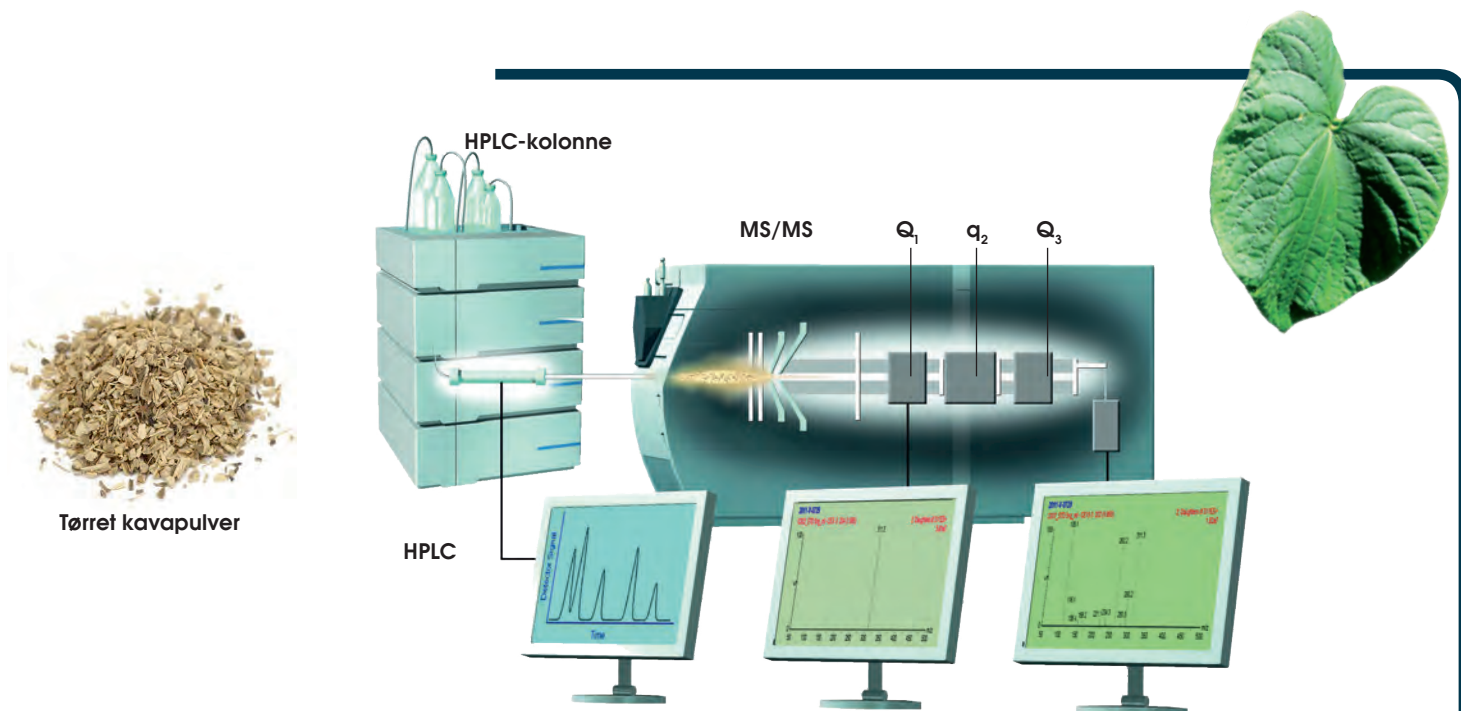
Læs mere om  
LabDage her



Vallensbækvej 35  
Telefon: [+45] 4326 9400  
Telefax: [+45] 4326 9410

DK-2605 Brøndby  
[www.holm-halby.dk](http://www.holm-halby.dk)  
[info@holm-halby.dk](mailto:info@holm-halby.dk)

**Holm & Halby**  
TIL LABORATORIER I UDVIKLING



### ■ Sådan analyseres indholdsstoffer i ekstrakter

Indholdsstofferne i traditionelle og vestlige kavaekstrakter blev analyseret via en kombination af væskechromatografi og massespektrometri, som kaldes LC-MS/MS. Først adskilles de forskellige stoffer i ekstrakterne vha. højtryksvæskechromatografi (HPLC). Derpå fordampes opløsningsmidlet, og indholdsstofferne ioniseres ved at påføre dem en spænding, hvorpå de sendes ind i massespektrometret.

Ioner med et specifikt masse-ladningsforhold kan nu isoleres i massespektrometrets første kammer. I det andet kammer slås ionerne i stykker til mindre fragmenter, og i det tredje kammer kan specifikke fragmenter isoleres.

Teknikken er velegnet til at detektere konjugater, fordi man i det første kammer kan isolere ioner med et masse-ladningsforhold, som svarer til summen af de stoffer, som tilsammen udgør et givet konjugat. Efter fragmenteringen i det andet kammer kan man bestemme masse-ladningsforholdet af udgangsstofferne i det tredje kammer og derigennem vise, hvilke stoffer konjugatet blev dannet af.

Metoden kan også anvendes til at søge efter konjugater i en prøve. Hvis man f.eks. forventer, at et stof reagerer med glutathion, kan man bruge et fragment fra glutathion til at lede efter større forbindelser, som indeholder dette fragment.

© SUND-KOMM/Henning Dalhoff.

◀ Fortsat fra side 16

er fremstillet med de traditionelle metoder på Stillehavsøerne. Ydermere viser tidligere forskning, at kemiske stoffer, med strukturer der ligner flavokavainers, nedbrydes i vandige opløsninger til stoffer, som sandsynligvis ikke er reaktive. Desuden har man påvist glutathion i vandige ekstrakter af kava, men ikke i organiske ekstrakter. Evt. reaktive stoffer, der måtte ekstraheres i vand, vil derfor kunne "afgiftes" ved at reagere med co-ekstraheret glutathion.

### Mistanke til organiske ekstrakter

Vi har undersøgt forskellige vandige og organiske ekstrakter af kava, og vha. væskechromatografi og massespektrometri (LC-MS/MS) har vi påvist konjugater mellem flavokavainers og glutathion, hvor de to stoffer er gået i forbindelse med hinanden. Dette bekræfter, at flavokavainerne er reaktive, i hvert fald i laboratorieforsøg.

Konjugaterne mellem flavokavainers og glutathion blev påvist

■ Artiklen er baseret på en artikel fra Lægemiddelforskning 2011 fra Det Farmaceutiske Fakultet, Københavns Universitet

i tre forskellige organiske ekstrakter, mens der ikke blev fundet konjugater mellem kavalaktoner og glutathion. Mængden af flavokavainers, der blev ekstraheret i vand, var forsvindende lille sammenlignet med mængden i et organisk ekstrakt. Vores forsøg bekræfter desuden, at flavokavainerne i vandige opløsninger nedbrydes til ikke-reaktive forbindelser med en hastighed, som er signifikant hurtigere end i organiske opløsningsmidler. I organiske solventer var flavokavainerne stabile over en periode på mere end 8 timer. Disse opdagelser tyder på, at flavokavainers kan være involveret i leverskader, samt forklare årsagen til, at der ikke ses en øget forekomst af leverskader på Stillehavsøer, hvor brugen af kava er udbredt. Ved den traditionelle fremstilling af de ceremonielle drikke vil flavokavainers blive ekstraheret i meget mindre mængde, og den andel, som ekstraheres, vil blive nedbrudt i løbet af relativ kort tid.

Selvom man skulle synes, at mysteriet om kavas toksicitet nu er løst, så mangler der naturligvis yderligere studier af flavokavainers for at bekræfte vores teori. I praksis er det dog næsten umuligt at fastslå med absolut sikkerhed, at flavokavainers er skyld i de få tilfælde af levertoksicitet ved indtagelse af kavaekstrakter, man har observeret i de vestlige lande – netop fordi så få personer rammes.

E-mail-adresse  
Line Olsen, LRO@farma.ku.dk

# Skadesvirkning ved forbrænding af forskellige brændsler

En sammenligning af naturgas, træ og halm.



Af Torben Kvist, DGC

På baggrund af offentligt tilgængelige data er der lavet en sammenligning af skadesvirkninger ved forbrænding af hhv. naturgas, halm og træ i fjernvarmeproducerende kedler. Heraf fremgår at de grønne og vedvarende brændsler ikke nødvendigvis er mindre skadelig end naturgas.

I efteråret 2011 publicerede Centre for Energy, Environment and Health (CEEH) en rapport [1], der konkluderede, at omkostningen, der vil være forbundet med at omlægge den danske energiforsyning til at være fossilfrit vil være betydeligt lavere end forudset af Klimakommissionen.

Det skyldes, at der i Klimakommissionens beregninger ikke er taget højde for de sundhedsrelaterede omkostninger ved forbrænding af fossile brændsler. Klimakommissionen foreslår, at de fossile brændsler erstattes af vedvarende kilder som vind og biomasse.

Omkostningerne, der er relateret til overgangen til en fossilfri energiforsyning er dog meget afhængig af, hvordan omlægningen sker. Dvs. af hvilke energikilder, der anvendes i overgangsperioden.

Derfor har DGC udført beregninger, der sammenholder sundhedsrelaterede omkostninger og omkostninger som følge af klimaeffekter ved forbrænding af halm, træ og naturgas.

## Metode og baggrundsdata

Denne artikel præsenterer undersøgelse af fjernvarmeproducerende kedler (ingen elproduktion) med mindre end 50 MW

indfyret effekt. Halm, træ og naturgas er valgt, da de hyppigt anvendes på fjernvarmeproducerende kedler.

## Emissionsfaktorer

Danmarks Miljøundersøgelser (DMU) samler og offentliggør, hvor store emissionerne er for forskellige forbrændingsteknologier fyret med forskellige brændsler. Emissionsfaktorerne, som disse emissionsdata kaldes, er angivet som gram emitteret stof pr. indfyret GJ brændsel. De anvendte emissionsfaktorer for kedler er vist i tabel 1.

I dette arbejde regnes træ og halm som CO<sub>2</sub>-neutral. Det betyder, at når klimaeffekt beregnes for disse brændsler, sættes emissionsfaktoren for CO<sub>2</sub> til nul i stedet for de værdier, der er angivet i tabel 1.

## Omkostninger for forskellige stoffer

De forskellige stoffer, der er angivet i tabel 1, har alle en vis skadelig virkning på omgivelserne. Der er dog stor forskel på,



| Enhed: g/GJ | SO <sub>2</sub> | NO <sub>x</sub> | NMVOC | CH <sub>4</sub> | CO  | CO <sub>2</sub> | N <sub>2</sub> O | PM <sub>2,5</sub> |
|-------------|-----------------|-----------------|-------|-----------------|-----|-----------------|------------------|-------------------|
| Træ         | 25              | 90              | 7,3   | 30              | 240 | 102.000         | 4                | 10                |
| Halm        | 130             | 90              | 7,3   | 30              | 325 | 102.000         | 4                | 12                |
| Naturgas    | 0,3             | 42              | 2     | 0,1             | 28  | 56.900          | 0,1              | 0,1               |

Tabel 1. Emissionsfaktorer for fjernvarmeproducerende kedler med indfyret effekt lavere end 50 MW. Data for 2010 fra [2].

hvor skadelige de forskellige stoffer er. Skadesvirkningerne er desuden afhængige af, hvor emissionen sker. F.eks. er der stor forskel på om NO<sub>x</sub>-emission sker fra biler i byer, hvor mange mennesker bliver direkte eksponeret, eller om emission sker fra en høj skorsten placeret et sted, hvor personeksponeringen er beskeden. Modsat har emission af drivhusgasser som CO<sub>2</sub>, lattergas (N<sub>2</sub>O) og metan (CH<sub>4</sub>) samme effekt, uanset hvor emissionen sker.

| Kr./kg           | CO    | SO <sub>2</sub> | NO <sub>x</sub> | PM <sub>2,5</sub> |
|------------------|-------|-----------------|-----------------|-------------------|
| Kraftværker      | 0,008 | 87              | 62              | 142               |
| Individuel varme | 0,014 | 160             | 132             | 210               |
| Industri forbr.  | 0,010 | 114             | 82              | 146               |
| Vejtransport     | 0,021 | 681             | 78              | 328               |

Tabel 2. Samfundsøkonomiske omkostninger ved udledning af CO, SO<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub> og PM<sub>2,5</sub> fra forskellige typer emissionskilder. Fra [3].

I den nyligt offentliggjorte rapport "CEEH's beregninger af helbredsomkostninger fra luftforurening i Klimakommissionens scenarier" [1] anvendes data for øgede sundhedsomkostninger som følge af emissioner fra bl.a. forbrændingsprocesser. Disse omkostninger kaldes også eksternaliteter eller eksterne omkostninger. De anvendte data stammer fra en baggrundsrapport fra samme sted [3].

Alle priser er fremkommet ved anvendelse af modelværktøjet, EVA. EVA er en forkortelse for "Economic Valuation of Air pollution". Det er et modelsystem, udviklet ved DMU, som kan foretage en integreret opgørelse af de eksterne omkostninger ved luftforureningen baseret på atmosfæriske modellering suppleret med OML.

Beregningen består af fire trin:

- atmosfærisk modellering af årsmiddelværdier for koncentrationsbidragene fra emissioner
- opgørelse af eksponering ud fra GIS-data over befolkning

gens placering; dette baseret på CPR-data med tilhørende aldersfordeling

- opgørelse af sundhedseffekter, dette baseret på dosis-respons-sammenhænge for eksponering og tilhørende statistiske forventninger til frekvensen for morbiditet<sup>1)</sup> og mortalitet<sup>2)</sup>
- værdisætning, der er baseret på enhedsværdier for de enkelte sundhedseffektslutpunkter (eksempelvis pr. mistet leveår, pr. sygedage m.v.)

Decentrale kraftvarmeanlæg ligger oftest i udkanten af mindre byer og anlæggene har placerings- og størrelsesmæssigt mere til fælles med anlæg til industriel forbrænding end med større kraftværker [4]. Derfor anvendes data for *industriel forbrænding* angivet i tabel 2 til beskrivelse af skadesomkostningerne.

De omkostninger, der er nævnt i ovenstående, dækker kun de sundhedsrelaterede omkostninger. Effekt på miljø og klima er ikke inkluderet i de data, der er angivet i tabel 2. Klimaefekt medtages i følgende ved at anvende en CO<sub>2</sub>-kvotepris på 113 kr./ton gældende for 2011 og en kvotepris på 257 kr./ton i 2030. Disse værdier er angivet i Energistyrelsens publikation "Forudsætninger for Samfundsøkonomiske analyser på energiområdet" [5]. Desuden er der regnet med at CH<sub>4</sub> og N<sub>2</sub>O er hhv. 21 og 310 gange kraftigere drivhusgasser end CO<sub>2</sub>.

## Fjernvarmekedler fyret med hhv. træ, halm og naturgas

Med de emissioner, der er angivet i tabel 1, og emissionsrelaterede omkostninger, der er vist for "Industriel forbrænding" i tabel 2 fås, at den samlede eksterne omkostning, der er forbundet med forbrænding af hhv. halm, træ og naturgas i kedler på varmeværker er som vist i figur 1. Heraf fremgår det, at på trods af at de to biobrændsler er regnet som CO<sub>2</sub>-neutrale er de eksterne omkostninger ved anvendelse af træ som brændsel stort set som for naturgas, mens omkostningen ved anvendelse af halm medfører væsentlig højere eksterne omkostninger. Det skyldes primært, at halm som brændsel indeholder betydeligt mere svovl end træ. Svovl frigøres ved forbrænding som SO<sub>2</sub>.

Ved anvendelse af en CO<sub>2</sub>-kvotepris for 2011 på 113 kr./ton fås, at de beregnede eksterne omkostninger er 20% højere ved anvendelse af træ i forhold til naturgas. Ved anvendelse af en CO<sub>2</sub>-kvotepris for 2030 på 257 kr./ton fås i stedet, at de beregnede eksterne omkostninger er 30% lavere ved anvendelse af træ ift. naturgas.

Figur 1 viser desuden, at de eksterne omkostninger pga. biomasserne primært skyldes NO<sub>x</sub> og SO<sub>2</sub>, der resulterer i regionale sundhedseffekter, mens naturgasanvendelse resulterer i klimaeffekter og kun i mindre grad resulterer i negative sundhedseffekter.

## Perspektivering

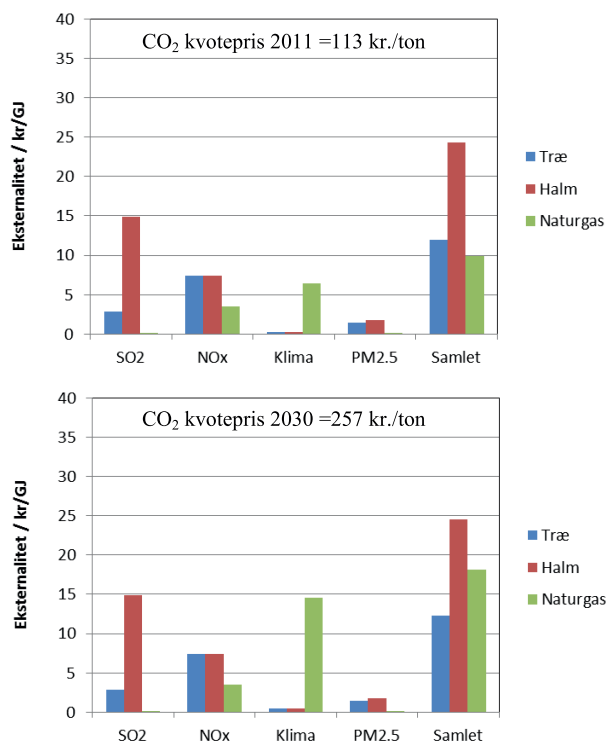
### Hvilke skadelige effekter er mindst ubehagelige

Beregningerne indikerer som nævnt, at skaderne forårsaget af halm og træ primært skyldes SO<sub>2</sub>- og NO<sub>x</sub>-emission. Disse stoffer resulterer i negative sundhedseffekter, der rammer regionalt. De negative effekter af anvendelse af naturgas resulterer primært i klimaeffekter, der rammer globalt.

Denne forskel bevirker, at når der prioriteres mellem biomasse og naturgas sker der en implicit prioritering mellem regionale sundhedseffekter og globale klimaeffekter.

### Betydning af hvor brændsler anvendes

På mindre anlæg, som er behandlet her, vil det ikke være rentabelt/nødvendigt at installere røggasrensning for at reducere emissionen af disse stoffer. Det kan det til gengæld være på større anlæg som f.eks. Amagerværkets blok 1, der er udstyret med både NO<sub>x</sub>- og svovlrensning og som er fyret med biomasse



Figur 1. Eksterne omkostninger som følge af emissioner fra fjernvarmekedler fyret med hhv. træ, halm og naturgas. Omkostninger fra de enkelte stoffer er som angivet for "Industriel varme" i tabel 2. Vist for CO<sub>2</sub>-pris for 2011 og som Energistyrelsen forventer CO<sub>2</sub>-kvoteprisen i 2030.

alene. Hvis man flytter biomassen til store anlæg med røggasrensning, vil der kunne opnås en betydelig reduceret emission.

Af det grønne regnskab for 2010 for Amagerværket fremgår det, at SO<sub>2</sub>-emissionen var 8,9 mg/m<sup>3</sup> og NO<sub>x</sub> var 94,8 mg/m<sup>3</sup> i gennemsnit i 2010 for blok 1, der var fyret med 58% træ- og 42% halmpiller. Det svarer til, at SO<sub>2</sub> emissionen reduceres til ca. 5% og NO<sub>x</sub> emissionen til ca. 35% af emissionen for samme brændsel på små anlæg. Det vil betyde en reduktion i den samlede skadesvirkning ved anvendelse af den samme brændselsblanding, hvis biomassen primært anvendes på store kedler med røggasrensning og naturgas anvendes på de mindre kedler i stedet for biomasse.

E-mail-adresse

Torben Kvist: tkv@dgc.dk

<sup>1)</sup> Morbiditet er forholdet mellem antallet af sygdomstilfælde og størrelsen af den befolkning, hvori de optræder

<sup>2)</sup> Mortalitet er dødsfrekvens i en befolkning

### Referencer

1. K. Karlsson et al., 2011: CEEH's beregning af sundhedsomkostninger fra luftforurening i Klimakommissionens fremtidsforløb, CEEH Scientific Report No 10, Centre for Energy, Environment and Health Report series, november 2011, pp. 24. [http://www.ceeh.dk/CEEH\\_Reports/Rapport\\_10/CEEH\\_Rapport\\_10.pdf](http://www.ceeh.dk/CEEH_Reports/Rapport_10/CEEH_Rapport_10.pdf)
2. [http://www.dmu.dk/fileadmin/Resources/DMU/Luft/emission/2010/Emf\\_internet\\_januar2011\\_GHG.htm](http://www.dmu.dk/fileadmin/Resources/DMU/Luft/emission/2010/Emf_internet_januar2011_GHG.htm)
3. J. Brandt et al., 2011: Assessment of Health-Cost Externalities of Air Pollution at the National Level using the EVA Model System, CEEH Scientific Report No 3, Centre for Energy, Environment and Health Report series, March 2011, pp. 98. [http://www.ceeh.dk/CEEH\\_Reports/Report\\_3/CEEH\\_Scientific\\_Report3.pdf](http://www.ceeh.dk/CEEH_Reports/Report_3/CEEH_Scientific_Report3.pdf)
4. Personlig kommunikation med Jørgen Brandt, DMU. 08.12.2011.
5. Forudsætninger for samfundsøkonomiske analyser på energiområdet. Energistyrelsen. April 2011.

**L'Oréal-UNESCO-priserne uddeles for 14. gang**

L'Oréal-UNESCO For Women in Science-priserne er blevet uddelt for 14. gang til fem kvindelige forskere fra hver sin verdensdel.

De fem pristagere 2012 er:

Professor Jill Farrant, University of Capetown, Sydafrika;

"For opdagelsen af hvordan planter overlever tørke".

Professor Ingrid Scheffer, University of Melbourne, Australia:

"For at definere gener forbundet til visse typer af epilepsi".

Professor Frances Ashcroft, Oxford University England: "For at udvide vores forståelse af insulindannelse og neonatal diabetes".

Professor Susana López, National University of Mexico,: "For fastslåelse af hvordan rotavira forårsager 600 000 børns død hvert år".

De fem priser er på hver 100.000 dollars. Siden 1998 har 72 kvinder modtaget L'Oréal-UNESCO-priserne. To af dem har efterfølgende modtaget Nobelprisen.

**European Solar Days afholdes den 10.-12. maj**

Solenergidagene fejres samtidigt 16 europæiske lande, og der er planlagt 7000 events, hvor der forventes mere end 500.000 deltagere. Lige som sidste år får danskerne mulighed for at være med i en stribe af events, hvor der er adgang til at se på solenergi rundt om i landet. Så hold udkig efter programmet (<http://solardays.dk/>), der bl.a. vil give mulighed for at besøge installerede solenergianlæg samt besøge solenergiproducenter.

**Nyt internationalt hårforskningscenter**

L'Oréal har netop åbnet et nyt, globalt hårforskningscenter.

Centret beskæftiger 500 medarbejdere. Deriblandt kemikere, fysikere, optikere, metrologer, specialister i flydende og halvfaste væsker samt eksperter i computer science og statistikere. Centrets arkitektur er designet til at fremme samarbejde og tværfaglig videndeling, samtidig med at det tilbyder specialisterne fremtidssikrede metoder og værktøjer i et behageligt arbejdsmiljø.

**Ph.d.-forsvar**

Den 11. april forsvarede Anna Basnet sit ph.d.-projekt "Translational Studies and Population Based Pharmacodynamic Analyses of Combination Pharmacotherapy for Traumatic Nerve Injury Pain".

Den 3. maj forsvarede Arafat Nasser sit ph.d.-projekt "Involvement of the GCH1 gene and the cofactor tetrahydrobiopterin in pain - a comparative study in mice and man".

Den 7. maj forsvarede Ali Yilmaz sit ph.d.-projekt "NMR Spectroscopy for Metabolic Profiling of Plant Extracts".

Den 14. maj forsvarede Yanhong Wen sit ph.d.-projekt "Development of Particulate Drug Delivery Systems as Injectable Scaffolds for Tissue Regeneration".

Afhandlingerne kan ses på Fakultetets bibliotek og på [www.farma.ku.dk/phd/defences](http://www.farma.ku.dk/phd/defences).

**Ny leder af katalyse-forskningsinitiativet**

Lederskabet af CASE (Catalysis for Sustainable Energy) på DTU er pr. 1. april overtaget af professor Ib Chorkendorff. Den hidtidige leder, Søren Dahl, har besluttet sig for at forfølge en mulighed i Tyskland i samarbejde med katalysatorvirksomheden Haldor Topsøe A/S.

## The Danish Chemical Society Annual Meeting 2012



**Thursday, 7th of June 2012, Odense, University of Southern Denmark**

Plenary speaker

Prof. Takuzo Aida, University of Tokyo

**"Bridges between Molecular and Macroscopic Regimes for Advanced Functional Materials"**

**Division of Organic Chemistry**

**Christian A. Olsen** *Substrates and Inhibitors for the Human Deacetylase Enzymes.*

**Michael Pittelkow** *Heterocyclic [8] circulenes.*

**PhD-award Organic Chemistry - award lecture.**

**Danish Society for Environmental Chemistry and Division of Analytical Chemistry**

**Jens Glastrup** *Kunne man lime potteskår i jernalderen? Ja, det kunne man." Diazomethan derivatisering og GC/MS af gamle lime, fedtsyrer & triterpener.*

**Søren Furbo** *Analyse af petrokemikalier med to-dimensionel gaschromatografi (GC×GC).*

**Kenneth Due Nielsen** *Anvendt analysekemi - Tre tilfælde i tyggegummi.*

**Division of Inorganic Chemistry**

**Pablo Beato** *Shape sensation - on the shape selectivity of zeolites in the conversion of methanol to hydro-carbons.*

**Prof. Koen Binnemans** *Rare earths in ionic liquids.*

**Palle Skovhus Jensen** *Molecular scale electro-catalysis of interfacial bioelectrochemical electron transfer processes.*

**Division of Theoretical Chemistry**

**Dr. Hans Martin Senn** *Insights into enzymatic catalysis using computational chemistry: From docking to coupled-cluster methods.*

**Dr. Mårten Ahlquist** *Artificial Photosynthesis from a Theoretical Perspective.*

**"Best Bachelor Report 2011" Award lecture.**

**The Danish Society of the History of Chemistry - Great minds in Danish chemistry of the 20th century.**

**Ragnar Bye** *K.U.Linderstrøm-Lang (1896 - 1959)*

**Sine Larsen** *C.J. Ballhausen (1926 - 2010)*

**Carl Th. Pedersen** *K.A. Jensen (1908 - 1992)*

To see the full program and to sign up, go to: [www.chemsoc.dk](http://www.chemsoc.dk)  
- Free transport is organised from Copenhagen and Århus for members of the Danish Chemical Society.

KEMISK FORENING - THE DANISH CHEMICAL SOCIETY,  
[www.chemsoc.dk](http://www.chemsoc.dk)

Dette er den tredje artikel i en serie om DDT

# Hvis ikke DDT, hvad så?

DDT har stor betydning for bl.a. bekæmpelse af malaria, men har også mange negative følgevirkninger, derfor leder man nu efter alternativer.

Foto: Anne-Mette Vire.

Af Julie Dam Larsen<sup>1</sup>, Maria Kjeldstrup Christensen<sup>2</sup>, Tina Mønster<sup>1</sup> Anne-Mette Vire<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Institut for Bioscience, Aarhus Universitet, <sup>2</sup>Institut for Kemi, Aarhus Universitet, <sup>3</sup>Lektor, Risskov Gymnasium

DDT er et effektivt insekticid, men har mange negative følgevirkninger. Det mistænkes for at forårsage brystkræft og andre alvorlige sundhedsproblemer hos mennesker [1,2]. Der er observeret negative effekter på vilde dyr, såsom æggeskalfortynding hos rovfugle [3]. Man kender i dag mange insekticider og har således principielt alternativer til DDT. Udfordringen ligger i at finde gode alternativer, dvs. insekticider, der har DDT's positive egenskaber, men ikke de negative.

## Alternative insekticider

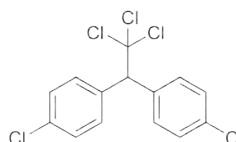
Særligt tre grupper af kemiske stoffer har gjort sig gældende som mulige alternativer til DDT:

**Organofosfater** blev introduceret i 1930'erne [4]. Disse har tendens til at koncentreres i akvatiske miljøer, da de er vandopløselige. De har ringe tendens til at fordampe fra våde overflader og deres halveringstid i vand er relativt kort [5]. At organofosfater findes i vand, hvor de hurtigt nedbrydes, er en klar fordel. Organofosfater har ikke tilbøjelighed til at bioakkumulere og -magnificere. Men organofosfater har en anden toksisk virkemekanisme end DDT [6]. F.eks. har Fenitrothion en meget kraftig akut toksisk effekt på vandlevende insekter

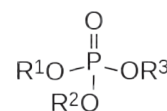
samt moderat akut toksisk effekt på padder og fisk [7]. Man er ikke helt klar over, hvordan organofosfater kan påvirke menne-

## Hvad er et godt alternativ til DDT?

DDT's skadevirkninger forstærkes af, at det spredes over store afstande pga. den såkaldte "jump-effekt" (*Dansk Kemi* nr. 4, 2012). DDT har desuden tendens til at bioakkumulere og -magnificere, hvilket betyder at levende organismer optager DDT fra omgivelserne og at det opkoncentreres i fødekæder. DDT er svært biologisk nedbrydeligt og opholder sig derfor lang tid i miljøet [1]. Det gode alternativ har ikke blot færre/mindre potente følgevirkninger, det må heller ikke have tendens til at spredes og bioakkumulere/biomagnificere og ikke være svært biologisk nedbrydeligt.



DDT, DDT, 4,4'-(2,2,2-trichlor-ethan-1,1-diyl)bis(chlorbenzen).



En skematisk organofosfat.

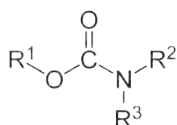


Foto: Karin Frykman.

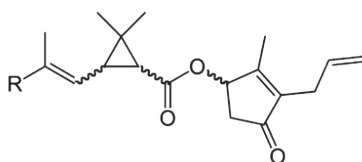
sker. F.eks. ved man ikke om en af de mest brugte, Malathion, er kræftfremkaldende [8].

**Carbamater** blev introduceret i 1950'erne [4]. Med hensyn til opførsel, nedbrydning i miljøet og virkemekanisme minder carbamater meget om organofosfater [5]. Carbamater menes at være akut toksiske mod akvatiske insekter, fisk og nogle havpattedyr. Generelt er viden om hvordan de påvirker miljøet dog sparsom. Propoxur, et af de mest brugte carbamater, menes at have høj akut toksicitet mod mennesker og at være kræftfremkaldende [9].

**Pyrethroider** blev introduceret i 1940'erne [4]. Pyrethroider binder stærkt til jord og spredes derfor kun i ringe omfang. De har principielt tendens til at fordampe fra våde overflader og biokoncentrere/biomagnificere, men de binder så kraftigt til jord, at dette negligeres [10]. De har lav akut toksisk effekt på



En skematisk carbamat.



En skematisk pyrethroid.

pattedyr (inkl. mennesker) og fugle og har generelt en lavere akut toksisk effekt end organofosfater og carbamater. Der er dog usikkerhed omkring kroniske effekter. F.eks. er det uklart om Lambda-Cyhalothrin, en af de mest brugte pyrethroider, er kræftfremkaldende og/eller hormonforstyrrende [7].

### Ingen gode alternativer

Fælles for de tre stofgrupper er, at de spredes mindre i miljøet og er mindre persistente end DDT. Men mht. følgevirkninger kan ingen af dem anses som gode alternativer. Desuden er alle tre grupper både dyrere at producere og bruge end DDT [11]. Det er et væsentligt forhold, da DDT primært bruges i fattige lande.

Ud over skadevirkningerne er der opstået et andet problem omkring DDT, nemlig udvikling af resistens hos insekterne [12]. Resistensudvikling mod insekticiders toksiske virkemekanismer er et uundgåeligt problem, uanset hvilke man bruger. DDT har imidlertid den fordel, at det ikke kun er toksisk, men også afskrækkende over for insekter, og afskrækkelseffekten udvikles der ikke resistens imod [11]. Denne egenskab har ingen af de brugte insecticider inden for de andre grupper.

At finde et fornuftigt alternativ er altså ikke en nem opgave og derfor bruges DDT stadig. Insekticider fra de andre grupper benyttes til mange formål, bl.a. ved malariabekæmpelse som supplement til DDT. De fire nævnte eksempler på stoffer fra hver gruppe, malthion, fenitrothion, propoxur og lambda-cyhalothrin bruges alle til bekæmpelse af malariamyggen [6].

*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.*

E-mail-adresse:

Julie Dam Larsen: juliedamlarsen@hotmail.com

### Referencer

- Eskenazi B, Chevrier J, Rosas LG, Anderson HA, Bormann MS, Bouwman H, Chen A, Cohn BA, de Jager C, Henshel DS, Leipzig F, Leipzig JS, Lorenz EC, Snedeker SM, Stapleton D. The Pine River Statement: Human Health Consequences of DDT Use. *Environ Health Perspect* 2009;117:1359-1367.
- IARC. <http://monographs.iarc.fr/ENG/Classification/ClassificationsGroupOrder.pdf>. International Agency for Research on Cancer 2011.
- Lincer J. DDE-Induced Eggshell-Thinning in American Kestrel - Comparison of Field Situation and Laboratory Results. *J Appl Ecol* 1975;12:781-793.
- Casida K P, Quistad G B. Golden age of insecticide research. Past, present, or future? *Annual Review of Entomology*; 43.
- Baird C, Cann M. *Environmental Chemistry* (4th edition ed.), New York, W H Freeman and Company
- WHO WHO recommended insecticides for indoor residual spraying against malaria vectors 2009 [[http://www.who.int/whopes/Insecticides\\_IRS\\_Malaria\\_09.pdf](http://www.who.int/whopes/Insecticides_IRS_Malaria_09.pdf)]. Accessed 08.05.2011]
- PAN The Pesticide Action Network [Online] [Citeret: 12. Februar 2012.] <http://www.pesticideinfo.org/>
- Toxipedia [Online] [Citeret: 15 Februar 2012] <http://toxipedia.org/display/toxipedia/Organophosphates>
- ATSDRb. Toxicological Profile for Pyrethrins and Pyrethroids. Atlanta: Agency for Toxic Substances and Disease Registry, 2003. s. 1-328.
- Walker K. Cost comparison of DDT and alternative insecticides for malaria control. *Medical and Veterinary Entomology* 2000;14:345-354
- Grieco J. P. et al. A comparison study of 25 house entering behavior of *Anopheles vestitipennis* (Diptera: Culicida) using experimental huts sprayed with DDT or Deltamethrin in the Southern District of Toledo, Belize, C.A. *Journal of Vector Ecology* 2000;25:62-73
- ATSDRa. Toxicological Profile For DDT, DDE and DDD. Atlanta : Agency for Toxic Substances and Disease Registry, 2002. s. 1-497.

# 100 år med røntgendiffraktion

Røntgendiffraktion er en disciplin, der har stor betydning for kemien. Disciplinen blev etableret for 100 år siden.

Svend Erik Rasmussen,  
Geologisk Institut, Aarhus Universitet

Universitetet i München var i året 1912 kendt for at have en usædvanlig høj standard. Den første nobelpristager i fysik, W. C. Röntgen var professor i eksperimentel fysik, A. Sommerfeld underviste i teoretisk fysik og havde som assistenter P. Debye og Max von Laue, begge senere nobelpristagere. P. Groth, som var professor i krystallografi og mineralogi, var kendt for en banebrydende indsats for at systematisere mineralogien.

En af Sommerfelds studenter, P. P. Ewald, arbejdede på den tid med at beregne lysbrydningen i et system af resonatorer anbragt i et tredimensionalt gittersystem, som man antog kunne være en model for en krystal. Han konsulterede Laue om et matematisk problem, men fik kun et modspørgsmål om, hvad der ville ske, hvis lysets bølgelængde var af samme størrelsesorden som afstanden mellem resonatorerne. Ewald var ikke interesseret i spørgsmålet, men Laue grublede videre over det. Han fik den tanke, at hvis røntgenstråling var en bølgebevægelse, kunne den være af en bølgelængde, der svarede til atomafstande i krystaller. Hvis atomerne var arrangeret systematisk i et tredimensionalt gitter, ville strålingen spredes efter et interferensprincip, så spredningen var begrænset til bestemte vinkler. Han fik to eksperimentalfysikere, P. Knipping og W. L. Friedrich til at foretage et eksperiment, hvor røntgenstrålen passerer gennem krystallen (figur 1).

Eksperimentet var en succes, og man kunne heraf drage to konklusioner:

- 1: Røntgenstråling måtte opfattes som en bølgebevægelse.
- 2: Krystallers atomer er arrangeret systematisk, som i et gitter. Laue gav en detaljeret teori for eksperimentet og fik i 1914 nobelprisen i fysik.

W. L. Bragg, der var student i Cambridge, viste i 1913, at spredning af røntgenstråling kan opfattes som en refleksion af strålingen fra planer gennem krystallen, og at betingelsen for refleksion kan udtrykkes vha. strålingens bølgelængde  $\lambda$ , refleksionsvinklen  $\theta$ , og afstanden,  $d$ , mellem de reflekterende planer (figur 2).

Ligningen indeholder kun en direkte observerbar størrelse  $\theta$ . Ud fra en bestemmelse af de relative atompositioner i udvalgte krystaller af simpel struktur, kunne han vha. Avogadros tal beregne absolutte værdier for  $d$  og dermed absolutbestemmelser for bølgelængden  $\lambda$ . Hermed var to nye grene af videnskaben etableret:

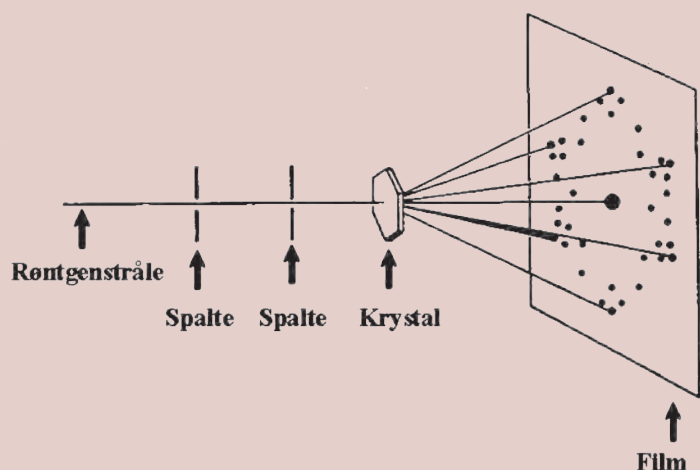
1. Krystalstrukturanalyse
2. Røntgenspektroskopi

## Røntgenspektroskopi

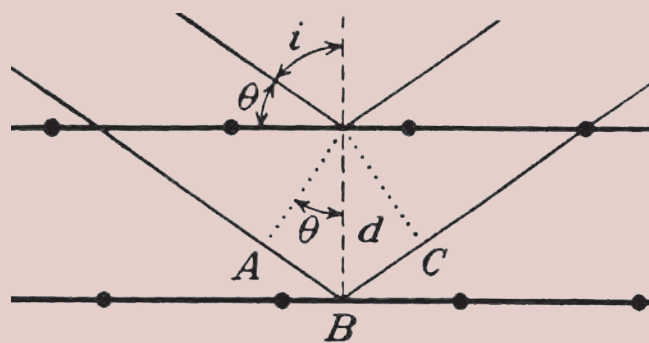
W. L. Braggs fader, W. H. Bragg, der også var fysiker, konstruerede et spektrometer bygget på princippet, som sønnen havde fundet. Det målte både refleksionsvinklen  $\theta$  og intensiteten af den spredte stråling (figur 3).

W. H. og W. L. Bragg delte i 1915 nobelprisen i fysik.

Røntgenstråling genereres ved, at elektrisk ladede partikler, ioner eller elektroner ved høj spænding rettes mod en metalplade. De skarpe linjer fremkommer ved de ladede partiklers



Figur 1. Fra Bijvoet, J.M., Kolkmeier, N.H. & MacGillavry, C. H. (1951) X-Ray Analysis of Crystals.



Figur 2. Vinklen,  $\theta$ , for den indfaldende stråling med bølgelængde  $\lambda$  er lig refleksionsvinklen. Afstanden mellem de reflekterende planer er  $d$ . Hvis to successive bølgetog skal forstærke hinanden, skal vejforskellen være et helt antal bølgelængder, hvilket udtrykkes ved ligningen:  $\lambda = 2d \sin \theta$ , kaldet Braggs lov.

bombardement af metalpladen, og den kontinuerte stråling ved bremsningen af f.eks. elektronerne. De skarpe linjers bølgelængder afhænger af, hvilket grundstof metalpladen består af. En ung engelsk fysiker, H. G. J. Moseley, viste i 1913, at en række grundstoffers røntgenbølgelængder afhænger af atomnummeret efter følgende formel:

$$\frac{1}{\sqrt{\lambda}} = k(Z - \sigma)$$

Hvor  $Z$  er atomnummeret ifølge det periodiske system. Det gav et enestående ekstra hjælpemiddel til at fastlægge grundstoffernes atomnumre og til at finde de grundstoffer, der endnu ikke var fundet. Det blev snart klart, at røntgenspektrene kunne forklares ud fra Bohrs teori om elektronovergange inden for de inderste elektronskaller.

### Grundstof nr. 72

Røntgenspektre spillede en afgørende rolle for opdagelsen af grundstof nr. 72. Mange havde forgæves ledt efter det blandt de sjældne jordarter, men Bohrs teori om elektronkonfigurationer viste, at nr. 72 måtte være kemisk beslægtet med grundstof nr. 40, zirkonium.

Coster og Hevesy, der arbejdede på Bohrs institut, fandt i 1922, at røntgenspektre fra zirkoniumminerale viste linjer, der kun kunne stamme fra grundstof nr. 72. Det fik navnet hafnium, efter den by hvor det blev påvist. Også nr. 75, rhenium, blev

fundet vha. røntgenspektret. Derimod ledte man forgæves efter nr. 43. Det er senere fundet blandt fissionsprodukter og alt tyder på, at der ikke findes isotoper med så lang halveringstid, at det kan forekomme i naturen. Det fik derfor navnet technetium.

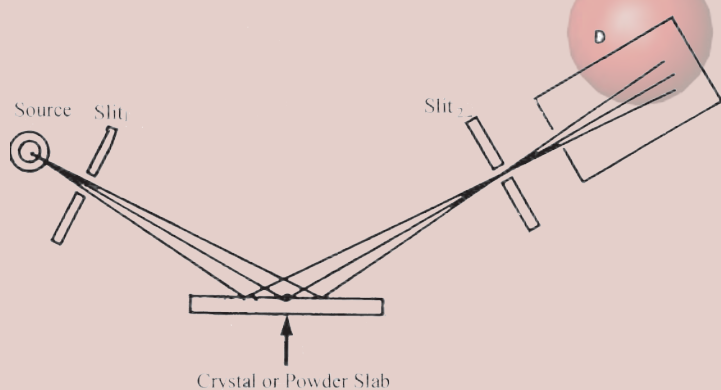
### Strukturanalyse

Den anden anvendelse af Braggs lov bygger på brugen af en ren spektrallinje. For simple krystaller med høj symmetri såsom grundstoffer og binære forbindelser er atomernes placering fuldstændigt fastlagt ud fra symmetrimønstret, men for lidt mere komplicerede forbindelser må man, for at kunne bestemme atomernes placering i krystallen, måle sammenhørende værdier for  $d$  og intensiteten af den stråling, der er knyttet til  $d$ .

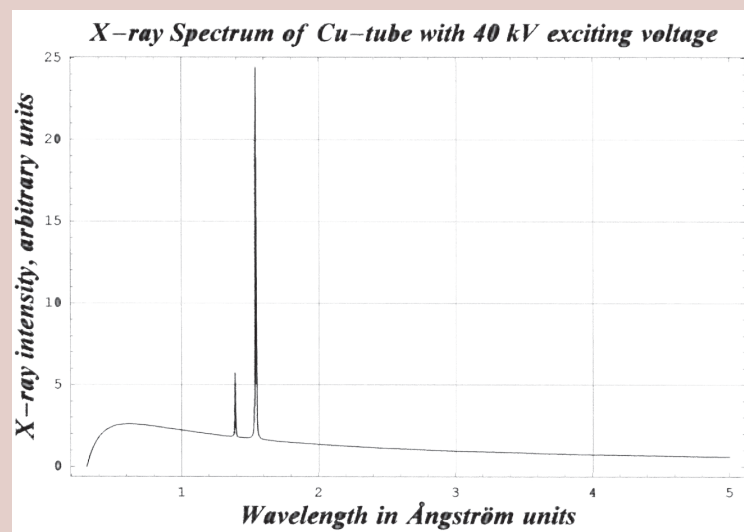
Den detaljerede teori for røntgendiffraktion fører til veldefinerede ligninger, der gør det muligt ud fra krystalstrukturen at beregne den spredte strålingsintensitet. Beregningen den modsatte vej er ikke simpel, da man mister information ved selve måleprocessen.

I begyndelsen analyserede man simple strukturer, hvor atomernes placering var bestemt af symmetriforholdene, så beregningsarbejdet var minimalt. Da de tidlige røntgenrør gav ret svage intensiteter, måtte man have ret store krystaller til røntgenundersøgelse for at få målelige reflekser. Store krystaller fandt man som regel i mineralsamlinger, og mange mineraler blev derfor tidligt underkastet strukturanalyse. Det blev hurtigt klart, at mange uorganiske forbindelser ikke var opbygget af enkelte molekyler.

Analyse af silikater viste, at i de fleste var siliciumato-



Figur 3. Vha. en spalte udvælges et snævert bundt af den indfaldende stråling, og en anden spalte afgrænser et tilsvarende snævert bundt af den reflekterede stråling. Krystallen roteres om en akse parallel med krystalplanen, og detektoren roteres ligeledes, således at indfaldsvinkel og reflektionsvinkel er lige store. På den måde fandt man frem til, at røntgenstråling indeholdt både skarpe linjer og et kontinuert spektrum som skitseret i figur 4.



Figur 4. Beregnet røntgenspektrum med Cu som grundstof.

merne omgivet af fire oxygenatomer, der dannede et tetraeder med siliciumatomet i midten. I nogle mineraler, f.eks. olivin,  $(\text{Mg,Fe})_2\text{SiO}_4$ , er der isolerede  $\text{SiO}_4^{4-}$ -ioner. I pyroxener, f.eks.  $\text{MgSiO}_3$ , er  $\text{SiO}_4$ -tetraedrene forbundet i kæder, i andre igen i plane netværk. Kvarts og feldspat er opbyggede som tredimensionale netværk.

Når man arbejdede med røntgenkrystallografisk strukturanalyse i 1930'erne og op til 1950'erne, måtte man finde en passende énkrystal. Derefter skulle man optage et antal røntgendigrammer ved at registrere røntgenreflekserne på film. Så fulgte et tidskrævende arbejde med at måle et stort antal intensiteter af de registrerede reflekser. Det blev gjort ved visuel sammenligning med en kalibreret skala.

Dernæst begyndte det egentlige arbejde: Beregningerne! På den tid bestod hjemmecomputeren af en regnestok - selv elektromekaniske regnemaskiner var sjældenheder på kemiske laboratorier. Der blev derfor udvist stor opfindsomhed i at lette beregningsarbejdet, f.eks. ved konstruktion af mekaniske hjælpemidler og ved tabellering af hyppigt tilbagevendende beregninger.

Konstitutionen af tusinder af organiske forbindelser var kendt, fra kemiske og fysisk-kemiske data, så et mere kvantitativt kendskab til bindingslængder var ikke i første omgang påtrængende. Endvidere var store krystaller af organiske forbindelser ikke nemme at finde, og høje symmetrier, der kunne lette strukturbestemmelser, forekommer sjældent i organiske stoffer.

## Dorothy Hodgkin

I 1933 begyndte Dorothy Hodgkin, født Crowfoot, at anvende røntgenkrystallografiske metoder på organiske forbindelser. Hun veg ikke tilbage for at undersøge komplicerede forbindelser som proteiner, hun havde dog ikke mulighed for at foretage dybtgående strukturanalyser. Derimod havde hun succes med undersøgelser af steroider, f.eks. kolesterol.

I 1942 begyndte hun med en gruppe af medarbejdere på strukturanalysen af penicillin. Mange fremragende kemikere havde forsøgt at bestemme konstitutionen uden at nå til et afgørende resultat, men Dorothy Hodgkin viste i 1945, hvordan

molekylet var sammensat, hvilket åbnede muligheder for syntetiske ændringer af penicillin. Blandt hendes senere arbejder skal fremhæves strukturanalyserne af vitamin B12 og af insulin. Hun fik i 1964 som den tredje kvinde nobelprisen i kemi. De to foregående var Marie Curie (1911) og Irene Joliot-Curie (1935).

Dorothy Hodgkins indsats ansporede mange, især kvinder, til at arbejde med strukturanalyse af organiske og biokemiske forbindelser.

## Andre kilder til diffraktion

I 1927 viste Davisson og Germer, at elektronstråler i overensstemmelse med kvantemekanisk teori har bølgenatur, idet de gav diffraktionseffekter ved passage gennem metalfolier. Det førte til udvikling af apparatur til elektronkrystallografi. Efter 1945 begyndte man at specialbygge kernereaktorer som neutronkilder til neutronfysik og til neutronkrystallografi. En særlig kraftig kilde til røntgenstråling blev synkrotronerne. Der findes nu adskillige specialbyggede synkrotroner til røntgenstråling.

## Computeralderen

Da computeren blev almindeligt tilgængelig for forskere i 1950'erne og 1960'erne, blev regnearbejdet ved krystallografiske strukturanalyser stærkt fremmet. Samtidig skete der store teoretiske fremskridt, der lettede selve strukturanalysen, ja i de fleste tilfælde automatiserede den. Også dataindsamlingen blev automatiseret og kom under computerkontrol. Målearbejde, der før i tiden tog uger eller måneder, kan nu gøres på timer, og med synkrotronstråling på minutter. Regnearbejde, der før tog uger og måneder, kan nu gøres på sekunder og minutter. Den enorme stigning i computerkapacitet har betydet, at man kan løse krystalstrukturer for større og større molekyler. Strukturanalyser af proteiner anses i dag for rutinearbejde.

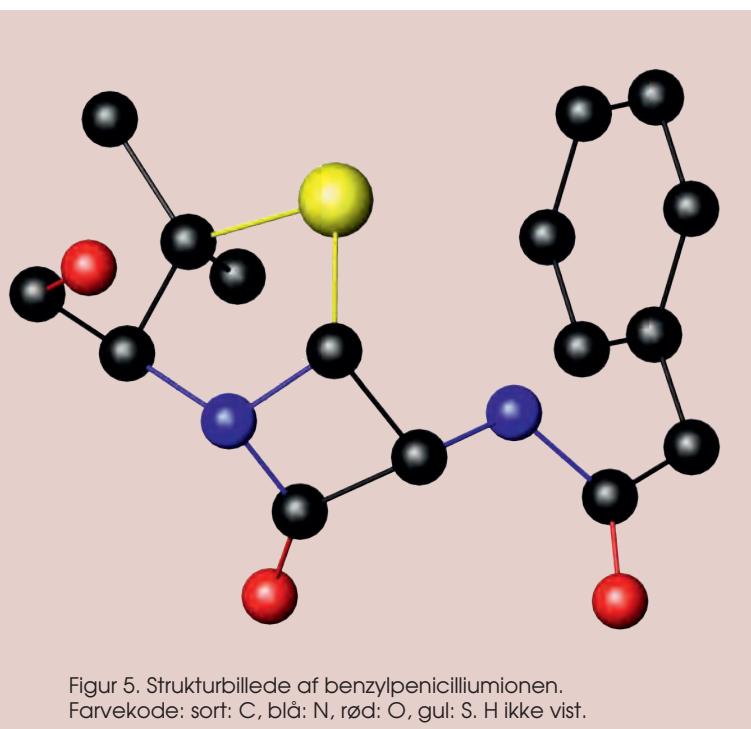
## Har krystallografien sejret sig til døde?

Krystallografi var tidligere et selvstændigt fag på mange universiteter rundt om i verden. I dag er der kun få lærestole tilbage i faget, og selv mineralogien er i dag kun en mindre del af geologistudiet. Der er relativt få steder, hvor der gives en dybtgående uddannelse i krystalstrukturanalysens teori og metodik. Computerteknologiens udvikling medførte, at det blev muligt at lade instrumenterne til dataindsamling gøre det arbejde, som veluddannede krystallografer tidligere udførte. Elektronik, der fremkom samtidig med computerteknologien, gjorde det muligt at indsamle store datamængder på kort tid. Fremskridtene i teorien for strukturanalyse gjorde det sammen med udviklingen af computerkapaciteten muligt at løse strukturer af selv store molekyler med en relativ beskeden indsigt i krystallografiens grundlag.

Det er derfor en glæde for dedikerede krystallografer, at årets nobelpris i kemi blev givet for et fundamentalt arbejde med diffraktion. Daniel Schechtman fik prisen for sit arbejde om kvasikrystaller, hvor han med elektronstråling påviste diffraktionseffekter fra metalfaser, der ikke havde perfekt krystallinsk periodicitet, men blot en vis regelmæssighed i deres opbygning. Det åbner nye muligheder for strukturanalyser ved diffraktionsmetoder også på faste stoffer, der ikke opfylder strenge krav på perfekt periodicitet.

E-mail-adresse:

Svend Erik Rasmussen: [ser@geo.au.dk](mailto:ser@geo.au.dk)



Figur 5. Strukturbillede af benzylpenicilliumionen.  
Farvekode: sort: C, blå: N, rød: O, gul: S. H ikke vist.

# Når PARAFAC ikke virker

PARAFAC-modellen kan give unik indsigt i data, når den virker. Desværre har PARAFAC også nogle helt specielle matematiske egenskaber, som gør, at den ikke altid giver brugbare resultater.

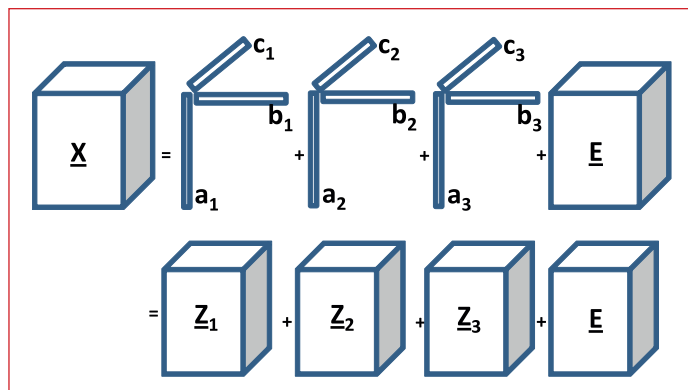
Af Rasmus Bro, Søren Balling Engelsen,  
Institut for Fødevarevidenskab,  
Københavns Universitet og Lars Nørgaard, FOSS

Når PARAFAC virker, så kan den give næsten magiske resultater. PARAFAC kan "afkode" komplekse data og finde de rene underliggende komponenter, hvilket giver utallige nye muligheder. PARAFAC-modellen virker aldeles glimrende på data, som følger modellen. Det har vi bl.a. set med fluorescens- og NMR-data i tidligere klummer.

Det er desværre sådan, at PARAFAC ikke altid virker. Faktisk er matematikere en smule "skræmt" over PARAFAC-modellen, da det viser sig, at generelle løsninger på PARAFAC-problemer er meget vanskelige at garantere. Man siger, at PARAFAC-problemet er NP-hårdt [1], og det har praktisk betydning. Der er situationer, hvor ingen PARAFAC-algoritme kan beregne en model, der giver den bedste løsning. Og den "ikke-løsning", man i stedet får, vil i praksis være matematisk og kemisk nonsens. Det er således vigtigt, at kende til de praktiske implikationer af dette problem, når man vil anvende PARAFAC. Prisen for de fantastiske muligheder med PARAFAC er, at den er numerisk spidsfindig.

## Hvordan ser en ikke-løsning ud?

Når PARAFAC-problemet ikke lader sig løse opstår der, hvad der kaldes en tofaktor-degenerering [2]. Det er en situation, hvor to PARAFAC-komponenter bliver næsten helt identiske, men med omvendt fortegn. Lad os sige, at vores data ligger i en trevejs kasse  $\underline{X}$ , og at vi har beregnet en trekomponent PARAFAC-model. Hver komponent består af en scorevektor for



Figur 1. Illustration af trekomponent PARAFAC-model. Hver komponent består af en score og to loading-vektorer. Ganger man disse sammen, får man den aktuelle énkomponent model/ap-proksimation, som er vist nederst i figuren for hver komponent. De to repræsentationer er således identiske.

prøveretningen og en loading-vektor for hver variabelretning (figur 1).

Når man har tofaktor-degenerering, så vil to af komponenterne; eksempelvis  $\underline{Z}_1$  og  $\underline{Z}_2$  være næsten identiske, men med omvendt fortegn. Der gælder således, at

$$\underline{Z}_1 = -\underline{Z}_2 + \underline{\epsilon},$$

hvor  $\underline{\epsilon}$  er en trevejskasse med små tal. Derfor vil summen

$$\underline{Z}_1 + \underline{Z}_2,$$

blive cirka nul og trekomponent-modellen bliver i praksis til en énkomponent-model, fordi

$$\underline{Z}_1 + \underline{Z}_2 + \underline{Z}_3 \sim \underline{Z}_3.$$

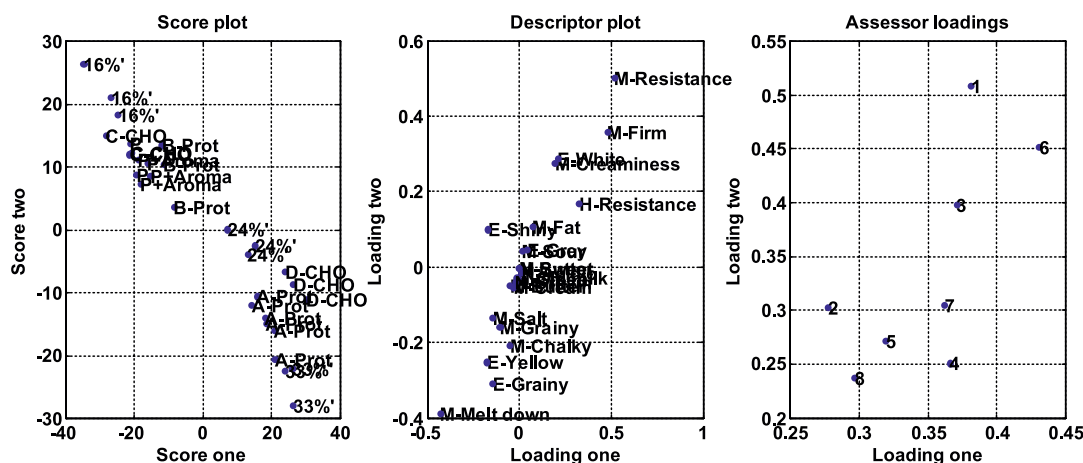
Det kan vises, at jo længere man beregner (itererer), jo mere lig bliver de to faktorer, og efter uendelig mange iterationer vil deres samlede bidrag blive eksakt nul. Samtidig vokser variansen i de to faktorer mod uendelig. Faktorerne vokser altså mod uendelig store tal, imens deres sum går mod nul.

Det skal understreges, at denne opførsel er et matematisk artefakt, som ikke afspejler nogen reel kemisk information i data. Desværre gør sådan et artefakt det umuligt at bruge den pågældende model til noget fornuftigt. Et eksempel er vist i figur 2, hvor en trekomponent-model er beregnet på sensoriske data. I dette tilfælde er 30 forskellige oste blevet bedømt af otte dommere mht. 23 forskellige deskriptorer, som afspejler smag, aroma, mundfylde, udseende m.m. [3]. Sensorisk analyse er en kvantitativ og objektiv målemetode, som anvendes i stor stil i bl.a. fødevarerindustrien [4]. I dette tilfælde har vi en  $30 \times 8 \times 23$  trevejs kasse. PARAFAC vil under normale omstændigheder være en ideel model for sådan et datasæt, for det giver mening at antage, at sensorikken afspejler latente, underliggende variable af mere fundamental karakter.

Desværre ser komponent et og to fra en trekomponent-model ud som vist i figur 2. Komponent et er korreleret med komponent to i alle tre retninger. For scores er korrelationen negativ, mens den er positiv for de to andre. Dette betyder eksplicit, at de to komponenter cirka udslukker hinanden.

## Kongruens kan måle det

For at kunne måle i hvor høj grad man har problemer med degenerering, kan man måle, hvor ens de forskellige komponenter er. Dette kan gøres ved at beregne korrelationen mellem komponenter for de forskellige  $\underline{Z}$  trevejsstrukturer, efter man har foldet dem ud til en lang vektor. Korrelationer kan dog snyde lidt, for de kan blive perfekt én, selv når vektorerne er forskudt. Hvis eksempelvis vektorerne  $\underline{a}$  og  $\underline{b}$  har en korrelation på én, så vil  $\underline{a}$  og  $(\underline{b} + 10)$  også have en korrelation på én. I stedet for ►



Figur 2. Score og loading plots af trekomponent PARAFAC-model for sensoriske data. I dette tilfælde er 30 forskellige oste blevet bedømt af otte dommere mht. til 23 forskellige deskriptorer. Komponent et er plottet mod komponent to.

korrelation anvendes derfor en såkaldt Tucker Kongruens [5], som er identisk med korrelation, dog uden at korrigere for en konstant.

I praksis følger man kongruensen mellem alle komponenter og hvis en af disse bevæger sig mod -1, så skal man tage sine forholdsregler. Ofte vil man ikke reagere, før kongruensen er omkring -0.85 og kun hvis den vedvarende falder undervejs i iterationerne.

## Hvad kan man gøre?

Som nævnt, så er en model med tofaktor-degenerering ikke valid. Og det er af matematiske årsager, så det har ingen konsekvenser for kvaliteten af ens data. Det er ikke data, der skal "bebrejdes". I praksis oplever man aldrig problemet for data, der følger PARAFAC-modellen fint, mens det eksempelvis i sensorik forekommer oftere.

Der er adskillige måder man kan prøve at håndtere problemet på. Man kan ændre antallet af komponenter op eller ned, og se om det fjerner problemet (og stadig giver en brugbar model). Man kan også ændre lidt på data. F.eks. kan man fjerne variable, der alligevel antages at være mindre væsentlige, eller man kan ændre på forbehandlingen af data ved f.eks. at skalere på anden vis. Endelig kan man også overveje at anvende andre modeller, som ikke har det samme problem.

## Outro

I næste klumme vil vi se på en anden multivejs-model, kaldet Tucker, som ikke har samme problem med tofaktor-degenerering. Til gengæld er disse modeller ikke helt så lette at anvende og fortolke som PARAFAC-modeller.

E-mail-adresser

Rasmus Bro: rb@life.ku.dk

Søren Balling Engelsen: se@life.ku.dk

Lars Nørgaard: LNO@foss.dk

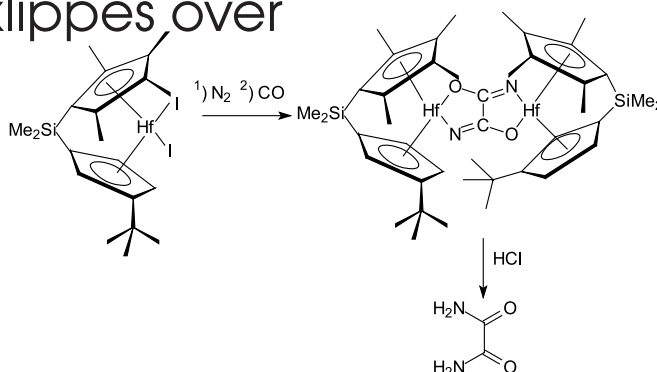
## Referencer

1. V. de Silva, L. H. Lim. Tensor Rank and the Ill-Posedness of the Best Low-Rank Approximation Problem. *Siam Journal on Matrix Analysis and Applications* 30 (3):1084-1127, 2008.
2. J. B. Kruskal, R. A. Harshman, M. E. Lundy. How 3-MFA data can cause degenerate PARAFAC solutions, among other relationships. In: *Multiway Data Analysis*, edited by R. Coppi and S. Bolasco, Amsterdam:Elsevier, 1989, p. 115-122.
3. R. Bro, E. M. Qannari, H. A. L. Kiers, Tormod Næs, M. B. Frøst. Multiway models for sensory profiling data. *J.Chemom.* 22:36-45, 2008.
4. H. Martens, M. Martens. *Multivariate Analysis of Quality: An Introduction*, Chichester:Wiley & Sons, 2001.
5. G. Lorho, F. Westad, R. Bro. Generalized correlation loadings - Extending correlation loadings to congruence and to multi-way models. *Chemom.Intell.Lab.Syst.* 84 (1-2):119-125, 2006.

## ■ Nyt om...

### Bindingen i elementært $N_2$ klippes over

Luftens nitrogen udnyttes ikke i ret mange industrielle processer pga. vanskeligheden med at bryde den stærke nitrogen-nitrogen-binding. En undtagelse er Haber-Bosch-processen til fremstilling af  $NH_3$  ud fra  $N_2$ ; men den kræver også højt tryk og temperatur. Forskere ved Cornell University i USA har nu brudt N-N-bindingen, samtidig med brydningen af bindingen i et andet meget stabilt molekyle CO under dannelse af oxamid, som vist til højre. Hafniumsandwichforbindelsen til venstre reageres successivt med  $N_2$  og CO ved stuetemperatur og et tryk på 1 atm. Den nye sandwichforbindelse spaltes af HCl til bl.a. oxamid.



Dinitrogen cleavage and functionalization by carbon monoxide promoted by a hafnium complex, *Nature Chemistry* 2, January 2010, side 30.

Carl Th.

# 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



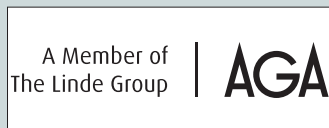
**Dräger Safety Danmark A/S**  
Generatorvej 6 B  
2730 Herlev  
Tlf. 44 50 00 00 - Fax 44 50 00 01  
draeger-safety.dk@draeger.com  
www.draeger.dk

## 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

## 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

# Leverandørregister

## 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**

## Smagsgivende elementer i øl

**Fredag den 25. maj 2012 kl. 19.00**  
**Valby Kulturhus, Valgårdsvej 4-8, Valby**

Hvorfor smager en øl som den gør? De er jo i bund og grund alle lavet af: vand, malt, gær, humle og eventuelt andre krydderier og gær (og nogle gange bakterier). Men hvad giver ingredienserne af smagsnuancer og under hvilke forhold?

Med en akademisk håndværkers tilgang kikkles der på brygtraditioner og proces. Der vil være røverhistorier og en spændvidde fra traditionel brygkunst til moderne mikrobryg. En tour-de-force i smagsfulde og vidunderlige øl, med detaljeret neddykning i nogle af deres detaljer.

Men nu skal man jo ikke kun snakke om øl. Derfor vil der tages udgangspunkt i nogle smagsprøver på typiske, outrerede og ekstreme øl, så medbring eventyrlyst og et åbent sind. Da de fleste af øllene er ret stærke, frarådes det at planlægge at køre hjem bagefter.

Foredragsholderen Martin Pedersen er datateknologiingeniør fra SDU og aktiv håndbrygger.

Han har vundet adskillige ølpriser for sit øl og haft øl med på Danske Ølentusiasters Ølmesse i flere år.

Pris: Kr. 100. Deltagelse iht. IDAs regler.

Tilmelding på ida.dk,

moede@ida.dk eller tlf. 33 18 48 18 – arr.nr. 994262

Mødet er arrangeret af Kemiingeniørgruppen

## 7. Danish Conference on Bio technology 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](http://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 Filtrerings-symposium

**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 omhandlerende 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](http://www.nordicfiltration.aau.dk).

## Mødekalender (5) 2012

**24.-25. 5. 2012** Kemiingeniørgruppen, 7. Danish Conference on Biotechnology and Molecular Biology, Hotel Munkebjerg Vejle, Se dk 2012 (1/2, 3, 4).

**24.5. 2012** Interessegruppen for Gasanalyse og Kemiingeniørgruppen, temamødet Mikrobiel luftforurening, Auditoriet NFA, København Ø. Se dk 2012 (4)

**25.5. 2012** Kemiingeniørgruppen, Smagsgivende elementer i øl, Valby Kulturhus. Se dk 2012 (5).

**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, 4, 5).

**1.-2.11. 2012** Dansk Selskab for Kemometri (DSK), Kemiingeniørgruppen, Hotel Nyborg Strand. Se dk 2012 (nr. 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



# Analyse Everything

## Materials Science

Cement, glass & coatings, plastics, petrochemicals, nanomaterials, metals

## Life Science

Structural biology, molecular imaging, metabolomics, proteomics, genomics

## Pharmaceuticals

Drug discovery, development, quality control, authenticity testing

## Environment

Land, air and water pollution, hazardous substances, waste management, pesticides

Choose from a comprehensive range of push-button solutions and high performance systems based on:

- **Magnetic Resonance**
- **Mass Spectrometry**
- **Vibrational Spectroscopy**
- **X-ray Analysis**

Our customers include major manufacturers and research centres, who rely on our high performance analytical instruments for a broad spectrum of applications in all fields of research and development, manufacturing and quality control.

**Find the solution to your analytical question**

**info@bruker.com ■ www.bruker.com**

Innovation with Integrity



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