



Kemisk Forening - Kemiingeniørgruppen

dansk kemi

Nummer 1-2 - Januar 2013 / 94. årgang

**Neandertalernes
hemmelighed**

**Jagten på
nye antibiotika**

**Ny online-
måling af
flygtige stoffer**



***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: Nu viser nye sofistikerede undersøgelser, at neandertalernes menukort var meget mere varieret end man troede. Læs om de spændende resultater på side 4.

4 Neandertalere tilberedte føde af kød, grøntsager og rødder over ild og selvmedicinerede sig med urtemedicin for omkring 50.000 år siden.

6 Læs om problematikken vedrørende resistens blandt sundhedsfarlige mikroorganismer og manglen på løsninger, f.eks. manglen på nye antibiotika. Temaet (antibiotika) belyses i en serie artikler i kommende numre af Dansk Kemi.

9 Årets bedste artikel

10 Papiruldisisolering – et grønt produkt? - Hvordan markedsføres det og hvilken regulering gælder?

14 En nyudviklet metode med online massespektrometri gør det muligt at lave hurtige dynamiske målinger af flygtige organiske stoffer (VOC) ned til ppt-niveau.

18 Brændselscellen blev alment kendt som vandgenererende kraftværk i 1960'ernes rumprogrammer. I dag er den en vigtig brik i energipuslespillet, og udviklingen fortsætter – bl.a. gennem arkitektonisk nytænkning af dens hjerte: en polymermembran.

22 Multivejs kemometriske modeller kan bruges til unikt at resolve multi-eksponentielle relaxationsprofiler i underliggende rene eksponentielle profiler. Metoden benytter sig af redundant information, og tricket hedder: slicing igen-igen.

26 Produkt-nyt

30 Læs mere om de nyeste arrangementer fra Kemisk Forening 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
Professor Carsten Christophersen (redaktør)
carsten@techmedia.dk
Lektor Søren Kiil
sk@kt.dtu.dk
Ph.d. Kristian B. Krogh
kbk@novozymes.com
Professor, seniorforsker Henrik Skov
hsk@dmu.dk

Redaktionskomité:

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

Redaktionssekretær:

Else Frederiksen
else.f@techmedia.dk

Annoncer:

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

Annonceproduktion:

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

Hjemmeside:

www.dansk kemi.dk

Abonnement:

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



Scan og hent Dansk Kemi's
medieinformation 2013 hér!

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

Layout:

Morten Malmgren

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 materiale, der indsendes uopfordret.

ISSN 0011- 6335

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



EFCE

- et europæisk forum med muligheder for danske kemiingeniører

” I den nærmeste fremtid uddeler EFCE priser til anerkendelsesværdige ph.d.-arbejder

European Federation of Chemical Engineering (EFCE) blev stiftet i 1953 som en paraplyorganisation for 18 kemiingeniørforeninger i 8 europæiske lande. Siden da er EFCE vokset til i dag at repræsentere 39 foreninger i 30 europæiske lande. Dansk medlem er Kemiingeniørgruppen, et fagteknisk selskab under Ingeniørforeningen i Danmark, IDA.

Aktiviteterne i EFCE spænder vidt fra koordinering af faglige netværk i såkaldte ”Working Parties” og sektioner til politisk lobbyarbejde med henblik på generelt at fremme uddannelse og forskning inden for kemiingeniørvidenskab samt gøre opmærksom på kemiingeniørvidenskabens nøglerolle i håndteringen af mange af (frem)tidens samfundsmæssige udfordringer såsom energiforsyning, miljøforhold og råstofudnyttelse.

Rammerne for det faglige netværksarbejde er 19 ”Working Parties” og 6 sektioner med fokus på emner som ”Chemical Reaction Engineering”, ”Computer Aided Process Engineering”, ”Crystallization” eller ”Food” m.fl. Her koordineres seminarer og specialiserede workshops.

Danmark er godt repræsenteret i ledelsen af EFCE, idet professor Rafiqul Gani fra DTU Kemiteknik er ”Scientific Vice-President”. Professor Gani stod i spidsen for ECCE-6 i København i 2007 (European Conference of Chemical Engineering). De europæiske ECCE-konferencer afholdes hvert andet år, og i april 2013 vil Haag i Holland være værtsby for ECCE-9 (www.ecce2013.eu). ECCE-9 afholdes koordineret med ECAB-2 (European Congress of Applied Biotechnology) under det fælles tema ”Shaping a sustainable future”.

Jeg vil gerne specielt gøre opmærksom på priser (Excellence Awards), som udddeles af EFCE til anerkendelsesværdige ph.d.-arbejder. I den nærmeste fremtid kan kandidater nomineres på områderne ”Product Design and Engineering 2013” (28/2) og ”Thermodynamics and Transport Properties 2013” (31/3). Priserne består blandt andet af et rejselegat og en kontant sum. Disse priser annonceres løbende på skiftende emneområder.

På hjemmesiden www.efce.info kan man finde mere information om aktiviteterne i de forskellige netværksgrupper samt løbende se opslag om konferencer og ”EFCE Awards”.

Peter Szabo, Kemiingeniørgruppen, ps@kt.dtu.dk

Fortidens tapasmenu

Neandertalere tilberedte føde af kød, grøntsager og rødder over ild og selvmedicinerede sig med urtemedicin for omkring 50.000 år siden.

Af Carsten Christophersen, carsten@techmedia.dk

Det har indtil for ganske nylig været god latin, at neandertalere hovedsageligt levede af kød. Nye sofistikerede undersøgelser af mellem 47.300 og 50.600 år gammel tandsten (calculus) viser, at de havde masser af grøntsager på menuen, og at de endog praktiserede urtemedicin. De gamle tænder stammer fra El Sidrón-hulen i Asturias i det nordlige Spanien, hvor mindst 13 neandertalere fandt deres sidste hvile.

Sukker og tandsten

Tandsten starter som belægninger (plaque) på tænderne. Sukker øger dannelsen, fordi bakterievæksten i mundhulen tiltager med stigende sukkerindtag. Bakterierne danner svært tilgængelige biofilm, der ophober dele fra føden og forkalker i løbet af et par uger. Det betyder - jo mere planteføde jo mere tandsten.

Analysér af tandsten

Tandsten – calculus inkluderer rester fra føden. Ved en kombination af optisk mikroskopi, skanning elektronmikroskopi, termisk desorption-gaskromatografi-massespektrometri, pyrolyse-gaskromatografi-massespektrometri identificeres en række mikrofossiler og nedbrydningsprodukter fra de organiske rester i calculus. Kombinationen af disse metoder, der kræver 0,7 mg prøve, giver oplysninger om, hvilke typer stivelseskorn der findes, og dermed hvilke typer af planter der blev spist. Ved sammenligning med friskt materiale giver analyserne dels information om planterne og dels om tilberedningen. Nogle sekundære stofskifteprodukter er så karakteristiske, at de direkte afslører plantearten.

Menuen

Analysér af calculus fra fem individer afslører, at alle spiste stivelsesholdig føde. Foruden mange markører for sukkerarter antages en lang række ligekædede alkaner (C22–C35) at stamme fra planternes vokssarter.

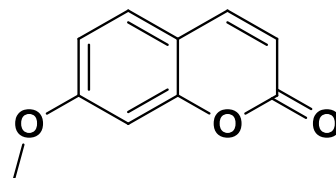




■ Neandertalere

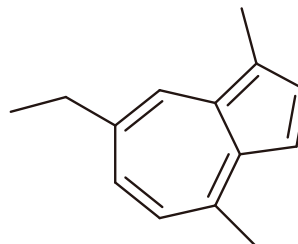
Neandertalere uddøde for 30.000–24.000 år siden. I det moderne menneske stammer 1-4% af generne fra dem – der har altså været en vis kontakt. De var kraftigt byggede og har været meget stærke. Deres hjerne var sammenlignelig i størrelse og måske endda lidt større, end den vi er udstyret med.

Indhold af fedtsyremethylestere, phenoliske syrer, phenoler og polynukleare aromatiske carbonhydrider (PAH) indikerer, at plantematerialet var varmebehandlet – kogt, stegt og/eller



herniarin

Findes i både kamille og røllike. Andre coumarinderivater – 4,5,7-trimethylcoumarin, 4-methylherniarin og scopoletin (6-methoxy-7-hydroxycoumarin) blev også påvist. 4-methylherniarin smager bittert og nedsætter appetitten.



chamazulen

Både kamille og røllike indeholder det blå chamazulen. Også azulen, dihydroazulen og 4,6,8-trimethylazulen blev påvist. Dihydroazulen og chamazulen smager bittert og nedsætter appetitten.

røget over ild, eller at personen havde indåndet røg. Analyserne påviste også markører for dyriske proteiner, men kun i ringe mængde og uden de forventede spor af dyrisk fedt.

En kvist kamille og lidt røllike

Kamille (*Matricaria chamomilla*) og røllike (*Achillea millefolium*), der begge smager bittert, stod overraskende nok også på menuen. DNA-analyser har vist, at beboerne fra El Sidrón havde det gen, som gør os i stand til at smage bittert. Det er vigtigt, fordi mange giftige planter også er bitre og derfor fravælges som føde. Røllike blev tidligere brugt mod diarre og til at stoppe blødninger. Kamille bruges stadig mod lette infektioner og hoste/åndedrætsbesvær. Det er nærliggende at antage, at neandertalere praktiserede selvmedicinering.

Kilde

Neanderthal medics? Evidence for food, cooking, and medicinal plants entraped in dental calculus. K. Hardy et al. *Naturwissenschaften* 2012, Bind 99, side 617-626.

Nyt om ...

... Før det store kolde bord

Slægten *Australopithecus* levede i Sydafrika for mellem 4 og 2 mio. år siden. Den efterfulgtes af slægterne *Paranthropus*, der havde sin gang på jorden fra 2,5 til 1,2 mio. år før nu, og *Homo*, der først dukkede op for 2,3 mio. år siden. Slægten *Homo* efterlod kun det moderne menneske – *Homo sapiens* – resten uddøde. Indblik i homininernes fødevalg er nu blevet tilgængeligt via bestemmelse af Ca-, Ba-, Sr-forhold i tandemalje fra forstenede tænder. Lave Ba/Ca-forhold er typisk for kødædere, lave Sr/Ca-forhold kendetegner altædere, mens høje Sr/Ca- og Ba/Ca-forhold findes hos græssere. Forholdet mellem $^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$ er uafhængigt af føden og afgøres alene af det lokale grundfjeld.

Forholdet mellem de forskellige jordalkalimetaller, frigjort fra tandemaljen ved laserbestråling, viser, at alle grupperne levede hele livet i samme område. For 2 mio. år siden proppede australopithecinerne stort set alt, hvad de kom i nærheden af, i sig – ådsler, bær osv. Efterfølgerne var langt mere specialiserede. *Paranthropus* levede udelukkende af planter. *Homo* ernærede sig hovedsageligt af kød. De 2 arter levede sammen i omkring 1 mio. år inden *Paranthropus* uddøde.

Carsten Christophersen

Kilde

Evidence for dietary changes but not landscape use in South Africa early hominins. V. Balter, J. Braga, P. Télouk og F. Thackeray. *Nature* 2012, 8. August DOI 10.1038/Nature11349

Artiklen er en bred fremstilling af problematikken vedrørende resistens blandt sundhedsfarlige mikroorganismer og manglen på løsninger, f.eks. manglen på nye antibiotika. Temaet belyses i en serie artikler i kommende numre af Dansk Kemi.



Jagten på nye antibiotika

Antibiotikaresistente bakterier i jord, husdyr, kæledyr, fødevarer og mennesker er et voldsomt stigende og livstruende problem, hvor der indtil videre ikke har vist sig duelige generelle løsninger.

Af Carsten Christophersen, carsten@techmedia.dk

På trods af den stigende forekomst af infektioner med antibiotikaresistente bakterier, der kan være dødelige, udvikles og kommercialiseres næsten ingen nye antibiotika. Forbruget af kommercielle antibiotika stiger til både industrielle formål og i sygdomsbehandlingen – denne udvikling er ikke bæredygtig og kræver nytænkning og nye initiativer.

■ Nul nye antibiotika

I USA markedsførtes i de fire år fra 1983-87 16 nye antibiotika. Antallet har været støt faldende siden for at nå det foreløbige lavpunkt i perioden 2008-12, hvor der blev markedsført én ny forbindelse.

Smitten breder sig

Der er flere grunde til, at resistens mod antibiotika stiger voldsomt. En væsentlig grund er et overvældende forbrug af antibiotika i dyreavl og i patientbehandling. Det selekterer for modstandsdygtighed blandt bakterierne. Danskerne oplevede i 2011 en stigning i antibiotikaforbruget til mennesker på 28%

sammenlignet med 2002. Forbruget af bredspektrede antibiotika steg 78% ift. forbruget i 2001.

Selvom antibiotikaforbruget i dansk svineavl den senere tid er faldet betydeligt, så bruges der stadig store mængder (77% af forbruget indenfor dyreavl). Mens antibiotikaforbruget til fjerkræ faldt til 810 kg i 2011, så steg forbruget til slagtekyllinger. Samme år var næsten halvdelen af alle kyllinger inficeret med ESBL (Extended-Spectrum Beta-Lactamases or cephalosporinases)-bakterier som *Escherichia coli*, *Salmonella* og *Klebsiella*. ESBL-bakterier kan ikke bekæmpes med penicillin- og cephalosporingruppen af antibiotika. De kan rammes af carbapenem antibiotika, men nu kendes også hyperresistente bakterier, der ikke påvirkes af dem – CPE (Carbapenemase Producing Enterobacteria). De indtil nu 15 registrerede tilfælde af CPE-bakterier fra mennesker i Danmark stammer alle fra udlandet. CPE-gruppen regnes lige nu for en af de største trusler mod sundheden.

Selv med et nedsat forbrug forsvinder resistensproblemerne ikke inden for en overskuelig fremtid. Bakterier, der lever i jorden har resistensgener (resistomer), der kan overføres til sygdomsfremkaldende bakterier. Multiresistente jordbakterier tåler β -lactamer, aminoglycosider, amphenicoler, sulfonamider og tetracycliner.

Nye modelstrukturer

Selv hvis industrien beslutter at opprioritere satsning på nye antibiotika, er der alvorlige problemer at overvinde. Der er katastrofal mangel på adgang til egnede modelstrukturer, som kan videreudvikles til kommercielle patenterbare forbindelser. Før i tiden kom modelstoffer fra industriens naturstofkemiske afdelinger. Men de blev nedlagt, da syntesekemien blev vurderet som fremtidens løsen. Den akademiske forskning beskriver godt nok flere og flere aktive forbindelser fra naturlig kilde,

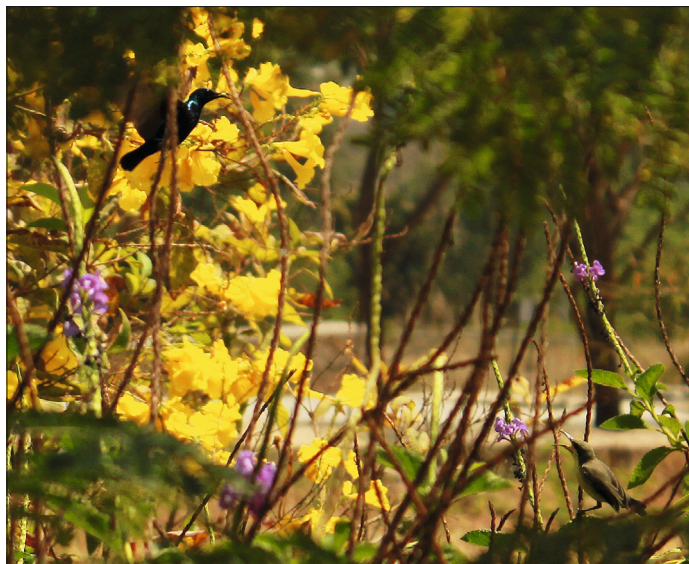
men den forskning er også reduceret betydeligt. Offentliggjorte strukturer er tilgængelige for alle interesserede, og risikoen for at en konkurrent arbejder med samme forbindelser er høj.

Konservativ eftersøgning

En anden komplikation er, at et meget stort antal af de tilgængelige antibiotika stammer fra naturstoffer, der har deres oprindelse i få arter af mikrosvampe (*Penicillium*) og bakterier. Medlemmer fra bakterieslægten *Streptomyces* er ansvarlig for omkring 2/3 af de klinisk vigtige antibiotika. Det er fristende at kaste sig over nye arter indenfor disse grupper, fordi der er stor sandsynlighed for at finde nye forbindelser her, og procedurerne er velkendte og gennemarbejdede. En sådan konservativ fremgangsmåde har den ulempe, at de nye forbindelser

■ Hvor bliver medicinalindustrien af?

Medicinalindustriens manglende fokus på introduktion af nye antibiotika skyldes først og fremmest, at processen ikke er økonomisk tiltrækkende. Det koster ca. en mia. kr. at markedsføre et nyt antibiotikum, som så kan patentbeskyttes i 20 år. Der udfoldes store anstrengelser for at reducere brugen med henblik på at forsinke resistensudvikling. Men så nedsættes salget og den årlige profit, og snart udløber patentperioden. Så kan enhver markedsføre præparatet. Nu diskuteres det derfor at overlade eftersøgningen og antibiotikaudviklingen til staten eller til en kombination af stat og industri.



iva

Komplette
automations-
løsninger for alle
veje applikationer...



KVALITET · FLEKSIBILITET · SIKKERHED

Book et møde

- og bliv introduceret til et program af vægte og vejestyr, der opfylder internationale standarder.

Jydsk Vægtfabrik tilbyder:

- Rådgivning/design og udstyrs-kvalifikation
- Integration med øvrigt udstyr
- Installation, service og akkrediteret kalibrering og verifikation



ENERGI & TRANSPORT



FARMACEUTISK INDUSTRI



SERVICE & KALIBRERING



FØDEVARE INDUSTRI



KEMISK INDUSTRI

jydsk vægtfabrik - leverandør af
højteknologisk vejestyr til industrien.

Vejlbjergvej 12
8240 Risskov · 8617 6111
info@jva.dk

jydskvægtfabrik
www.jva.dk

som regel hører til variationer indenfor velkendte grupper, som hurtigt vil udløse resistens. Langt mere lovende, men også langt mere omkostningstungt og arbejdskrævende, er undersøgelse af helt nye grupper af organismer. De kan formodes at have komplet ukendte typer af aktivforbindelser. Blandt den enormt store mængde levende bakteriearter kan hovedparten ikke dyrkes under normale betingelser. Moderne bioteknologi mestrer gradvist at fiske de ønskede arveanlæg ud og overføre dem til produktionsbakterier og på den måde skabe adgang til nye naturstoffer. Klodens kolossale biodiversitet, der udmøntes i fantastiske økosystemer, indeholder endeløse mængder af specialiserede opskrifter på antibiotika. De er nu tilgængelige for moderne forskning.

■ Klassens artige dreng

På trods af det enorme antibiotikaforbrug så hører Danmark til blandt de absolut mest restriktive antibiotikabrugere i Europa. Det er svært at vide præcist, hvor meget mindre vi bruger, specielt i agrikultursektoren, fordi de europæiske lande ikke generelt har en lovpligtig registrering. I Nederlandene har forbruget f.eks. bevæget sig nedad de seneste år. Til husdyr blev der i 2010 solgt 433 tons aktivstof svarende til 212 mg pr. kg levende vægt, mens det tilsvarende tal for Danmark var 127 tons og 101 mg pr. kg.



Klodens kolossale biodiversitet, der udmøntes i fantastiske økosystemer, indeholder endeløse mængder af specialiserede opskrifter på antibiotika.

En hjælpende hånd

I det kommercielle arsenal af antibiotika er de fleste resistensbelastede. En farbar vej til reduktion af resistensen kan være at søge efter naturstoffer, der angriber selve resistensmekanismen uden selv at virke antibiotisk. Mange antibiotika virker ikke efter hensigten, fordi de bliver fjernet fra bakterierne af effektive pumper, der smider dem ud af cellerne. Hjælpemedicin kan imidlertid virke ved at blokere pumperne og derved genskabe medikamentets aktivitet. Alment set opstår det hurtigt voksende resistensproblem ved flere andre vigtige mekanismer. Det virksomme stof kan inaktiveres ved enzymatisk nedbrydning eller omdannelse inde i cellen. Eksempler på det er bakteriers forsvar vha. β -lactamase eller cephalosporinase-enzym, der

nedbryder antibiotika af penicillin og cephalosporintypen. Celledembranen kan være uigennemtrængelig for forbindelsen eller målstrukturen/receptoren i cellen kan ændres, så reaktionen med stoffet ikke længere fører til det forventede resultat.

Kilder

Plants as sources of new antimicrobials and resistance-modifying agents. A. C. Abreu, A. J. McBain og M. Simões. *Natural Product Reports* 2012, Bind 29, side 1007 – 1021. Doi:10.1039/c2np20035j
<http://www.danmap.org/Downloads/Reports.aspx> Indeholder statistik og nøgledata over antibiotikaforbruget i Danmark i 2011.
The Shared Antibiotic Resistome of Soil Bacteria and Human Pathogens. K. J. Forsberg *et al.* *Science* 2012, Bind 337, side 1107-1111.
<http://www.maran.wur.nl/UK/>

Nyt om ...

... Infektioner helbredes uden antibiotika

Infektioner med *Clostridium difficile* er, som navnet antyder, svære at behandle. De optræder mest i hovedstadsregionen og på Sjælland. I første halvdel af 2012 blev der registreret 542 tilfælde i Danmark. *C. difficile* findes udbredt i miljøet og danner sporer, der modstår næsten alle behandlinger. I fordøjelseskana-len holdes de sædvanligvis i skak af andre bakterier. Ved behandling med bredspektrede antibiotika udryddes en stor del af deres konkurrenter, og der udvikles en infektion, som kan forløbe dødeligt. Det viser sig nu, at en cocktail af seks bak-

teriearter fra fordøjelseskana-len kan helbrede infektionen hos mus. Hvis metoden udvikles til et behandlingstilbud mindskes antibiotikaforbruget i sundhedsvæsenet.

Carsten Christophersen

Targeted restoration of the intestinal microbiota with a simple, defined bacteriotherapy resolves relapsing *Clostridium difficile* disease in mice. T. D. Lawley *et al.* *PLOS Pathogens* 25 October 2012 DOI: ppat.1002995
www.ssi.dk/Aktuelt/Temaer/Clostridium%20difficile.aspx

Årets bedste artikel



Ved Dansk Kemis årlige redaktionskomitemøde er en af de vigtigste opgaver at udvælge årets bedste artikel. Og da komitedømmerne kommer fra meget forskellige kemiske traditioner kan det være svært.

Men det var det ikke i år. Forholdsvis hurtigt blev det klart, at vinderen for 2011-2012 er: artikelserien om DDT, der blev bragt i Dansk Kemi nr. 3 til nr. 8, 2012.

Artiklerne er skrevet af lektor Anne-Mette Vire, Risskov Gymnasium, Julie Dam Larsen, Institut for Bioscience, Aarhus Universitet, Maria Kjeldstrup Christensen, Institut for Kemi, Aarhus Universitet, Tina

Mønster, Institut for Bioscience, Aarhus Universitet.

De fortæller en spændende og vedkommende historie om, hvordan DDT er blevet anskuet og brugt gennem tiden og frem til i dag.

Serien giver en pædagogisk og godt formidlet introduktion til hele DDT-problematikken. De korte, præcise artikler er godt skåret til og er velegnede til brug i gymnasiet.

Forfatterne ønskes et stort tillykke fra Dansk Kemis fagredaktion og redaktionskomite.

Redaktionskomiteen for Dansk Kemi

AKADEMIET FOR DE
TEKNISKE
VIDENSKABER

ATV

Den danske polymerpris - ATV | Elastyrenprisen 2013

Den danske polymerpris – ATV | Elastyrenprisen 2013 uddeles for sjette gang i 2013 i forbindelse med ATV's årsmøde torsdag den 18. april 2013. Prisen kan være på op til 100.000 kr. til én modtager.

Prisen uddeles til en forsker, der har udmærket sig igennem nytænkning og markante resultater inden for kemisk forskning i og udvikling af syntetiske eller biologiske polymerer til medicinsk anvendelse. Priskomiteen kan vælge at lægge vægt på arbejde inden for elastomere materialer.

Indstilling eller ansøgning

For at komme i betragtning ved uddelingen af prisen i 2013 skal indstilling eller ansøgning være ATV i hænde senest torsdag den 28. februar 2013. Form- og oplysningskrav fremgår af ATV's hjemmeside, www.atv.dk

Indstillinger eller ansøgninger vil blive behandlet af en priskomite bestående af formand, professor Niels Christian Nielsen, iNANO og Kemisk Institut, AU, CEO Jørgen Drejer, Aniona ApS, professor Søren-Peter Olesen, Medicinsk Fysiologisk Institut, KU, professor Ole Hassager, DTU Kemiteknik, og CEO Peter Samuelsen, Acarix A/S.

Spørgsmål

Eventuelle spørgsmål kan rettes til Lise Thurmman, ATV, på telefon 45 96 08 23 eller e-mail lt@atv.dk.

Med venlig hilsen

Akademiet for de Tekniske Videnskaber

Lundtoftevej 266
2800 Kgs.Lyngby

tlf.: 4588 1311
atvmail@atv.dk
www.atv.dk

Papiruldsisolering – et grønt produkt?

- hvordan markedsføres det og hvilken regulering gælder?

Af Poul Bo Larsen,
cheftoksikolog, Afd. for
Miljø og Toksikologi, DHI

I det efterfølgende gives et eksempel på, hvordan et produkt med en meget simpel sammensætning kan volde en del hovedbrud, når man som virksomhed skal tage højde for diverse lovgivninger og regelsæt, som skal efterleves. Det er i særlig grad en udfordring, når man gerne vil sikre sig, at produktet, man markedsfører, er sikkert at anvende, og man ikke ønsker at komme på kant med lovgivningen.

Papiruldsisolering - et kemisk produkt?

Først et par ord om hvad papiruld eller celluloseuld er. Papiruld fremstilles af genbrugspapir, typisk aviser, som findeles til et porøst papirgranulat. Til papirgranulatet tilsættes en eller flere flammehæmmere, f.eks. metaloxider, aluminiumhydroxid og borsyre/ boraks (efterfølgende omtalt som borsyrestoffer) i pulverform, der ved sammenblanding hæfter sig løst til papirgranulatet.



Papiruld bliver lavet af genbrugspapir.
Foto: www.papiruld.dk

Genanvendelsespapir/papirmasse defineres ifølge kemikalieforskriften, REACH, som et kemisk stof. Når man blander andre kemiske stoffer i papirmassen, opnår man en kemisk blanding, som så skal klassificeres og mærkes i overensstemmelse med kemikalielovgivningen. De fleste papiruldsprodukter på det danske marked indeholder borsyrestoffer, som fungerer som flammehæmmere i produktet. Disse stoffer er klassificeret som reproduktionstoksiske i kategori 1B, da de kan skade forplantningsevnen og det ufødte barn. Dette betyder, at papiruldsprodukter med indhold af borsyrestoffer over en vis grænse (5,5-8,5% afhængigt af det konkrete borsyrestof) skal klassificeres

og mærkes som reproduktionstoksiske.

På linje med andre produkter, der er klassificeret og mærket som akut giftige, mutagene, kræftfremkaldende eller reproduktionstoksiske i kategori 1A eller 1B, skal papirulden i disse tilfælde mærkes med et dødningehoved eller en eksploderende mand. Derudover er papirulden omfattet af reglerne for salg af giftige stoffer og blandinger, hvilket bl.a. betyder, at produktet



Det færdige produkt bliver løst og luftigt. Foto: www.papiruld.dk

er underlagt særlige krav i forbindelse med salg og anvendelse af professionelle, samtidig med at produktet ikke må sælges til private uden særlig tilladelse.

Det kan nævnes, at der ud fra en søgning på internettet er fundet papiruldsprodukter med op til 10% indhold af borsyre-stoffer på det danske marked, mens faglige rapporter fra sidst i 90'erne angiver, at der har været anvendt helt op til 25% indhold af disse stoffer i produkterne.

Papiruldisolering – kemi eller form?

Ifølge definitionerne i kemikalielovgivningen er et kemisk produkt ikke længere et kemisk produkt, hvis det markedsføres

på en måde, hvor produktets form, overflade eller design i højere grad er bestemmende for funktionen af produktet end den kemiske sammensætning.

Hvis papiruldsgranulat er komprimeret i plader til isoleringsformål, er det formen som den komprimerede plade fremfor det kemiske indhold, der bestemmer funktionen, og så vil produktet anses for en artikel iflg. REACH- og CLP-lovgivningen.

Artikler er ikke omfattet af reglerne for klassificering og mærkning, og derfor kan artikler forhandles uden faremærkning, uanset hvor højt indholdet af borsyrestofferne måtte være.

Fokus på borsyre og boraks i kemikalielovgivningen

I REACH har man sat fokus på borsyre og boraks pga. stoffernes reproduktionstoksiske egenskaber. Stofferne er bl.a. på dansk foranledning blevet udpeget som SVHC stoffer (Substances of Very High Concern) og har siden juni 2010 optrådt på REACH's kandidatliste over særligt problematiske stoffer.

Når et stof opføres på kandidatlisten, er det hensigten, at anvendelsen af stoffet på længere sigt bør udfases. Så kan EU-Kommissionen i samarbejde med kemikalieagenturet og EU-medlemsstaterne beslutte, at stoffet skal være omfattet af godkendelsesordningen under REACH, dvs. at stoffet ikke længere må anvendes, uden at der først er opnået en godkendelse af virksomhedernes anvendelse af stoffet.

P.t. er der imidlertid ikke taget initiativer til at videreføre boresyrestofferne til godkendelsesordningen under REACH.

Sikker anvendelse af borsyre?

Indtil videre skal arbejdsmiljølovgivningen, REACH og CLP-lovgivningen sikre, at et produkt som papiruldisolering kan



ALSIDENT® udsugningssystemer

– gør arbejdsmiljøet renere!

**alsident®
system**

www.alsident.com

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



Udlægning kan gøres med omtanke. Foto: www.papiruld.dk

anvendes sikkert såvel af den professionelle bruger som den private forbruger. Arbejde med papiruld er en støvende affære, hvor støvet består af en blanding af cellulosefibre og borsyrestoffer. På flere hjemmesider for papiruldsprodukter kan man se, at arme og tøj er fuldstændig gråt efter arbejde med papiruldsgranulatet, så det kan ikke undgås at man udsættes for borsyrestofferne i forbindelse med arbejdet – men i hvilket omfang?

I REACH-registreringerne af borsyrestofferne skal der være risikovurderinger af alle de anvendelser, som stofferne markedsføres til. Det skal således i REACH-registreringerne dokumenteres, at anvendelse af borsyrestoffer i papiruldisolering er sikkert at arbejde med såvel ved udblæsning af granulatet som ved manuel udlægning.

Det er på kemikalieagenturets hjemmeside muligt at gå ind i disse registreringer, men den offentligt tilgængelige del af registreringerne giver desværre ikke mulighed for at se, hvorvidt brugen i papiruldisolering er omfattet, og på hvilken måde.

Ud fra den seneste vurdering af borsyrestoffer foretaget af EU's kemikalieagenturs risikovurderingskomite, RAC, formodes den tolerable udsættelse for borsyrestoffer at ligge i intervallet 0,096–0,19 mg bor/kg legemsvægt/dag (svarende til døgn dosis på 6,7–13,3 mg bor for en person på 70 kg). Omregnet til borsyre svarer dette til 38–76 mg borsyre over en arbejdsdag.



Relevante faresymboler, når borsyreprodukter skal klassificeres efter den nye og den gamle klassificerings- og mærkningsordning:

Dvs. at et sikkert og acceptabelt eksponeringsscenarie i REACH-registreringen vil skulle angive eksponeringsbegrænsende tiltag, som sikrer, at brugeren ikke udsættes for og optager mere end 38–76 mg borsyre under arbejdet.

Papiruldisolering som biocid?

Ved markedsføring af papiruldisolering omtales på flere hjemmesider, at indholdet af borsyre medfører, at produktet har en biocideffekt og er med til at beskytte husets trækonstruktioner og til at holde skadedyr væk.

Ved at anprise produktet på denne måde bevæger firmaerne sig ind i yderligere et reguleringsområde, og produktet skal nu leve op til de krav, der er i EU's biocidregulering. Det kræver, at papiruldsgranulatet skal godkendes som biocid, før det må markedsføres på denne måde.

Da ingen papiruldsprodukter har opnået en sådan godkendelse, er denne markedsføring således ikke i overensstemmelse med gældende lovgivning, – så længe denne effekt af papirulden omtales.

Papiruldisolering som farligt affald?

Når rester af papiruldsgranulat eller gammelt granulat skal bortskaffes som affald, skal det foregå i overensstemmelse med affaldsbekendtgørelsen. Her følger man klassificeringsreglerne for kemiske produkter, således at affald med en koncentration af et farligt stof, der berettiger en fareklassificering, skal bortskaffes som farligt affald. Dette gælder også for bortskaffelse af artikler som affald, selvom artikler som nævnt ovenfor ikke skal være faremærket, når de forhandles.

Kort sagt skal alle isoleringsmaterialer af papiruldsgranulat med mere end 5–8,5% borsyrestoffer som udgangspunkt bortskaffes som farligt affald.

Konklusion

Eksemplet med papiruldisolering viser, at anvendelse af farlige stoffer kan være problematisk – og ikke mindst når produktet indeholder omkring 5% af et reproduktionstoksisk stof, samtidig med at det markedsføres som et "grønt produkt". Det skal i den forbindelse nævnes, at dele af branchen er begyndt at anvende andre flammehæmmere i papirulden end borsyre.

Denne lovgivningsmæssige gennemgang af et produkt, der blot indeholder to-tre kemiske stoffer, viser, at det er vigtigt at holde tungen lige i munden og være godt orienteret i den komplekse lovgivning, inden man som virksomhed markedsfører sit produkt. Ellers kan man nemt risikere at komme på kant med lovgivningen.

Så ud over at koncentrere sig om produktion, markedsføring og tekniske egenskaber må virksomheder være opmærksomme på, hvad et produkts kemi medfører af krav – også selvom produktet ikke ligner et traditionelt kemisk produkt.

Denne artikel er skrevet med udgangspunkt i et projektarbejde udført af DHI for Rockwool International A/S. For øvrige detaljer henvises til rapporten "Cellulose/paper wool insulation – aspects in relation to regulatory requirements and risk assessment", som kan ses på <http://www.rockwool.dk/pressemeddelelser+og+nyheder/pressemeddelelse?dkpress=4040>

E-mail
Poul Bo Larsen: pbl@dhigroup.com

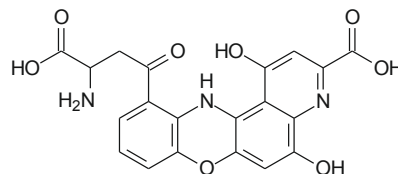
Henvisninger til relevant regulering:

AT (2011). Bekendtgørelse om ændring af bekendtgørelse om grænseværdier for stoffer og materialer bek. nr. 1134 af 01/12/2011.
Lovbekendtgørelse nr. 878 af 26. juni 2010. Lov om kemiske stoffer og produkter Bekendtgørelse af lov om kemiske stoffer og produkter.
Miljøministeriets bekendtgørelse nr. 1075 af 24. november 2011 om klassificering, emballering, mærkning, salg og opbevaring af stoffer og blandinger.
Europa-parlamentets og Rådets forordning (EF) nr. 1272/2008 af 16. december 2008 om klassificering, mærkning og emballering af stoffer og blandinger mv. (CLP)
Europa-parlamentets og Rådets forordning (EF) nr. 1907/2006 af 18. december 2006 om registrering, vurdering og godkendelse af samt begrænsninger for kemikalier (REACH)
Europa-Parlamentets og Rådets direktiv 98/8/EF af 16. februar 1998 om markedsføring af biocidholdige produkter.
Miljøministeriets bekendtgørelse nr. 702 af 24. juni 2011 om bekæmpelsesmidler.
Miljøministeriets bekendtgørelse nr. 1415 af 12/12 2011 om affald.

Nyt om ...

... Guldsmeden rødmer, når den bliver kønsmoden

Det er jo velkendt, at mennesker kan rødme; men det gælder også insekter. Japanske forskere har vist, at de unge hanner af



XANTHOMMATIN (reduceret form - rød)

guldsmeden *Crocothemis servilia*, der er gule, bliver røde, når de bliver kønsmodne. Ved at ekstrahere farvestoffet xanthommatin fra guldsmedene har de kunnet vise, at farveskiftet skyldes en redoxreaktion, hvor den gule form reduceres til den røde. Ved at injicere ascorbinsyre i maven på ikke kønsmodne han-guldsmede har man fået dem til at skifte farve fra gult til rødt.

Carl Th.

Redox alters yellow dragonflies into red Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 2012, DOI: 10.1073/pnas.1207114109



Med Duo kan du skylle begge øjne på én gang

Mange øjenulykker rammer begge øjne. Alligevel har du indtil nu ikke kunnet få en mobil øjenskyller, som kan skylle begge øjne på én gang. Det betyder, at du ved alvorlige ulykker har måttet stille dig selv det urimelige spørgsmål: Hvilket øje vil du redde? Det behøver du ikke længere. Plum Duo er derfor i mange tilfælde et nødvendigt supplement til dit almindelige øjenskyllersystem.

Du kan få Plum Duo både som pH Neutral og almindelig steril øjenskyller.

Kontakt os for mere information på tel: 6471 2112
info@plum.dk • www.plum.dk

plum



Følsom online-måling af flygtige stoffer

Online massespektrometri gør det muligt at lave hurtige dynamiske målinger af flygtige organiske stoffer (VOC) ned til ppt-niveau.

Af Mette Marie Løkke, Anders Feilberg, Dezhao Liu, Michael J. Hansen og Anders Peter S. Adamsen, Institut for Ingeniørvidenskab, Aarhus Universitet

I forskellige miljømæssige og industrielle sammenhænge kan det have stor interesse at kunne måle flygtige stoffer med høj tidsopløsning og følsomhed. Det kan f. eks. være flygtige organiske stoffer, der bidrager til luftforurening, aromastoffer i fødevareindustrien eller flygtige organiske stoffer, der dannes og omsættes ved biologiske processer. Traditionelt måles flygtige organiske stoffer (VOC) med gaskromatografi (GC), der dog typisk er begrænset af tidskrævende prøveopsamling. Her kan et forholdsvis nyt instrument, en såkaldt PTR-MS (Proton-Transfer-Reaction Mass Spectrometry), være et godt alternativ [1].

PTR-MS - hvad er det?

PTR-MS er en målemetode, der er velegnet til at måle dynamiske ændringer af forekomst og frigivelse af VOC. Metoden er karakteriseret ved høj tidsopløsning og der kan opnås detektionsgrænser ned til få ppt. En anden oplagt fordel ved PTR-MS er, at man kan måle VOC helt uden forudgående prøveopsam-

ling eller -oprensning, hvilket ofte vil spare tid, ligesom evt. tab under prøvehåndtering undgås. PTR-MS benytter en kemisk ionisering med protonoverførsel fra protoneret vand (H_3O^+). Den bløde ionisering gør, at de fleste protonerede molekyler ikke fragmenterer eller fragmenterer i begrænset omfang, hvilket er en stor fordel ved komplekse sammensætninger af stoffer. Fordelen ved at bruge H_3O^+ som ioniseringskilde er, at de mest forekommende komponenter i luft ikke ioniseres, fordi de har lavere proton-affinitet end vand. Til gengæld er metoden begrænset til stoffer, der har højere proton-affinitet end vand. På Aarhus Universitet har vi to PTR-MS-instrumenter, der igennem de seneste ca. 4 år har været brugt til målinger af bl.a. svovlforbindelser, aldehyder, ketoner, carboxylsyrer, phenoler og indoler. I det følgende præsenteres udvalgte eksempler.

Effekt af biologisk luftrensning måles on-site

Instrumentet er mobilt og kan f. eks. bruges til at måle online på afgangsluft fra en stald (figur 2). Lugtstoffer fra specielt svinestalde kan være til stor gene for folk, der bor tæt på, og alt tyder på, at flygtige svovlstoffer er stærkt medvirkende til lugt fra svinestalde [3]. Disse stoffer kan være vanskelige at måle med traditionelle metoder, da de er flygtige, reaktive og i visse

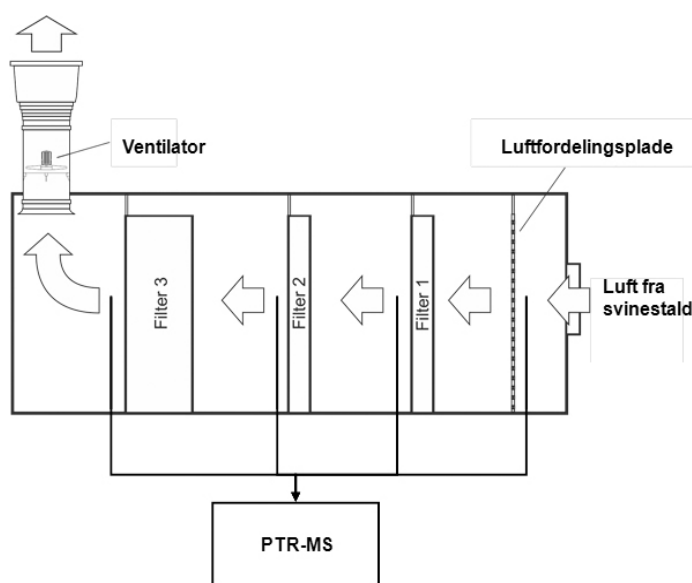
tilfælde til stede i lave – men lugtbare – koncentrationer. I et forsøg med en biologisk luftrensner blev PTR-MS brugt til at identificere de lugtstoffer, som luftrenseren skal optimeres ift. [4]. I figur 3, side 16 ses det, at den biologiske luftrensner kan fjerne en lang række af de lugtstoffer, som findes i staldluften, og at det hovedsageligt er svovlforbindelserne, som er tilbage efter luftrenseren. PTR-MS gør det muligt at måle de lave koncentrationer efter filtret – og dermed effektiviteten – og med de kontinuerede målinger kan opnås et meget stort datagrundlag og man kan f.eks. følge døgnvariation.

Høj tidsopløsning bruges til at bestemme materials potentiale for luftrensning

Ud over at karakterisere luft før/efter en luftrensner kan PTR-MS også udnyttes til at optimere renseteknologien. F.eks. har PTR-MS været brugt til at bestemme masseoverførselskoefficienter for pakningsmaterialer, der anvendes i biologiske



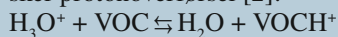
Figur 1. PTR-MS opstillet ved forsøgsstald. Oven på instrumentet ses en opvarmet ventilbox (multiplekser), der automatisk sørger for at udtage prøver de udvalgte steder i stalden. Instrumentet suger selv prøveluften ind i reaktionskammeret.



Figur 2. Princippet i den tretrins-biologiske luftrensner. PTR-MS udtog automatisk luft fra indgangsluften fra stalden og efter hvert filter [4]. Dette filter består af celluloseplader, der overrisles med vand. I filtret opbygges en biofilm, som nedbryder lugtstoffer fra staldluften til lugtfrie stoffer.

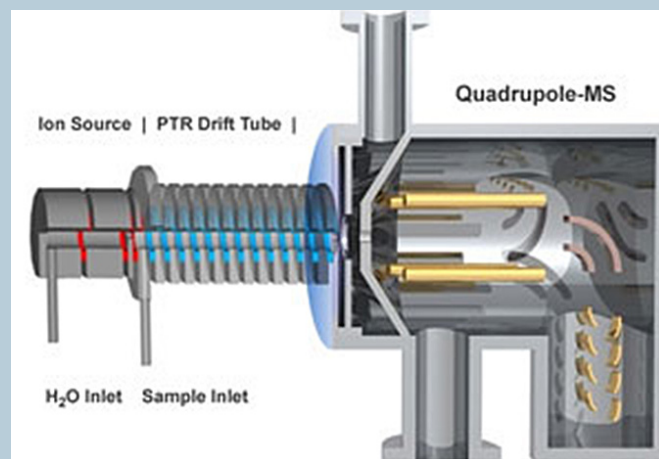
Princippet i PTR-MS

Luften suges direkte ind i driftkammeret, hvor VOC under lavt tryk kommer i forbindelse med protoneret vand, og der sker protonoverførsel [2]:



H_3O^+ produceres ved at beskyde vanddamp med elektroner, og for at fremme reaktionen sikres der et overskud af H_3O^+ ift. VOC.

PTR-MS fås både med et kvadropol massefilter og med time-of-flight massefilter (TOF). Hvor PTR-MS med kvadropol er billigere, gør PTR-TOF-MS det muligt at skelne mellem stoffer med samme masse, men forskellig grundstofsammensætning. For nylig er andre ioniseringsreagenser (primært O_2^+ og NO^+) end vand udviklet til kemisk ionisering i PTR-MS-instrumenter. Det giver mulighed for detektion af stoffer, der ikke protoneres med H_3O^+ , samtidig med at anvendelse af en kombination af forskellige ioniseringsreagenser kan give information om kemisk struktur og dermed hjælpe med identifikation.



Kilde: Ionicon Analytik GmbH.

filtre. Masseoverførselskoefficienter bruges som mål for, hvor hurtigt et stof i gasfasen optages i en vandig fase. Masseoverførsel har vist sig at være en begrænsende faktor ift. at opnå effektive luftfiltre til stalde. Masseoverførselskoefficienter kan bestemmes med PTR-MS i laboratoriet ved at måle gennembrudskurven for en puls af et specifikt stof. Ved at simulere gennembrudskurven med en model kan masseoverførselskoefficienten bestemmes. Denne fremgangsmåde er mulig, fordi gennembrudskurven kan måles med den høje tidsopløsning, der er karakteristisk for PTR-MS. Et eksempel på målte og simulerede gennembrudskurver er vist i figur 6, side 16.

Pipettecenteret

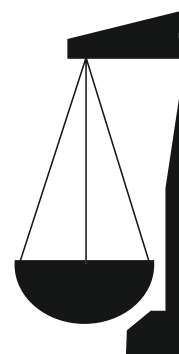
Kalibrering og service af alle fabrikater pipetter.

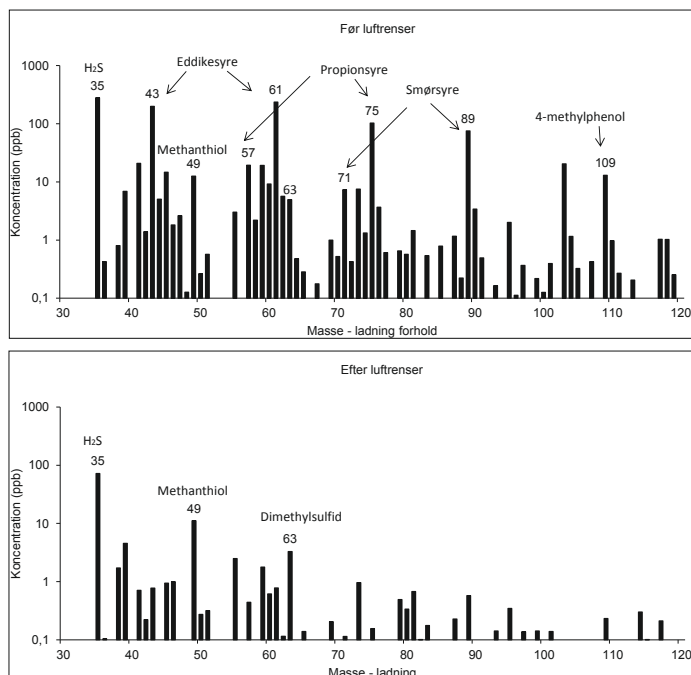
Vi kalibrerer både ved indsendelse eller på kundens adresse.

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

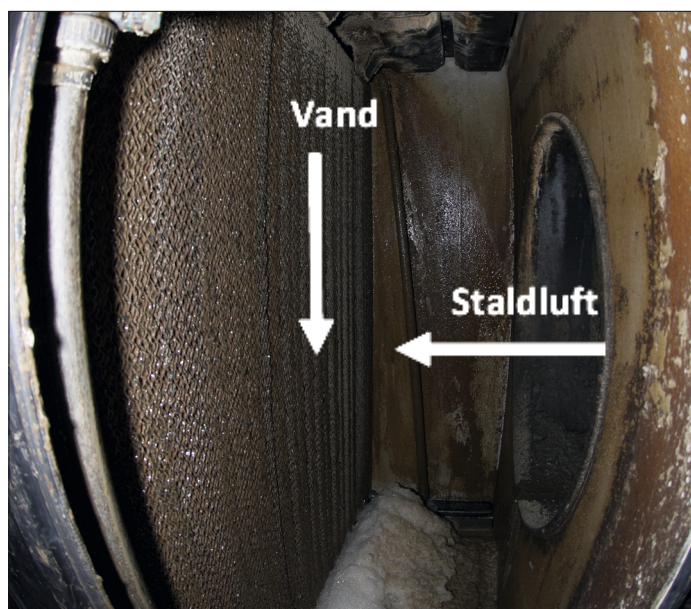




Figur 3. Massespektrum før og efter luftrensning. Filtret er effektivt til at fjerne langt de fleste stoffer, men bl.a. svovlstofferne har meget lav masseoverførsel til filtrets vandfase, og de er derfor svære at fjerne med den biologiske luftrensning.

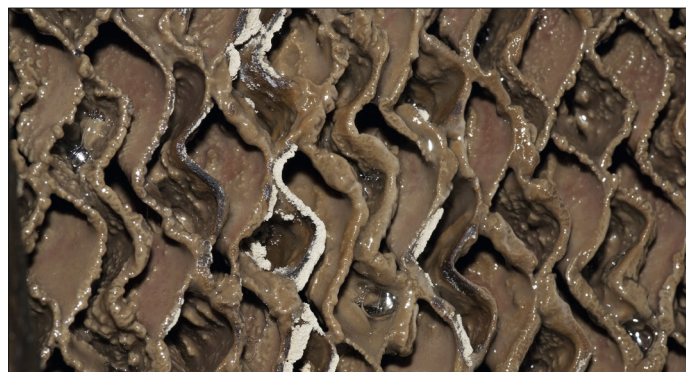
Dynamisk udvikling af lugt fra friskskåret løg

Mange har oplevet at få tårer i øjnene, når de skærer løg. Det skyldes de hurtige enzymatiske processer, der sker når løgets cellevægge brydes og enzymer og substrater kommer i kontakt med hinanden. Processerne giver anledning til udsendelse af mange svovlholdige stoffer, som bl.a. giver den karakteristiske



Figur 4. Første filter i den biologiske luftrensning. Luften fra stalden kommer ind fra højre i billedet og filtret overrisles med vand. Bemærk at billedet er taget med vidvinkel. Foto: Claus Lunde Pedersen.

løgglugt. Vi har undersøgt dynamikken i frigørelse af lugtstoffer fra friskskåret løg med PTR-MS [7]. Straks efter skæring kunne det tårefremkaldende stof – propanthial-S-oxid – detekteres. Tårefremkalderen forsvandt hurtigt, og efter 10 min var der ikke mere af stoffet tilbage. Det stof, der herefter fremkalder

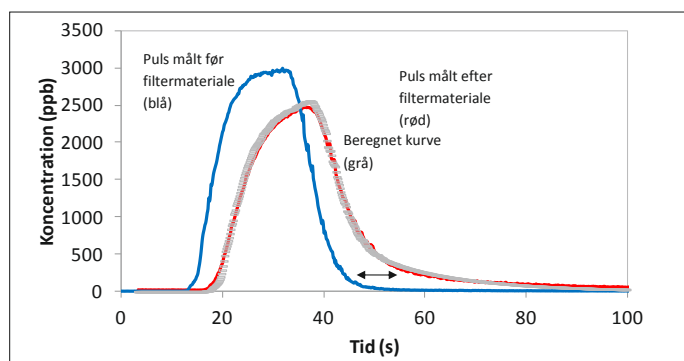


Figur 5. Closeup af materialet i filtret. Den brune film består af støvpartikler og biofilmen. Filtret er ikke podet, men mikroorganismerne kommer med staldluften, og efter et stykke tid har biofilmen etableret sig og lever af de stoffer, der findes i staldluften. De hvide plamager er vækst af skimmelsvampe, som ser ud til at forbedre effekten af luftrenseren mht. fjernelse af H_2S [5]. Foto: Claus Lunde Pedersen.

den karakteristiske løgglugt, kunne påvises at være propanthiol. Dette har været overset i andre undersøgelser, hvor man har opsamlet de flygtige stoffer på f.eks. adsorptionsrør med henblik på termisk desorption og GC-MS-analyse, hvorved propanthiol i visse tilfælde kan omdannes fuldstændigt til dipropyldisulfid. Andre typer af frugt og grønt kan meget vel tænkes at have lignende tidsforløb i frigivelse af stoffer efter skæring, og det vil formentlig have stor betydning for aromaopfattelsen, hvor lang tid der går fra skæring til fortæring. PTR-MS vil også i mange andre sammenhænge kunne bruges til at undersøge sammensætningen af flygtige komponenter under produktion af fødevarer.

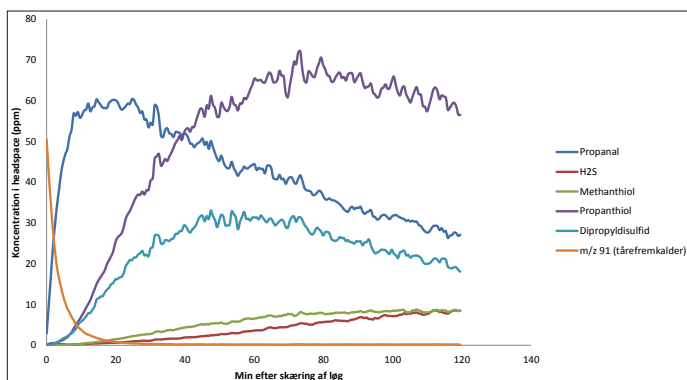
PTR-MS afslører forsvarsspray fra væggelus

Væggelus udsender kemiske stoffer for at undgå parringsforsøg. Tidligere studier har været baseret på opsamling af de flygtige komponenter gennem længere tid, men med PTR-MS kunne ændringer i sammensætningen af VOC skelnes i løbet af få sekunder [8]. PTR-MS-målingen blev kombineret med videooptagelser, og dermed afsløres sammenhængen mellem parringsforsøg og udsendelse af forsvarsstoffer – væggelusenes svar på peberspray. Væggelus parrer sig med såkaldt "traumatisk inseminering", hvor hannen penetrerer hunnens bug, og hun har derfor interesse i at begrænse antallet af parringsforsøg. Stoffernes identifikation blev bekræftet ved GC-MS, og stofferne i højeste koncentration var 2-hexenal og 2-octenal,



Figur 6. Forsinkelsen mellem den røde kurve og den blå kurve og ændringen i formen siger noget om masseoverførslen mellem luft og vand. Masseoverførselskoefficienten beregnes ud fra den fittede kurve (grå) og siger noget om, hvor hurtigt stoffet overføres til vandfasen. Jo højere koefficient jo bedre fjernelse forventes i det biologiske filter [6].

hvilket også er fundet i andre studier. Der blev målt op til 10 µg frigivet i en enkelt spray. Hanner udsendte også forsvarsspray under homoseksuelle parringsforsøg, men det var ikke muligt at skelne mellem hanners og hunners forsvarsspray ud fra den kemiske sammensætning. Kombinationen af videooptagelser med PTR-MS har givet en unik indsigt i adfærden af disse irriterende insekter, hvilket måske kan bruges til videreudvikling af bedre bekæmpelsesmetoder.



Figur 7. Udvikling af flygtige stoffer udsendt fra et enkelt løg skåret i en foodprocessor [7]. I starten er m/z 91 den højeste, hvilket svarer til tårefremkaldende. Derefter stiger m/z 59 og 31, hvilket stammer fra propanal, som er et nedbrydningsprodukt fra tårefremkaldende. Derefter kommer lugtstofferne som er karakteristiske for løglugt, specielt propanthiol, som fragmenterer og giver m/z 41, 43 og 39 ud over en mindre andel af protoneret propanthiol, m/z 77.



Figur 8. Væggelus, der er næsten færdig med at suge blod [8]. Forsøgsopstillingen kan ses på videoen i ekstrapaterialet til artiklen i Plos One [8], hvor videooptagelser af parringsaktiviteter sammenholdes med PTR-MS-signaler.

Arbejdet har bl.a. været støttet af Det Strategiske Forskningsråd (Sagsnr. 09-065200), Styrelsen for Forskning og Innovation og Aarhus Universitets Forskningsfond.

E-mail

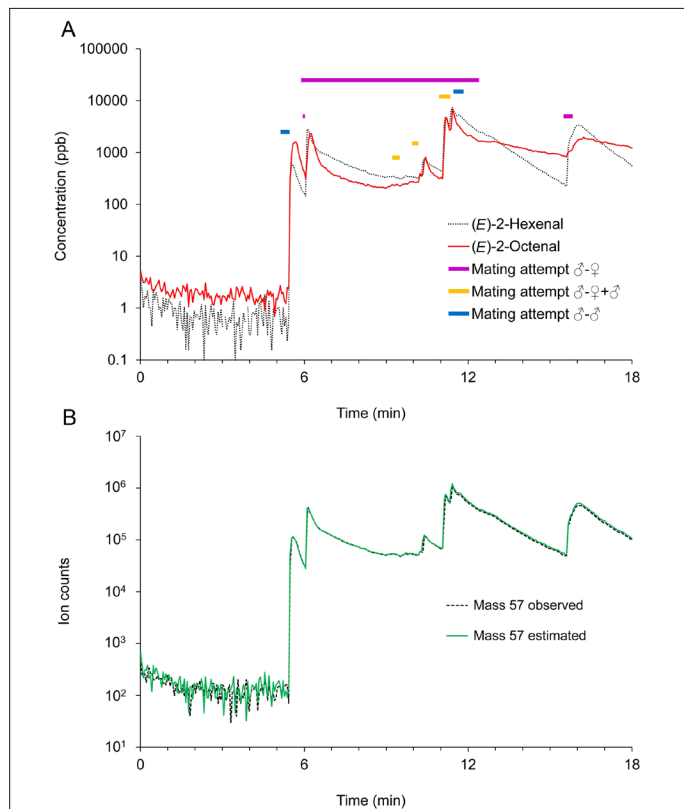
Mette Marie Løkke: MetteM.Loekke@agrsci.dk

Anders Feilberg: Anders.Feilberg@agrsci.dk

Dezhao Liu: Dezhao.Liu@agrsci.dk

Michael J. Hansen: MichaelJ.Hansen@agrsci.dk

Anders Peter S. Adamsen: Anders.Adamsen@agrsci.dk



Figur 9. Eksempel på emission af aldehyder målt med PTR-MS og væggelusenes adfærd observeret i den samtidige videooptagelse [8].

Referencer:

1. Feilberg, A.; Liu, D.Z.; Adamsen, A.P.S.; Hansen, M.J.; Jonassen, K.E.N. Odorant emissions from intensive pig production measured by online proton-transfer-reaction mass spectrometry. *Environ. Sci. Technol.* **2010**, *44*, 5894-5900.
2. Blake, R.S.; Monks, P.S.; Ellis, A.M. Proton-Transfer Reaction Mass Spectrometry. *Chem. Rev.* **2009**, *109*, 861-896.
3. Hansen, M.J.; Adamsen, A.P.S.; Pedersen, P.; Feilberg, A. Prediction of odor from pig production based on chemical odorants. *J. Environ. Qual.* **2012**, *41*, 436-443.
4. Hansen, M.J.; Liu, D.Z.; Guldberg, L.B.; Feilberg, A. Application of Proton-Transfer-Reaction Mass Spectrometry to the assessment of odorant removal in a biological air cleaner for pig production. *J. Agric. Food Chem.* **2012**, *60*, 2599-2606.
5. Pedersen, C.L.; Liu, D.; Hansen, M.J.; Feilberg, A.; Jensen, L.H.S.; Guldberg, L.B.; Schramm, A.; Nielsen, L.P. Hydrogen sulfide oxidation in a air-treating biofilter. Poster præsenteret på 14th International Symposium on Microbial Ecology, 19.-24. august 2012 i København.
6. Liu, D.; Andreasen, R.R.; Poulsen, T.G.; Feilberg, A. Experimental determination of mass transfer coefficients of volatile sulfur odorants in biofilter media measured by Proton-Transfer-Reaction Mass Spectrometry (PTR-MS). *Chem. Eng. J.*, Accepteret.
7. Løkke, M.M.; Edelenbos, M.; Larsen, E.; Feilberg, A. Investigation of volatiles emitted from freshly cut onions (*Allium cepa* L.) by real time proton-transfer reaction-mass spectrometry (PTR-MS). *Sensors*. **2012**, *12*, 16060-16076.
8. Kilpinen, O.; Liu, D.; Adamsen, A.P. Real-time measurement of volatile chemicals released by bed bugs during mating activities. *Plos One*. **2012**, *7*, e50981.

SKANLAB

www.retsch.dk
birte@skanlab.com

Retsch
Solutions in Milling & Sieving



I 2020 skal 50% af danskernes elforbrug komme fra vindenergi.

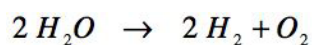
Nytænkning i brændselscellemembraner

Brændselscellen blev alment kendt som vandgenererende kraftværk i 1960'ernes rumprogrammer. I dag er den en vigtig brik i energipuslespillet, og udviklingen fortsætter – bl.a. gennem arkitektonisk nytænkning af dens hjerte: en polymermembran.

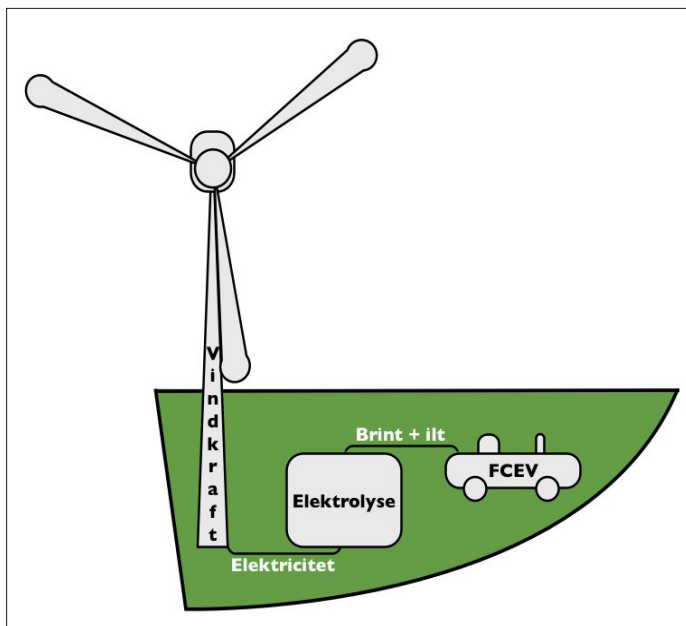
Af Mads Møller Nielsen, Katja Jankova, Søren Hvilsted, Dansk Polymercenter, DTU Kemiteknik

Når Danmarks regering har indgået en energiaftale, hvor rundt regnet 35% af nationens energibehov skal dækkes gennem vedvarende energi og 50% af elektricitetsforbruget skal komme fra vindenergi i 2020 (mod 23% i 2012), så har det afgørende betydning, at den strøm, der genereres på tidspunkter af døgnet eller året, hvor vi ikke har behov for den, ikke går til spilde [1]. En løsning på dette problem er, at overskydende energi bruges

til at drive elektrolyse af vand som derved spaltes i sine grundkomponenter brint (H_2) og ilt (O_2):



Disse to gasser udgør tilsammen reagenserne - brændstoffet som man vil sige i denne sammenhæng - til den type brændselsceller (PEMFC = *proton exchange membrane fuel cell*) man anvender i elbiler (FCEV = *fuel cell electric vehicle*). Elbiler er i disse år genstand for megen fokus grundet minimal lokal forurening og reducerede støjgener. Dertil kommer, at brint,

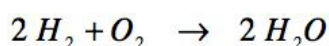


Figur 1. Overskydende el fra vindenergi bruges til at elektrolysere vand til ilt og brint som tankes på brændselscelledrevne elbiler.

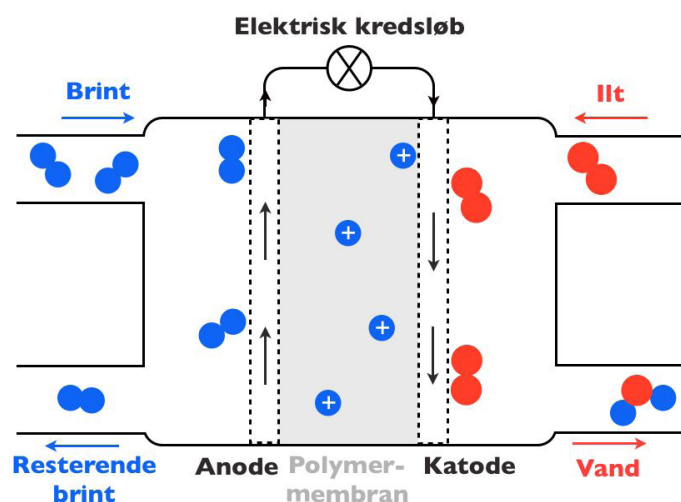
der ligesom metanol ligeledes kan bruges som brændstof, også fremstilles fra en anden energiresource i tidsånden: biomasse. Således skal potentialet i brændselscellen også ses ift. situationen i dag, hvor fossile brændsler er førstevalget i transportsektoren. Et stærkt fysiker-argument for brændselscellen er, at den – modsat forbrændingsmotoren – ikke er begrænset af Carnot-cyklussen, en model, der beskriver den maks. tilførte energi, som kan omdannes til arbejde i en varmekraftmaskine (i det ideelle tilfælde). Således kan man med en brændselscelle opnå langt mindre energitab i omdannelsen fra kemisk energi til elektricitet [2].

Processen fra høst af vindkraft til FCEV-brændstof er skitseret i figur 1.

I PEMFC produceres strøm gennem det, der i princippet er den modsatrettede reaktion af den, der finder sted i elektrolysen, dvs. der dannes elektrisk strøm frem for at den forbruges:



Den elektrokemiske proces er vist skematisk i figur 2.



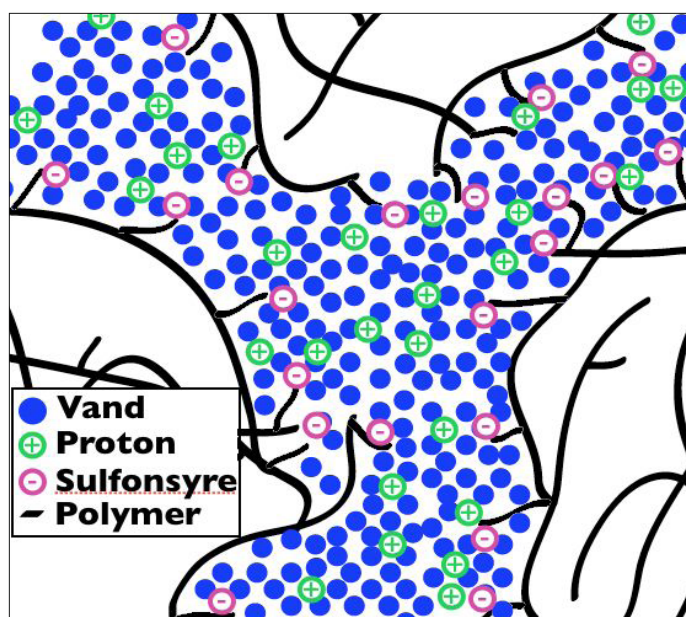
Figur 2. I en PEMFC spaltes brint i protoner og elektroner ved anoden, og mens protonerne bevæger sig gennem den protonledende polymermembran, løber elektronerne til katoden, hvor det eneste spildprodukt, vand, dannes.

■ Boks 1. Protonens vandring i membranen

Grotthuss-mekanismen: Protoner bevæger sig fra syregruppe til syregruppe - ligesom en spand med vand skifter hænder mellem mennesker på række, som forsøger at slukke en ildebrand.

Fartøjsmekanismen: Protoner bundet til vandmolekyler transporteres uafhængigt af syregrupperne gennem membranen.

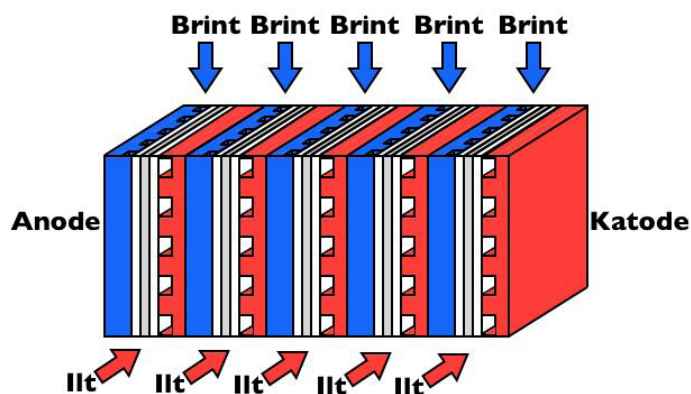
Brint tilføres anoden (den negative elektrode), hvor den spaltes i protoner og elektroner. Protonerne bevæger sig gennem vandkanaler (figur 3) fra den ene side af en avanceret polymermembran til den anden [3] (ordet "polymer" er græsk for "mange dele" og dækker det, at mange molekyler er bundet til hinanden i lange kæder; et eksempel herpå er plast). De forskellige mekanismer er beskrevet i boks 1. Elektronerne løber i et elektrisk kredsløb til katoden (den positive elektrode), hvor de sammen med protonerne og ilt danner det eneste spildprodukt: vand. Interessant nok var det en kombination af produkterne elektricitet og (drikke)vand, der fik NASA til at investere massivt i udviklingen af brændselsceller til Apollo-ekspeditionerne i anden halvdel af sidste århundrede.



Figur 3. Protonerne bevæger sig over polymermembranen gennem vandkanaler, så det er vigtigt at opnå den rigtige balance mellem vandskyende og -elskende grupper.

Polymermembran og elektrodemateriale presses typisk sammen til én komponent (MEA = *membrane electrode assembly*). Sammen med endepladerne, der, via de til formålet designede kanaler, bringer ilt og brint i kontakt med MEA'en, udgør de en enkeltcelle. En enkeltcelle producerer 0,5-1,0 V, så for at opnå den større kapacitet, der skal til for at flytte eksempelvis en bil, bliver adskillige enkeltceller arrangeret i stakke i serie (figur 4, side 20).

Selvom PEMFC nu er nået til et punkt, hvor de er kommercielt tilgængelige, så står man stadig overfor nogle udfordringer, før de kan blive konkurrencedygtige ift. forbrændingsmotorer. F.eks. er der flere fordele ved at drive brændselscellen ved højere temperaturer, og desuden spiller levetid og pris vigtige roller. Forskning i membranen er her et vigtigt punkt, da den er med til at afgøre, under hvilke omstændigheder brændselscellen kan virke.



Figur 4. Brændselsceller stakkes i serie for at opnå tilstrækkeligt store kapaciteter.

Membrandesign

For at en polymermembran kan bruges som PEM, skal den leve op til visse krav (boks 2). Bl.a. skal den kunne klare de betingelser, som brændselscellen drives under, uden at dekomponere. Den skal have en kemisk og fysisk formulering, som muliggør protonledning, og så skal den virke som barriere for reagensgasser samt elektroner. Et eksempel på en *state-of-the-art* PEM er den perfluorerede og sulfonsyre-funktionaliserede (-SO₃H) Nafion® (figur 5). Den længste sammenhængende kæde (*backbonet*) er her særdeles vandskyende (hydrofob) og klarer temperaturer på over 100°C, hvor vand som bekendt antager gasform og bliver til damp. PEMFC som virker i et vandigt miljø bliver af denne årsag typisk drevet ved 80°C. Der findes imidlertid en version af PEMFC, som kan virke ved højere temperaturer. I den er sulfonsyre erstattet med fosforsyre (-PO(OH)₂) som protonledende gruppe, og fosforsyre (H₃PO₄) erstatter vand i ionkanalerne.

Boks 2. Krav til PEM

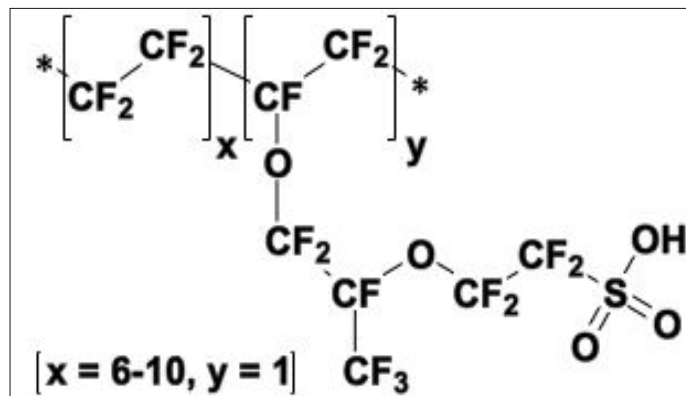
Protonledningsevne. Syregrupper inkorporeres, f.eks. sulfonsyre. Dannelsen af vandholdige ionkanaler er afgørende for protonledningsevnen.

Kemisk, mekanisk og termisk stabilitet. *Backbonet* vælges, så det er vandskyende, kemisk stabilt og har en tilpas høj glasovergangstemperatur (herover mister polymeren sin karakteristiske struktur). Det er vigtigt, at membranen ikke ændrer sine dimensioner væsentligt i takt med forskelle i fugtighedsgrad og temperatur.

Gasigennemtrængelighed. Sikrer den kontrollerede cellereaktion.

Elektrisk isolering. De fleste polymerer er faktisk elektrisk isolerende.

Balancen mellem vandskyende og vandelskende (hydrofile) dele af polymeren er afgørende for, hvorvidt den ved membrandannelse viser sig at have sammenhængende ionkanaler, og hvorvidt den bevarer sin struktur, når den kommer i kontakt med vand. Det er med afsæt heri, at forskere over det meste af verden arbejder med målsætningen om, at finde frem til en kemisk struktur, som kan give forbedrede egenskaber ift. nutidens mest avancerede membraner. Dvs. holdbarhed, ydeevne og pris, hvor Nafion® og lignende strukturer kommer til kort [4]. Udviklingen af nye syntesemetoder gennem de senere år har bidraget med flere til rådighed stående arkitektoniske redskaber, så det er mere eller mindre kun fantasien (og kemien), der afgør, hvilke kemiske strukturer vi kan skabe.



Figur 5. Kemisk struktur af en benchmark PEM: Nafion®.

Boks 3. Nytænkning



MAProCon (*New Macromolecular Architectures and Functions for Proton Conducting Fuel Cell Membranes*) er et samarbejdsprojekt mellem Danmarks Tekniske Universitet, Syddansk Universitet, Lunds Universitet og Teknologisk Institut (overdraget midtvejs fra IRD A/S). Målsætningen er at bidrage til brændselscellemembranforskningen gennem fremstilling af nytænkende polymerstrukturer. Projektet er fireårigt og løber indtil marts 2013. Senere på foråret vil højdepunkter fra forskningssamarbejdet blive præsenteret på et symposium i IDA Huset.

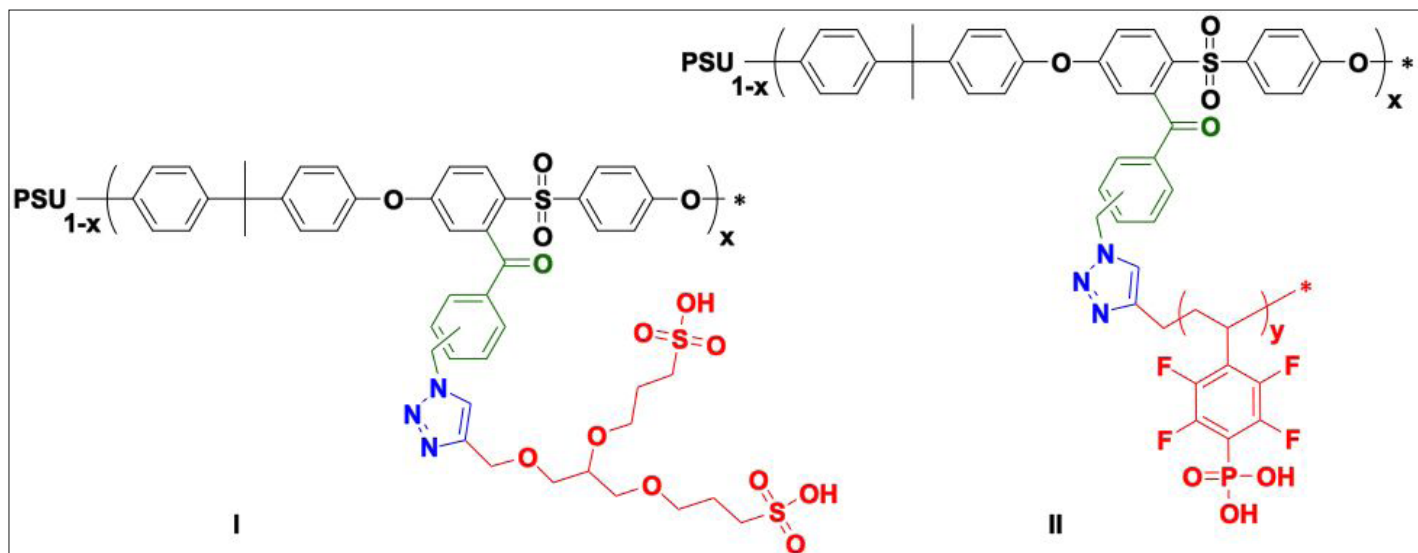
Gennem MAProCon benytter vi forskellige tilgange til polymerarkitektur i nytænkningen af membranen i PEMFC. En af de strategier, vi har fulgt, er at benytte en kommercielt tilgængelig polysulfon som *backbone*, idet den tidligere har vist sig at have god kemisk og termisk stabilitet ud over at være velegnet til membrandannelse (den sorte struktur i figur 6) [5]. Vha. "click"-kemi og atom transfer radikal polymerisering (ATRP)

Boks 4. Kemisk værktøjskasse

"Click"-kemi: Meget effektiv reaktion mellem funktionelle molekyler og polymerer. Gennem design af de enkelte byggeblokke udvides horisonten for membranarkitekturen betragteligt. Vi har her benyttet den kobberkatalyserede azid-alkyn-cykloaddition, der resulterer i en substitueret 1,2,3-triazol [7] (R angiver en vilkårlig restdel af molekylet):



Atom transfer radikal polymerisering (ATRP): Polymeriseringsreaktion der muliggør en høj grad af kontrol over nøgleegenskaber som funktionalitet, arkitektur og kædelængde [8].



Figur 6. Produkter fremstillet gennem modificering (grøn), ATRP (kun II) og "click"-kemi.

(boks 4) modificeres polysulfonen til enten at få fleksible strukturer med parvist placerede sulfonsyregrupper eller længere delvist fluorerede sidekæder med fosfonsyre som protonledende gruppe (hhv. I og II i figur 6) [6]. Idéen med at benytte sidekæder med to sulfonsyregrupper er opstået ud fra forventningen om, at en højere lokal koncentration af protonledende grupper kan lede til forbedrede ionkanaler. Tilgangen med fosfonsyre-funktionaliseret delvist fluoreret polymer er med henblik på PEMFC drevet ved temperaturer over 100°C, hvor altså fosforsyre og ikke vand bidrager til protontransporten.

Uden nogen form for optimering af materialerne er der opnået lovende protonledningsevner for begge de nye membraner (se også "Click" i polymerer I i september-nummeret [9]). Sandsynligvis kan begge strukturer optimeres yderligere, hvilket vi arbejder på nu. Det bliver spændende at se, om det så bliver på bekostning af andre afgørende egenskaber. Laboratoriarbejde fordrer ofte kompromiser.

Selvom tanken muligvis er let drejet til lejligheden, så er det sjovt at tænke på, hvor lang vejen har været, fra da Neil Armstrong med brændselsceller i sin rumrak satte kursen mod Månen, til vi i dag kan sætte kursen mod arbejde i en brændselscelledrevet bil. Sådan er forskning. Men vi kommer frem.

E-mail

Mads Møller Nielsen: mon@kt.dtu.dk

Søren Hvilsted: sh@kt.dtu.dk

Referencer:

1. http://www.ens.dk/da-DK/UndergrundOgForsyning/VedvarendeEnergi/Vindkraft/Fakta/Noegletal_statistik/Sider/Forside.aspx, 10.09.12.
2. M. Winter, R. J. Brodd (2004), What are batteries, fuel cells, and supercapacitors?, Chemical Reviews 104: 4245-4269.
3. K.-D. Kreuer, S. J. Paddison, E. Spohr, M. Schuster (2004), Transport in proton conductors for fuel-cell applications: simulations, elementary reactions, and phenomenology, Chemical Reviews 104: 4637-4678.
4. S. J. Osborn, M. K. Hassan, G. M. Divoux, D. W. Rhoades, K. A. Mauritz, R. B. Moore (2007), Glass transition temperature of perfluorosulfonic acid ionomers, Macromolecules 40: 3886-3890.
5. O. Savadogo (2004), Emerging membranes for electrochemical systems, Journal of Power Sources 127: 135-161.
6. I. Dimitrov, S. Takamuku, K. Jankova, P. Jannasch, S. Hvilsted (2012), Polysulfone functionalized with phosphonated poly(pentafluorostyrene) grafts for potential fuel cell applications, Macromolecular Rapid Communications 33: 1368-1374.
7. S. Hvilsted (2012), Facile design of biomaterials by "click" chemistry, Polymer International 61: 485-494.
8. K. Matyjaszewski, J. Xia (2001), Atom transfer radical polymerization, Chemical Reviews 101: 2921-2990.
9. S. Hvilsted (2012), "Click" i polymerer I, Dansk Kemi 93 (9): 44-46.

Nyt om ...

... Frit difluor F_2 i naturen

Fluor, det mest elektronegative grundstof, har hidtil været antaget ikke at findes frit i naturen, da det straks ville reagere med alt. Det er nu blevet påvist, at det findes indesluttet i mineralet antozonit, der er en form af fluorit eller flussspat CaF_2 . Antozonit er også blevet kaldt stinkspat eller stinkende fluorit pga. en ubehagelig lugt, der fremkommer, når man knuser mineralet. Der har været mange forslag til, hvad lugten kunne skyldes: - der har været foreslået ozon og forskellige forbindelser af phosphor, arsen, svovl og selen. Henri Moissan der var den første, der fremstillede elementært fluor, foreslog allerede i 1891, at lugten skyldtes fluor; men først nu er det lykkedes at bevise dette.

Man har nu undersøgt antozonit med faststof-NMR og har iagttaget et højt opløst spektrum af ^{19}F , som svarer til spektret af

F_2 . Man har ud fra spektret kunne udelukke andre oxiderende fluorforbindelser. Og man har ud fra NMR-spektret beregnet, at antozoniten indeholder ca. 0,4 mg F_2 pr. gram mineral. Man har sammenlignet lugten af det knuste mineral med lugten af autentisk F_2 og konkluderer, at de to entydigt har samme lugt.

Nu melder spørgsmålet sig, hvor F_2 kommer fra. Rent CaF_2 er farveløst; bestråles det imidlertid med γ eller γ stråling bliver det mørkt violet, og antozonit er blåt/violet. Der findes uran og thorium i antozonit; man forestiller sig, at det er strålingen fra spaltningen af ^{238}U og ^{235}U samt γ stråling fra deres henfaldsprodukter ^{234}Th , ^{214}Pb , ^{214}Bi , ^{210}Pb , og ^{210}Bi , der spalter CaF_2 og giver anledning til dannelse af F_2 .

Carl Th.

Occurrence of Difluorine F_2 in Nature – In Situ Proof and Quantification by NMR Spectroscopy, *Angewandte Chemie International Edition* 51, 2012, side 7847.

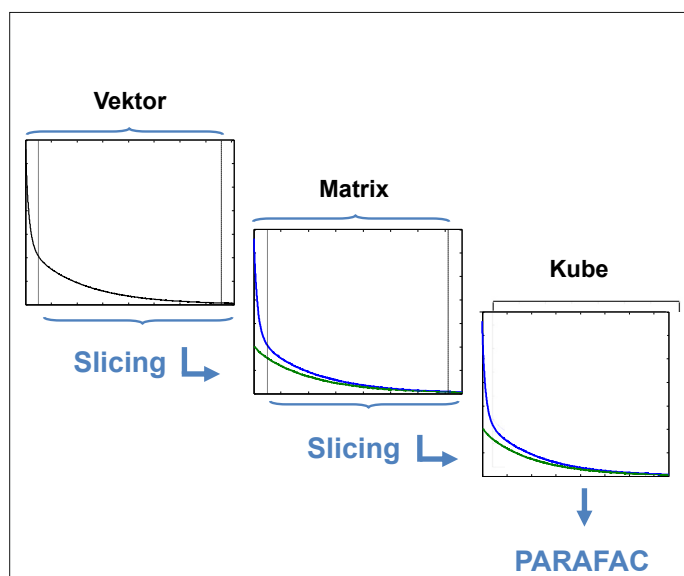
Multiekspontientiel analyse: CuSO₄, relaxometri og multivejskemometri

Multivejs kemometriske modeller kan bruges til unikt at resolve multi-eksponentielle relaxationsprofiler i underliggende rene eksponentielle profiler. Metoden benytter sig af redundant information, og tricket hedder: slicing igen-igen.

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

Multiekspontientiel analyse er et klassisk analytisk problem. Overlappende eksponentielle fænomener er almindeligt forekommende indenfor forskellige videnskabelige discipliner såsom dynamiske biokemiske reaktioner og relaxometriske målinger. Der er derfor fokus på robuste og effektive løsninger på dette ikke-lineære problem. I denne foreløbig sidste klumme omhandlende multivejskemometri vil vi vise, at multivejskemometri, blandt mange andre anvendelser, også kan bidrage med en effektiv alternativ løsning til resolvering af det multiekspontientielle problem. Der er ikke tale om en klassisk kemometrisk anvendelse, hvor signaler fra flere prøver behandles samtidig, men om en højst overraskende anvendelse til signalbehandling af en enkelt multiekspontientiel profil.

Tricket er en opgradering af den multiekspontientielle profil til en datakubed ved brug af en operation, som hedder dobbelt-slicing, deraf navnet på algoritmen: DOUBLESLICING [1]. Ideen bag DOUBLESLICING er at slice den eksponentielle profil to gange og derved generere en trevejs datakubed, som kan analyseres ved brug af multivejs kemometriske modeller. Slicing-ideen blev præsenteret af Windig og Antalek på KODAK-laboratorierne [2]. Figur 1 viser princippet bag DOUBLESLICING. Ved den første slicing-operation (translation langs tidsaksen) skabes et antal pseudoprofiler, som alle har de samme underliggende eksponential profiler, men forskudt i tid. Det er altså samme profil, der gentages, men forskudt. Den ene profil bliver derved til en matrix af profiler, som hver repræsenterer forskudte tidsafsnit. Ved den anden slicing-operation gentages processen langs kolonneretningen, og dette resulterer i en trevejs datastruktur. Denne preprocessing kan synes som en unødvendig kompliceret proces med stærkt redundant information, men den har til formål at skabe en trevejs datastruktur fra en enkelt multiekspontientiel profil. Man kan vise, at denne trevejsstruktur vil følge en PARAFAC-model, og man kan derved benytte den til at løse det diskrete multiekspontientielle problem. Fordelene ved at benytte multivejskemometri er, at løsningen, givet ved PARAFAC i modsætning til



Figur 1. Princippet bag DOUBLESLICING. Det transverse NMR-signal optaget som funktion af tiden er en éndimensional datastruktur (en vektor), som indeholder en sum af N eksponentielle henfald svarende til N forskellige vandpopulationer. Kurven inddeles i et antal (to er vist) af stærkt overlappende segmenter (X-slices) ved at fjerne det samme antal af de første eller sidste punkter. De to segmenter placeres i en matrix (tovejs datastruktur), hvorefter proceduren gentages for at danne Z-slices, som kan stables efter hinanden for at danne en trevejs datastruktur. Disse data kan herefter dekomponeres vha. PARAFAC.

multiekspontientiel kurvefitning, bliver unik og lynhurtig under forudsætning af, at der er tale om et lavrangs (få komponenter) multiekspontientielt system.

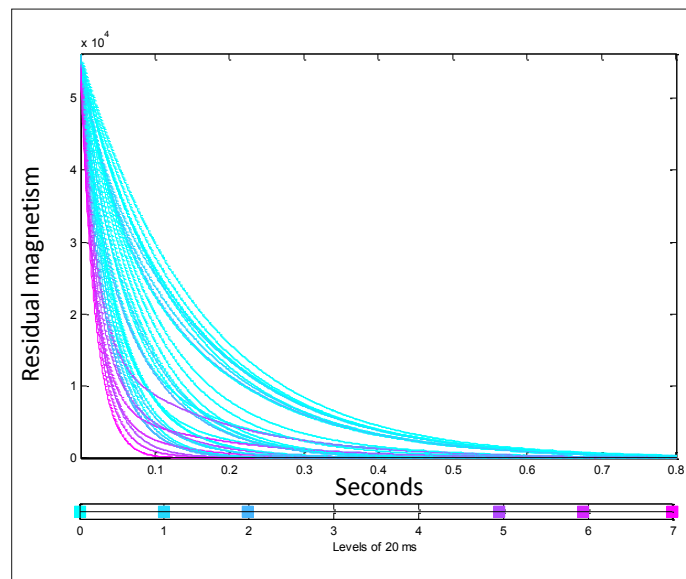
Vi vil i denne klumme demonstrere algoritmen til brug for multiekspontientielle profiler målt med et benchtop kernemagnetisk resonans (NMR) instrument også kaldet NMR-relaxometri. Denne type målinger er udbredt indenfor fødevareforskningen, hvor de bl.a. bruges til at bestemme "solid fat" i spiseolier, hvor profilen deles op i en hurtigt relaxerende del (fast fedt) og en langsomt relaxerende del (flydende fedt).

Sample no.	1 ($T_2 = 19.6\text{ms}$)	2 ($T_2 = 40.6\text{ms}$)	3 ($T_2 = 81.4\text{ms}$)	4 ($T_2 = 159.4\text{ms}$)	Sample label
1	0	0	0	7	0007
2	1	0	1	5	1015
3	0	6	0	1	0601
4	1	0	6	0	1060
5	1	6	0	0	1600
6	0	0	6	1	0061
7	0	2	0	5	0205
8	2	5	0	0	2500
9	0	5	2	0	0520
10	0	0	7	0	0070
11	0	6	1	0	0610
12	0	5	0	2	0502
13	0	0	2	5	0025
14	6	0	1	0	6010
15	0	0	5	2	0052
16	0	1	0	6	0106
17	0	2	5	0	0250
18	1	5	1	0	1510
19	1	0	0	6	1006
20	2	0	5	0	2050
21	6	1	0	0	6100
22	0	0	1	6	0016
23	5	2	0	0	5200
24	7	0	0	0	7000
25	6	0	0	1	6001
26	0	7	0	0	0700
27	5	0	2	0	5020
28	0	2	0	5	0205
29	0	1	6	0	0160
30	5	0	0	2	5002



Figur 2. Det eksperimentelle design. Koncentrationen af de 30 prøver er i enhederne 1–7, hvor hver enhed repræsenterer en syvendedel af prøvevolumet. Prøverne er mærket iht. deres koncentration.

For at kunne illustrere den nye algoritmes effektivitet har vi designet et prøvesæt, som eliminerer vekselvirkninger mellem de forskellige eksponentielle komponenter. NMR er baseret på diamagnetisme, men det er velkendt, at tilstedeværelse af paramagnetiske kerner vil quenche NMR-signalerne. Tilsætning af forskellige koncentrationer af CuSO_4 til vand kan således designes til en given tilsyneladende T_2 -relaxation. Vi har til formålet lavet fire moderopløsninger med forskellige CuSO_4 -koncentrationer på hhv. 55, 26, 13, og 6.5 mM. Det svarer til tilsyneladende transverse T_2 -relaxationstider på 20, 40, 80 og 160 ms. Mono-eksponentiel kurvefitning af de målte relaxationsprofiler for de fire moderopløsninger resulterede i følgende T_2 -værdier: 19.6, 40.6, 81.4, and 159.4 ms.



Figur 3. De 30 relaxationsprofiler farvet efter deres indhold af den hurtigst relaxerende komponent (20 ms).

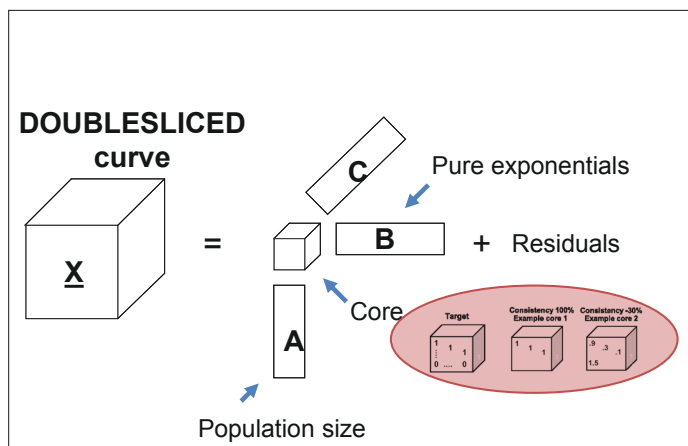
Vha. de fire moderopløsninger har vi konstrueret et 4-komponent (D-optimal) design med syv koncentrationsniveauer. Designet på i alt 30 prøver blev etableret ved at placere syv små NMR-rør (5mm) fyldt med de fire moderopløsninger indeni i et 18mm NMR-rør (figur 2). Koncentrationsværdier, som svarer til antallet af de små rør med en given moderopløsning (værdier fra 1 til 7), er vist i figur 2. Hver enhed svarer til en syvendedel af det totale NMR-volumen. Skemaet (figur 2) angiver, hvor mange af hver af de fire moderopløsninger, der er til stede ved en given måling (i prøve nummer 1 er alle de små NMR-rør fyldt med moderopløsning 4). Ved at bruge dette eksperimentelle design er det muligt at kontrollere det eksakte bidrag fra hver af relaxationskomponenterne til det totale NMR-signal samtidig med, at vi kan undgå vekselvirkninger, som typisk forekommer, når koncentrationerne varieres. Man skal dog være opmærksom på, at opdeling af NMR-røret i mindre rum kan føre til artefakter, som stammer fra mellemrummene mellem de små NMR-rør (NMR susceptibility). Desuden kan der opstå mindre artefakter, pga. at forskellige dele af den samme prøve kan opleve en smule anderledes magnetisk felt.

For hver af de 30 prøver målt det transverse relaxations-signal af vandkomponenten vha. en CPMG (Carr-Purcell-Meiboom-Gill) pulssekvens (figur 3). Dette unikke datasæt er tilgængeligt i MATLAB-format fra www.models.life.ku.dk sammen med MATLAB-koden til DOUBLES LICING.

De resulterede 30 NMR-relaxationsprofiler er vist i figur 3, hvor de er farvet efter deres indhold af den hurtigst relaxerende komponent (20 ms). Figur 5, side 24 viser dispersionen af de

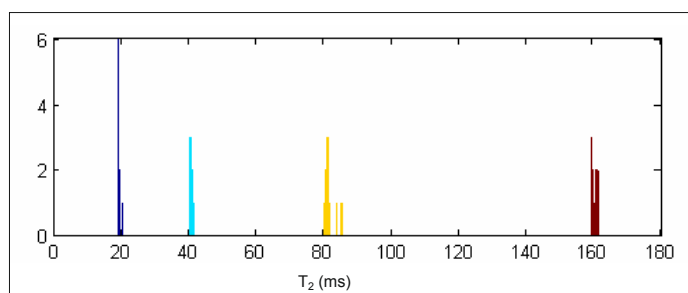
ekstraherede T_2 -værdier ved applikation af DOUBLES LICING. Algoritmen (se skitse i figur 4) har ingen problemer med at ekstrahere de fire underliggende rene eksponentielle komponenter fra disse relativt komplekse NMR-henfaldscurver.

Vi har gennemført en række test af DOUBLES LICING, og den viser sig i det store hele at give nogenlunde de samme resultater som en effektiv klassisk kurvefitningsalgoritme. På to afgørende punkter er der imidlertid en forskel.



Figur 4. PARAFAC- modellen som den benyttes i DOUBLES LICING. Den dobbelt-slicede relaxationskurve resolveres til rene mono-eksponentielle komponenter og deres tilsvarende koncentrationer.

For det første er DOUBLES LICING ikke-iterativ, da den har en analytisk løsning og er for disse data minimum en faktor fire hurtigere i beregningstid. Den hurtigere beregningstid giver DOUBLES LICING et stort potentiale indenfor applikationer, hvor mange oligo-eksponentialfunktioner skal analyseres eller i andre tilfælde, hvor omfattende resampling er nødvendig for et sikkert analyseresultat. Den lynhurtige DOUBLES LICING kan også benyttes som et superkvalificeret begyndelsessgæt for en traditionel numerisk kurvefitningsalgoritme, og indenfor Magnetic Resonance Imaging (MRI) kan DOUBLES LICING finde anvendelse som matematisk kontrast af MRI-billeder [3].

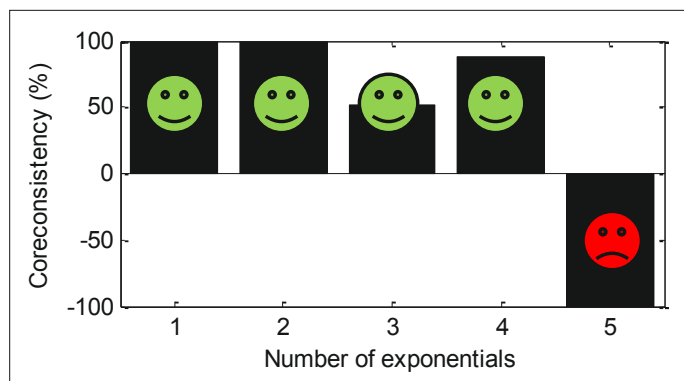


Figur 5. Dispersion af T_2 -værdier fundet ved brug af DOUBLES LICING. Vi ser, at der for de 30 prøver er en overordentlig fin opløsning af de fire underliggende T_2 -komponenter ved hhv. 20, 40, 80 og 160 ms.

For det andet giver brugen af multivejskemometri til analyse af multieksponentielle kurver nogle gode diagnostiske redskaber. Et af hovedproblemerne ved anvendelse af traditionel kurvefitning er at estimere antallet af komponenter. Dette foretages som regel ved at undersøge RMSE (root mean square error) for kurvefittet som en funktion af antallet af komponenter. Men ofte er det subtile forskelle, der afgør, om man skal bruge to eller tre komponenter på trods af, at de resulterende modeller kan være væsentligt forskellige. Ved brug af DOUBLES LICING kan man anvende diverse diagnostiske redskaber som f.eks.

den såkaldte core consistency (figur 6), der samlet kan give et bedre fingerpeg om, hvor mange komponenter der er passende [4]. Normalt ses kun to- eller trekomponent-løsninger indenfor NMR-relaxometry, men som figur 6 antyder, er dette formentlig et firekomponent-system.

Brugen af DOUBLES LICING til multieksponentiel analyse giver således en væsentlig bedre diagnosticering med hensyn til det vigtige valg af antallet af komponenter.



Figur 6. Eksempel på evaluering af PARAFAC core-consistency for en firekomponents-blanding. Værdier tæt på eller under nul, antyder, at for mange komponenter er brugt. Eksemplet viser, at en firekomponents PARAFAC-model beskriver data godt.

Outro

Multivejskemometri kan på overraskende vis bidrage med en ny vinkel på multi-eksponentiel analyse. DOUBLES LICING har vist sig at være tilstrækkeligt nøjagtig til at estimere relaxationstider (T_2 -værdier) og deres relaterede koncentrationer. Hovedfordelen ved DOUBLES LICING er imidlertid dens meget kortere beregningstider sammenlignet med de traditionelle kurvefitningsalgoritmer, samt de forbedrede muligheder for det kritiske valg af antal af eksponentialkomponenter i en given profil.

E-mail

Søren Balling Engelsen: se@life.ku.dk

Rasmus Bro: rb@life.ku.dk

Lars Nørgaard: lno@foss.dk

Referencer

1. L. Andrade, E. Micklander, I.A. Farhat, R. Bro & S.B. Engelsen, DoubleSlicing: a non-iterative single profile multi-exponential curve resolution procedure. Application to time-domain NMR transverse relaxation data, *Journal of Magnetic Resonance* (2007), **189**(2), 286-292.
2. W. Windig and B. Antalek, Direct exponential curve resolution algorithm (DECRA): A novel application of the generalized rank annihilation method for a single spectral mixture data set with exponentially decaying contribution profiles, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* (1997) **37**, 241-254.
3. H.F. Seefeldt, F. van den Berg, W. Köckenberger, S.B. Engelsen and B. Wollenweber, Water mobility in the endosperm of high beta-glucan barley mutants as studied by Nuclear Magnetic Resonance Imaging, *Magnetic Resonance Imaging* (2007), **25**(3), 425-432.
4. R. Bro and H.A.L. Kiers, A new efficient method for determining the number of components in PARAFAC models, *Journal of Chemometrics*, **17**(5), 274-286.

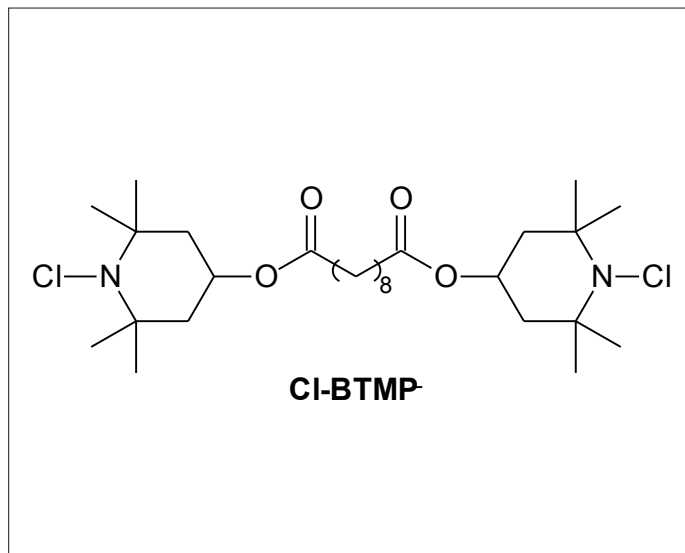
Nyt om ...

... Antimikrobielle tekstiler

Man har mange steder i medicinen brug for tekstiler, der har en antimikrobiel virkning, f.eks. ansigtsmasker. Man fremstiller normalt disse ved at imprægnere almindelige tekstiler med et antimikrobielt stof. Det er imidlertid vanskeligt at få det antimikrobielle stof jævnt fordelt på denne måde. Man har nu udviklet en metode, hvor man fremstiller en antimikrobiel polymer ved først at opløse en polymer, celluloseacetat, og et *N*-chloramin-antimikrobielt stof Cl-BTMP i hvert sit opløsningsmiddel og så ved en electrospinning-metode laver nanofibre heraf.

Carl Th.

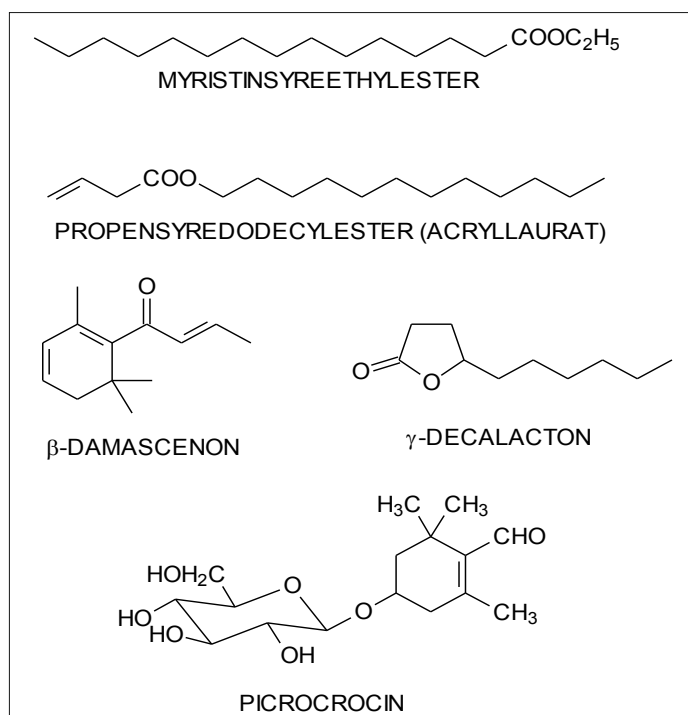
Electrospun Composite Nanofiber Fabrics Containing Uniformly Dispersed Antimicrobial Agents *Applied Materials & Interfaces* **2**, 2010 side 952.



Nyt om ...

... Champagne – Hvad betyder boblerne

Der er jo ingen tvivl om, at det specielle ved champagne og andre "sparkling wines" er boblerne. Der er nu lavet nogle dybtgående undersøgelser af boblernes betydning, både for smagen, mundfølelsen og lugten af champagnen. Ud over at boblerne registreres af følereceptorer i munden, har vi også specielle CO₂-smertereceptorer. Der er udviklet en række forfinede fototeknikker til at studere udviklingen af boblerne i glasset og gaskromatografiske metoder til at studere sammensætningen af luften over champagnen. Man har hermed konstateret, at der i luften over findes en række tungtflygtige stoffer som ethylmyristat, acryllaurat, β-damascenon, γ-decalacton og picrocrocin (safranets aromastof) for at nævne nogle af de mange, der



bidrager til opfattelsen af champagnens aroma. Disse rives med op i luften som en aerosol, når boblerne brister på overfladen. Man har konstateret en større koncentration i et konisk glas "en flûte" end i et fladt.

Carl Th.

Raising a glass to champagne, *Chemistry World*, Juni 2012, side 42; Unraveling different chemical fingerprints between a champagne wine and its aerosols, *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* **106** (39) side 16545; Monitoring Gaseous CO₂ and Ethanol above Champagne Glasses: Flute versus Coupe, and the Role of Temperature, *PLOS one* Februar 2012, DOI/10.1371/journal.pone.0030628.

Massespektrometer til fermentering og cellekultur

Thermo Scientific Prima PRO proces massespektrometer anvendes tit som en central analyzer til online-måling og styring af fermentere. Måleprincippet er et magnetisk sektor massespektrometer, hvor en magnet afbøjer en stråle af positivt ladede ioner, så kun ioner med den rette masse kommer frem til detektor. Prima PRO er designet til at styre en produktion og kan anvendes til mange processer, som katalytisk forskning, kemisk industri, raffinaderier, petrokemisk industri, stålværker, biobrændstoffer og fermentering. Det benyttes også tit på laboratorier, som nyder godt af langtidsstabiliteten, den høje nøjagtighed og de lave detektionsgrænser.

Hjertet i Prima PRO er et lamineret scannende magnetisk sektor massefilter, som giver et signal i form af peak's med flad top. Højden på peak'en er koncentrationen af den aktuelle masse. Den flade top gør, at man kan nøjes med månedlige autokalibreringer. Signalet er også særdeles velegnet til at adskille selv komplekse blandinger i individuelle målinger af koncentrationen.

Til fermentering tilsluttes fra 1 og op til 30 eller 62 fermentere til en RMS (Rapid Multi-stream Sampler), som med en roterende arm lukker den rette gasstrøm ind i massespektrometret. De andre gasstrømme ledes til et fælles dræn, så der altid måles på frisk gas.

Gassen fra en fermenter har interessant information om cellerne, hvor der typisk måles O_2 , CO_2 og flygtige metabolitter. Prima PRO måler også N_2 og argon, som anvendes til at kompensere for forskel i flow af gas ind og ud af fermenteren. Luft til beluftning er tør luft, mens offgas efter fermenteren indeholder fugt. Denne forskel i flow giver op til 10% unøjagtighed på de afledte parametre OUR (Oxygen Uptake Rate, iltforbrug), CER (CO_2 Evolution Rate, CO_2 -dannelse) og RQ (Respiratory Quotient). RQ er for-

holdet mellem CER og OUR og fortæller om cellernes metabolisme. En høj RQ kan indikere, at cellerne danner sprit, en RQ på 1 indikerer, at cellerne omdanner glukose til CO_2 , og en RQ under 1 indikerer, at cellerne omdanner et andet substrat til CO_2 .

Yderligere information:
Nordic Pharma & Analyzer Center
E-mail: bent@svanholm.com
Mobil: 26 18 58 11
www.svanholm.com



Prima PRO er hos DTU Systembiologi tilsluttet til 50 fermentere.

Automatiseret opkoncentrering af prøver

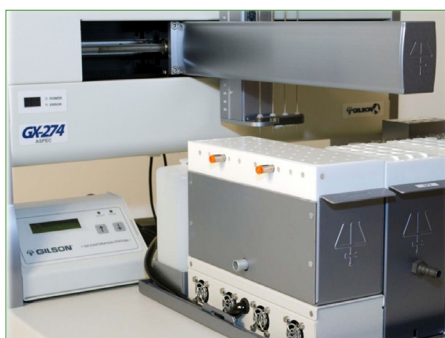
Biolab præsenterer fra Gilson, Inc. - GX Evaporation Station - en automatiseret og fuldt integreret løsning til prøveopkoncentrering. Den har et kompakt design og lav vedligeholdelse. Anvendt sammen med en Gilson ASPEC til automatiseret SPE, opnås der en ubrudt proces fra prøve til opkoncentreret og oprenset produkt. Systemet kontrolleres af Gilson Trilution software.

Specifikationer:

- Samtidig opkoncentrering af op til 40 prøver
- Passer på Gilson GX-27x series / XL-2xx / 215 / GX-281
- Acceptorer standard reagensglas

Funktioner:

- Indbygget lab-timer
- Integreret løsning
- Advanced Peltier-opvarmning reducerer vedligeholdelse



- Fordamper op til 40 prøver samtidig med fuld automatisering

Biolab A/S kan ud over denne løsning tilbyde en batch-automatiseret løsning med Genevac Ez2 sammen med Gilson ASPEC. Denne løsning er baseret på specielle rack, der let kan flyttes fra ASPEC direkte til Genevac Ez2, og derved spare tid.

Yderligere information:
Biolab A/S
Tlf. 86 21 28 66
E-mail: sales@biolab.dk

Multiparameter, ionselektive elektroder

AquaSense er nu leveringsdygtig i en ny generation af multiparameter, ionselektive elektroder fra S::CAN, som med stor pålidelighed kan måle flere vandkvalitetsparametre samtidig.

Ammono-lyser elektroden kan anvendes til løbende overvågning af pH, ammonium og nitrat i såvel drikkevand som spildevand og alt derimellem. Målingerne kan automatisk kompenseres for indhold af kalium, ligesom temperaturen kan følges kontinuerligt.

Elektroderne er kalibrerede fra fabrikken, langtidsstabile og forsynede med et trykluftrensesystem, som automatisk holder overfladen ren, selv under vanskelige driftsforhold. Elektroderne er umiddelbart klar til brug ved modtagelsen, og kan alt efter brugerens valg installeres direkte i vandstrømmen eller i en flowcelle ved en målestation. Elektroderne kan, når de ikke længere kan kalibreres, indsendes til regenerering. Dette kan gøres for elektroderne individuelt.

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



LAF-kørekort - din sikkerhed

Forkerte rutiner i et LAF-kabinet kan være årsag til kontaminering af prøver – eller at du sætter din og dine kollegers sikkerhed i spil.

Holm & Halby har i samarbejde med en række udvalgte brugere sammensat et seminar, der har til formål at kvalificerer kursisten til at arbejde sikkert i et sikkerhedskabinet.

Kurset bliver afholdt som en blanding af teori, film og praksis. Der bliver i forbindelse med kurset afholdt en afsluttende prøve, der er afgørende for udstedelse af et certifikat; LAF-kørekortet.

Kurset henvender sig til alle, der arbejder i LAF- og sikkerhedskabinetter. Der lægges især vægt på god praksis for, hvordan man arbejder korrekt uden at udsætte sig selv, omgivelserne eller sit produkt for kontaminering.

Seminaret omfatter desuden:

- Begrebsafklaring
- Gældende normer
- Typisk opbygning af sikkerhedskabinet
- Filter og flow
- Korrekte – og ukorrekte – arbejdsrutiner
- Ergonomi
- Rengøring og vedligeholdelse
- Gode råd

LAF kørekortet afholdes både som åbne kurser og som kursus på din virksomhed. Læs mere og tilmeld dig på vores hjemmeside www.seminarplan.dk

Yderligere information:
Holm & Halby
Tlf. 43 26 94 00
Direkte: 43 26 94 22
Mobil: 20 27 78 03
E-mail: pju@holm-halby.dk



Headset

Med SKC Face Level Sampling Headset sikres en korrekt prøveudtagning i ånde-drætszonen. Dertil er det komfortabelt, let og fleksibelt.

Der er mulighed for udtagning af parallelle prøver, f.eks. støv og gasser. Prøveudtagningen kan foretages under hjelm eller maske, hvilket gør headsettet særligt velegnet til svejserøgsmålinger. Ved anvendelse af udstyret bliver målingerne mere korrekte.

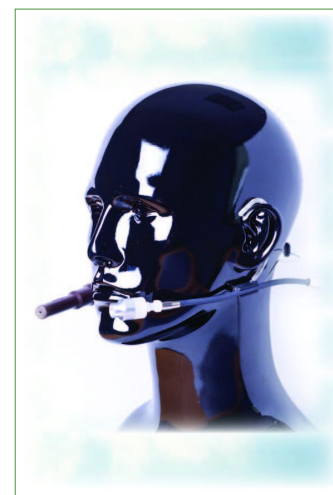
Udstyret er også velegnet til almindelig udtagning for inhalerbart og respirabelt støv, luftbårne metaller og gasser.

Sættet består af tre dele: Headset, rørholder og Mini sampler (filterholder) (købes separat).

- Face Level Sampling Headset 225-6200
- Mini Sampler – svejserøg 225-6201
- Tube-holder – 225-6220

Mikrolab Aarhus A/S er behjælpelig med at sammensætte en prøvetagningspakke, der passer til den aktuelle prøvetagningsopgave. Pakken indeholder pumpe, lader, headset, rørholder, filter og rør m.m.

Yderligere information:
Mikrolab Aarhus A/S
Tlf. 86 29 61 11
E-mail: ml@mikrolab.dk



Analyse

A

Akkrediteret pipette-kalibrering

Biolab A/S
Sindalsvej 29
8240 Risskov
Tlf. 86 21 28 66 - Fax 86 21 23 01
sales@biolab.dk
www.biolab.dk

Automatiserede laboratorieløsninger

Biolab A/S
Sindalsvej 29
8240 Risskov
Tlf. 86 21 28 66 - Fax 86 21 23 01
sales@biolab.dk
www.biolab.dk

B

Brugt analyse- og laboratieudstyr

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 laboratieudstyr,
nyt og brugt

E

Elektrokemiske systemer

Biolab A/S
Sindalsvej 29
8240 Risskov
Tlf. 86 21 28 66 - Fax 86 21 23 01
sales@biolab.dk
www.biolab.dk

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

G

Gasdetektorer



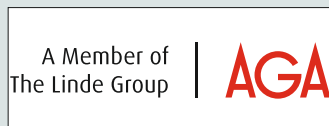
Dräger Safety Danmark A/S
Generatorvej 6 B
2730 Herlev
Tlf. 44 50 00 00 - Fax 44 50 00 01
draeger-safety.dk@draeger.com
www.draeger.dk

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

H

HPLC oprensningssystemer

Biolab A/S
Sindalsvej 29
8240 Risskov
Tlf. 86 21 28 66 - Fax 86 21 23 01
sales@biolab.dk
www.biolab.dk

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

LC-MS oprensning

Biolab A/S
Sindalsvej 29
8240 Risskov
Tlf. 86 21 28 66 - Fax 86 21 23 01
sales@biolab.dk
www.biolab.dk

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

Mikroskoper

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

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

O

Opvaskemaskiner



KEN A/S

Bøgebjergvej 60, Brobyværk
5672 Broby
Tlf. 62 63 10 91
www.ken.dk



Miele A/S PROFESSIONAL

Erhvervsvej 2
2600 Glostrup
Tlf. 43 27 11 00 - Fax 43 27 15 09
professional@miele.dk
www.miele.dk

Produktion

E

Etikettering

LSS Etikettering A/S

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

F

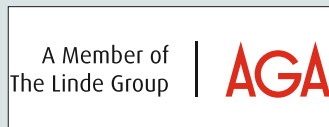
Faremærkning

pekema BarCom as

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

G

Gasser



AGA A/S

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

K

Kemikalier



WALBOM A/S

Amager Landevej 246
2770 Kastrup
Tlf. 32 46 11 60 - Fax 32 46 18 40
walbom@walbom.dk
www.walbom.dk
Leverandør af 3M Novec Kemi
og Specialprodukter

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 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 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

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!*

Priser på optagelse:

Pr. produkt: Kr. 232,-
Farvelogo: Kr. 220,-
Ekstra linjer: Kr. 60,-

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

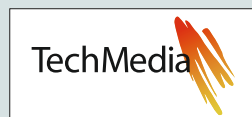
*Optagelsen løber for et kalenderår ad gangen,
men faktureres halvårligt.*

Kontakt:

Heidi Thode, tlf. 43 24 26 62, dir., e-mail: ht@techmedia.dk

Priseksempel på optagelse:

Fagbladsforlag



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. 512,-.

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



KEMISK FORENING

Universitetsparken 5
DK-2100 København Ø

www.chemsoc.dk

The Danish Chemical Society
Founded 1879

Dansk Selskab for Historisk Kemi

Selskabets medlemmer er af Videnskabshistorisk Selskab inviteret til foredrag af professor emeritus, FD Anders Lundgren, Institutionen för idé och lärdomshistoria, Uppsala Universitet: How to Build a Chemical Industry. The Role of Science and Other Forms of Knowledge During the End of the 19th Century. Det finder sted tirsdag den 5. marts 2013 i aud. 10 på H.C. Ørsted Institutet, Universitetsparken 5, 2100 Kbh. Ø kl. 17.00. Tilhørere er velkomne til kaffe fra 16.30 i Matematisk Instituts frokoststue, bygning 4 (E), 4. sal.

Med venlig hilsen
Christian B. Knudsen og Børge Riis Larsen

Mødekalender (1-2) 2013

5.3. 2013 Dansk Selskab for Historisk Kemi, How to Build a Chemical Industry. The Role of Science and Other Forms of Knowledge During the End of the 19th Century. 5. marts 2013 i aud. 10 på H.C. Ørsted Institutet, Universitetsparken 5, 2100 Kbh. Ø kl. 17.00. Se dk 2013 (1-2)

30.-31. 5.1 2013 8. Danish Conference on Biotechnology and Molecular Biology. *Food Biotechnology and Nutrigenomics*. 30.-31. maj, Hotel Munkebjerg, Vejle. Se dk 2013 (1-2)

8. Danish Conference on Biotechnology and Molecular Biology

May 30 – 31, 2013
Hotel Munkebjerg, Vejle

Food Biotechnology and Nutrigenomics

Food biotechnology and nutrigenomics are rapidly growing research fields contributing to a better understanding of the interaction between nutrition, metabolism and gene expression. Recent investigations of the human gut have provided insight into the complicated interactions between nutrition and the gut microbiota. Advanced methods in biotechnology enables investigations of nutritional effects and interactions at the metabolomic and transcriptomic level in relation to health and the development of life style diseases. This way nutrigenomics provides the potential for development of individual diets. Furthermore food biotechnology provides the possibilities and sustainable methods to produce healthy food and food ingredients with specific properties. Together food biotechnology and nutrigenomics are research areas providing a deeper understanding of health and nutrition, and significantly contributing to the development of healthy food and way of living.

The present conference focuses on the latest achievements in the research fields of

- Nutrigenomics
- Nutritional metabolomics
- Nutritional systems biology and biomarkers
- Prebiotics and functional food ingredients
- Prebiotics
- Cell factories for production of food ingredients
- Food allergens
- Probiotics and human gut microbiota
- Human gut microbiota and life style diseases

Invited speakers (all confirmed):

- Michael Müller, Wageningen NL
- Martin Kussmann NIHS, Nestlé, CH
- Lesli H Larsen, University of Copenhagen, DK
- Lars Dragsted, University of Copenhagen, DK
- Claudine Junien, INRA at Jouy en Josas, F
- Ben van Ommen, TNO Quality of Life, NL
- Frederik-Jan van Schooten, Maastricht University, NL
- Jørn Dalgaard Mikkelsen, Technical University of Denmark, DK

- Sampo Lahtinen, Kantvik Active Nutrition, DuPont Nutrition and Health, FI
- Magali Remaud-Simeon, INSA Toulouse, F
- Birte Svensson, Technical University of Denmark, DK
- Hanne Frøkiær, University of Copenhagen, DK
- Martin Bahl, DTU Food, Technical University of Denmark, DK
- Adam Baker, Chr. Hansen, DK
- Jason Chieh Chou, Nestle, CH
- Anita Wichmann, Wallenberg Laboratory, University of Gothenburg, S

The conference will include a poster session covering a broad range of topics on biotechnology as well as a commercial exhibition of equipment, consumables and services to Danish biotechnology.

The conference is organised by Danish Biotechnological Society in collaboration with Danish Society of Biochemistry and Molecular Biology as well as BioPeople.

Secretariat and vendor exhibition contact
Birgitte Magnér Egeberg, IDA, Kalvebod Brygge 31 - 33, DK-1780 København V
Tel.: 33 18 46 46, e-mail: bme@ida.dk.

Danish Biotechnological Society (DBS) is a scientific society established in 2006 in collaboration between Danish Biotechnology Forum and The Danish Society for Biochemistry and Molecular Biology. DBS is organised as part of The Danish Society of Engineers, IDA. The purpose of DBS is to facilitate networking within the field of biotechnology in Denmark, creating links between universities, research institutions, hospitals and companies. DBS represents professionals working with biotechnology and seeks to promote and communicate important issues on biotechnology, biochemistry and molecular biology to the public. DBS organises scientific conferences and meetings on biotechnology.

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

Introducing the New **DISCOVERY SERIES**

The Discovery TGA is the most powerful, reliable and easy-to-use Thermogravimetric Analyzer ever developed, from the world leader in thermal analysis.



www.tainstruments.com