

dansk kemi

Nummer 12 - December 2013 / 94. årgang

Hårrejsende shampoo

Misteltenen: Julens magiske trylleurt

Kunst og kemi: Raman af hvide pigmenter



SEND LÆGEHJÆLP NU – STØT MED 150 KR.

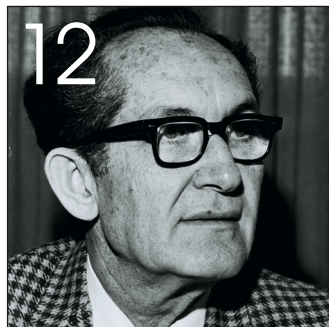
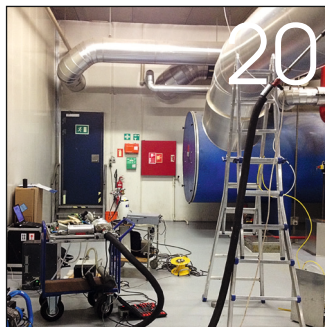
Ring nu på 90 540 840

SMS "MEDICIN" til 1414

Støt online på msf.dk

Ved at støtte via sms eller telefon accepterer du, at Læger uden Grænser kontakter dig igen. Det koster 150 kr.
+ almindelig sms-takst. Udbydes af Læger uden Grænser, Dronningensgade 68, 3. 1420 København K, tlf. 39775600.

INDHOLD



1 Forside: MSCi har undersøgt hvad otte forskellige hårshampooer indeholdt. Og det er hårrejsende læsning. Læs mere i artiklen side 14. Foto:MSCi.

8 Misteltenen - julens magiske trylleurt. Misteltenen har, foruden den symbolske betydning i julen, givet anledning til isolering af interessante nye naturstoffer.

10 Ny pris for udvikling af enzymassays. Novozymes Enzyme Assay Scientist Award er på 5000 euro, og vil fremover blive uddelt hvert andet år til en studerende, der har udviklet et enestående enzymaktivitetsassay.

12 Nobelprisen i kemi 2013. Den blev tildelt Martin Karplus, Michael Levitt og Arieh Warshel "for the development of multiscale models for complex chemical systems".

14 HÅRREJSENDE fakta fra ferielandet. Sommerferien er slut. Håber du nød den. Men gad da vide hvad du egentlig puttede i håret? Det kan du læse mere om i artiklen, hvis du tør.

18 Organo-klorerede forbindelser i Arktis. Langtransporteret forurening og klima.

20 Ultrafine partikler fra gasmotorer på danske kraftvarmeværker. Det er tidligere vist, at gasmotorer på danske kraftvarmeværker kan emitte overraskende mange ultrafine partikler. Læs mere i artiklen.

26 Eksponerings-hvaffornoget? Det kræver en længere forklaring, at få overblik over de praktiske opgaver og konsekvenser i forbindelse med eksponeringsscenarierne. Her forsøger forfatteren at skabe dette overblik og beskrive det praktiske arbejde som følger af eksponeringsscenarierne.

30 Raman af hvide pigmenter. Et samspil mellem kunst og kemi. I et samarbejde mellem Statens Museum for Kunst og Kemisk Institut på KU er Ramanspektroskopi brugt til at definere sammensætningen af blandinger af blyhvidt og calcit i maleriers hvide pigmenter.

34 Produktnyt

39 Læs mere om de nyeste arrangementer fra Kemisk Forening

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 Henrik Skov
hsk@dmu.dk

Redaktionskomité:

Professor Anne S. Meyer (formand)
Johanne Jensen
(Formand, Kemilærerforeningen)
Professor, dr. scient. Mikael Bols
Professor Morten J. Bjerrum
(Kemisk Forening)
Professor Elo Harald Hansen
Cand.scient.
Allan Astrup Jensen
Lektor Palle Waage Jensen
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

Layout:

Morten Malmgren

Tryk:

KLS Grafisk Hus A/S

Trykt på miljøvenligt papir med vegetabiliske miljøfarver.

Oplag: 5.245
Ekspl. heraf 4.803
i betalt abonnement.
Online Læsere: 2.447

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



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.



Intelligent Chemistry Biolab A/S Automation Specialist

Andrew™

Hands Free Pipetting with the Innovative Pipetting Robot using Original Gilson Pipetman

PipetMax™

The latest Multichannel Automation Robot from Gilson

Microman Auto

Unit from Biolab A/S Automation Solutions based on Gilson GX-271



The only limitation is your imagination



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



Kvalitet i de akademiske uddannelser

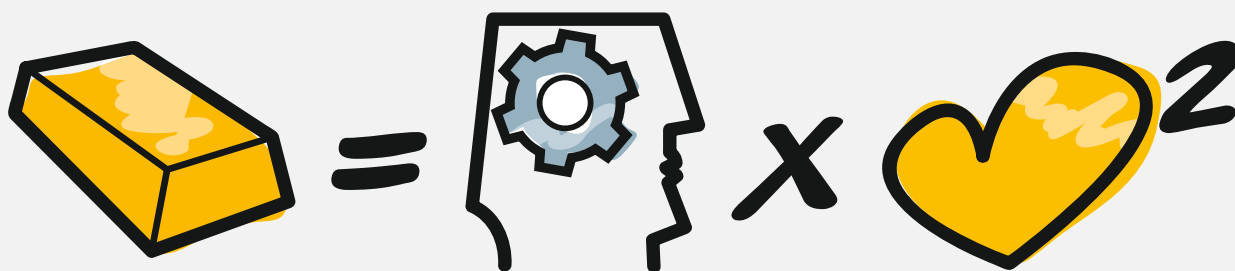
” Satsning på kvantitet fremfor for kvalitet giver ikke danske Nobelpriser

Da en professor ved Harvard University i USA engang blev spurgt, hvorfor så mange af universitetets akademikere over årene havde modtaget så mange Nobelpriser, svarede han, at det simpelthen var fordi, at ”excellence breeds excellence”. Det står i eklatant modstrid med det politiske mantra herhjemme, hvor man hylder kvantitet frem for kvalitet. Sidst demonstreret ved den udelte jubel over de godt 86.600 studenter ved sommereksamen 2013 – hvor man tillige kunne notere sig, at Fyn i samme ombæring blev erklæret dumpefrit område (hvilket vel rent statistisk næppe kunne (eller burde) være muligt!). Heldigvis valgte mange af studenterne at søge ind på de naturvidenskabelige uddannelser. På DTU fik man således en 36% forøgelse i ansørgertallet, og på kemiretningen måtte man sågar for første gang i mands minde indføre adgangsbegrænsning – hvilket vel også har medført ”udelt jubel”.

Naturvidenskaberne er i sagens natur eksperimentelle (”theory guides, experiment decides”). Bortset fra fysik, som fra politisk hold gennem årene har nydt relativ stor forståelse (tænk blot på de mange penge, som Danmark har bidraget med til CERN), har der været væsentlige større begrænsninger inden for andre områder, herunder kemi. Det har f.eks. afspejlet sig i gradvis, men progressiv nedlæggelse af mange eksperimentelle kurser, som traditionelt har været bemandings- og omkostningsmæssigt tunge. Og besøger man de kemiske institutter ved universiteterne i dag, vil man se, at mange laboratoriefaciliteter er forsvundet og erstattet af kontorer. Ganske vist kan visse eksperimenter udføres på computere – men vi må da insistere på, at resultaterne kan verificeres eksperimentelt. Derfor bliver de uddannede kandidater også meget mere begrænsede i deres kemiske viden og praktiske færdigheder end tidligere. Dette reducerer kandidaternes kompetencer og muligheder for at få arbejde i de private virksomheder (disse foretrækker nemlig i stor udstrækning at hyre udlændinge), og ligeledes for at kvalificere sig til at blive ph.d.-studerende. Det er derfor ikke overraskende, at to tredjedele af de ph.d.-studerende ved DTU er udlændinge. Jeg har gentagne gange hørt fra ph.d.-vejledere på DTU, at de danske studerende er for ringe og ofte blottet for selvstændigt initiativ og drive. Regeringens offensiv med flere ph.d.-stipendier til universiteterne kommer derfor ikke til at tilgodese danskere. Selvom nogle af udlændingene efter endt uddannelse muligvis ville blive her i landet, vil det utvivlsomt være vanskeligt at fastholde de mest velkvalificerede på grund af de økonomiske betingelser herhjemme. Det er derfor bydende nødvendigt, at der satses benhårdt på at opkvalificere kandidatuddannelserne, såvel fra de studerendes side som fra det offentlige.

I 1759 udtalte Benjamin Franklin, at ”den, der er villig til at ofre grundlæggende friheder for en smule midlertidig tryghed, fortjener hverken frihed eller tryghed”. I dag kunne vi reformulere denne sentens til at sige, at den politiske magt, som er villig til at ofre kvalitet i uddannelsen for en midlertidig politisk stabilitet, fortjener hverken magten eller at blive betroet at varetage kvaliteten.

Elo Harald Hansen, elohh@hansen.mail.dk



Værdi = Innovation x Engagement²

Formlen for værdiskabende løsninger er enkel, og alligevel er det ikke alle, der mestrer den. For de innovative og engagerede IP-rådgivere hos Chas. Hude er det imidlertid en selvfølge at levere kompromisløs rådgivning og service.

Hos os finder I branchens skarpeste hoveder med forståelse for jeres forretning og en evne til at omsætte forståelsen til værdifuld IPR. Vi brænder for det, vi gør, og vi stiller store krav til hinanden. Ikke i form af tomme ord, men som konkrete handlinger, der gør en forskel.

Chas. Hude A/S er en af Danmarks førende virksomheder inden for rådgivning om immaterielle rettigheder. Vi beskytter, overvåger, håndhæver og forsvare rettigheder for kunder i ind- og udland. Vi blev grundlagt i 1896 og har i dag 50 medarbejdere. Mød flere værdiskabere på www.chashude.dk

Marianne Johansen

Patentdirektør, Partner
European Patent & Design Attorney
Ph.d. (Farmaci)

Rådgiver om

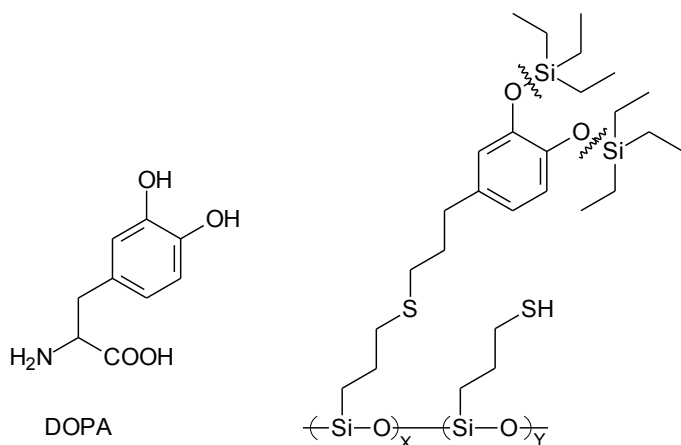
Patentansøgninger, indsigelses- og appelsager samt krænkellesvurderinger og IPR-strategiske spørgsmål. Særlig teknisk ekspertise inden for lægemidler, dosering af lægemidler, bioteknologi, lægemiddelkemi, biokemi, genteknologi, immunologi, vacciner, medicin, medicinske behandlinger og diagnose.



Nyt om ...

... Undervandslim

Muslinger og andre havlevende dyr kan producere et protein, som de bruger til at lime sig fast på en række undervandsflader. Limen er meget kraftig. Proteinet er baseret på aminosyren DOPA, 2-amino-3-(3,4-dihydroxyphenyl)propansyre. Her er



3,4-dihydroxy-phenylsystemet attraktivt pga. dets store evne til at danne stærke koordinationsforbindelser med en række metaller. Forsøg på at syntetisere kommercielle lime på dette grundlag er hidtil mislykkedes pga. benzen-1,2-diols store



Muslinger. Foto: Image courtesy of Expedition to the Deep Slope 2007, NOAA-EO.

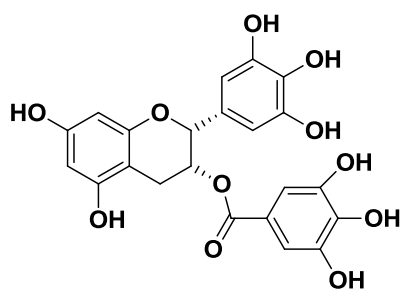
tilbøjelighed til luftoxidation. Det er imidlertid nu lykkedes at syntetisere en sådan lim ved at beskytte hydroxygrupperne med triethylsilylgrupper, som let fraspaltes vha. syre.

Carl Th.

Improved Performance of Protected Catecholic Polysiloxanes for Bioinspired Wet Adhesion to Surface Oxides. *Journal of the American Chemical Society*, 2012, DOI: 10.1021/ja309044z.

Nyt om ...

... Johannesbrød, chokolade og *Listeria*



(-)-epigallocatechin-3-gallat

Johannesbrødtræet (*Ceratonia siliqua*) hører til ærtefamilien og bærer da også bælgfrugter. De bruges til fødevarer og dyrefoder, men er også grundlaget for meget velsmagende chokoladeerstatninger, slik og småkager. Træet dyrkes omkring Middelhavet, og alene Spanien producerede i 2010 48.000 tons johannesbrødfrugter. Fra bladene fremstilles et methanoludtræk, der virker antibiotisk på en af de mest virulente fødevarebakterier *Listeria monocytogenes*, der hvert år globalt er skyld i dødsfald. I 2010 blev der diagnosticeret ca. 60 tilfælde



i Danmark. En af de aktive talrige polyphenoler i ekstraktet, (-)-epigallocatechin-3-gallat, mister aktiviteten, når aminosyren prolin tilsættes. Effekten antages derfor at stamme fra hæmning af prolindehydrogenase-enzymet

Carsten Christophersen

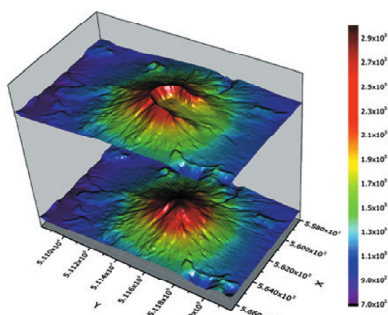
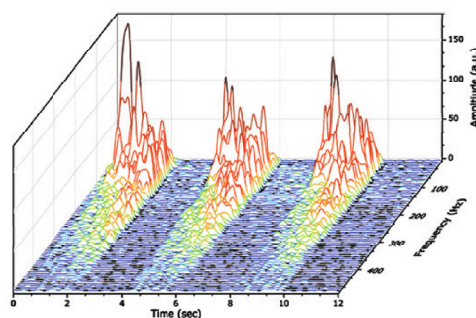
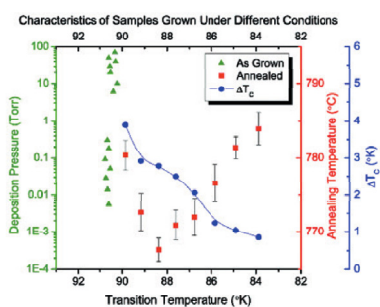
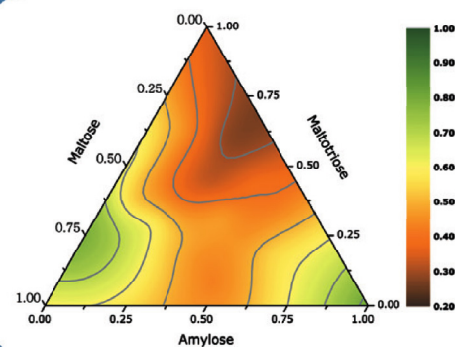
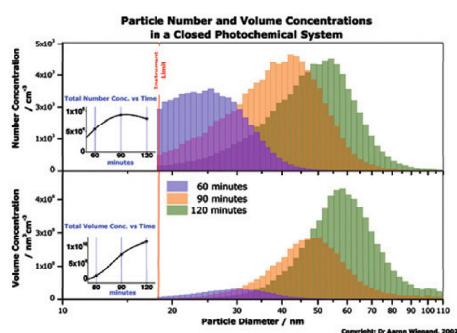
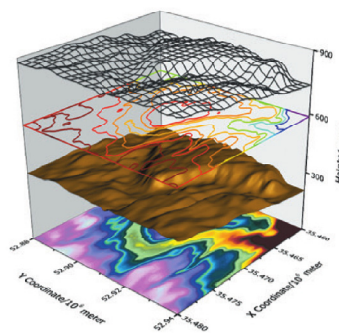
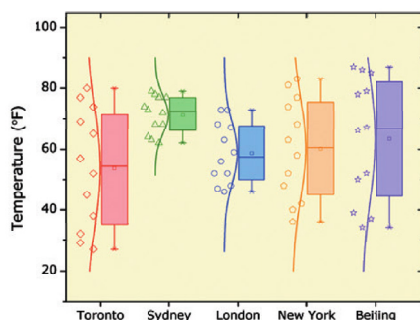
Inhibitory Effect of Carob (*Ceratonia siliqua*) Leaves Methanolic Extract on *Listeria monocytogenes*. N. Aissani et al. *Journal of Agricultural and Food Chemistry* 2012, Bind 60 (40), side 9954



NEW VERSION

ORIGIN[®] 9

Data Analysis and Graphing Software.
Powerful. Flexible. Easy to Use.



Inno-Max

Tlf: 9696 1111

<http://innomax.dk>



Misteltenen - julens magiske trylleurt

Misteltenen har, foruden den symbolske betydning i julen, givet anledning til isolering af interessante nye naturstoffer, der forventeligt repræsenterer spændende nye modeller for medicinalkemikere.

Af Carsten Christophersen, carsten@techmedia.dk

Mistelten (*Viscum album*) har i umindelige tider været værdsat som medicinalplante. Den har været en afholdt trylleplante, der mentes at besidde magiske evner. Men den har også været kendt for sin giftighed. Der findes evidens for brugen på pilespidser fra oldtiden. Nu er den nok mest kendt for en symbolsk betydning omkring juletid og for en omdiskuteret virkning mod kræft.

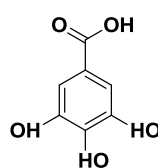
■ Mistelten

Den europæiske mistelten *Viscum album* er en halvparasitisk stedsegrøn plante, der får hvide bær sidst på efteråret eller tidligt på vinteren. Godt nok stjæler den næringsstoffer fra værtsplanten, men den klarer selv fotosyntesen. Der er mange varieteter, der gror på forskellige værtsplanter. Det viser sig, at snylteren nemt stjæler alkaloider fra værten, og det er kilden til de tidligere beskrevne alkaloider isoleret fra mistelten. Her i landet er æbletræer en populær vært, selvom misteltenen er sjælden som vildtvoksende plante her.

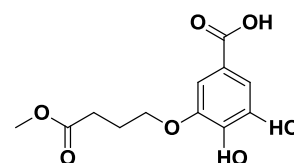
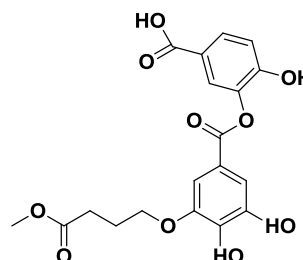
En snylter som julepynt

I julemåneden stiger salget af mistelten. Den hænges op i døråbninger, og når et par "utilsigtet" kommer til at stå sammen

under den, så er de forpligtet til at kysse hinanden – endog på munden, og så mange gange som der er bær på planten. Det er måske resterne af det ældgamle frugtbarhedsritual, som planten



gallussyre



Gallussyre og to forbindelser benævnt 3-(3'-carbomethoxypropyl)-gallussyre, 3-(3'-carbomethoxypropyl)-7→3'-protocatechoylgallat blev isoleret fra mistelten. Både gallussyre og γ -hydroxysmørsyre har tidligere vist aktivitet mod nogle kræftformer.

■ Giftighed

Mistelten er giftig, og det gælder alle dele af planten. Men giftigheden er ikke overvældende. Især er det vigtigt at søge hjælp, hvis børn spiser misteltenbær. Voksne tilrådes at søge hjælp, hvis de har spist mere end fem bær. Umiddelbare symptomer er opkast og diarré.

har været centrum for. Misteltenen er en lykkebringende plante, men den har også sine skyggesider. Det fandt Odins søn Balder ud af, da Loke lokkede Balders blinde broder Høder til at dræbte ham med en pil med mistelten på. Mistelten var nemlig den eneste plante som Odins hustru og Balders moder Frigg ikke havde taget i ed om at skåne Balder.

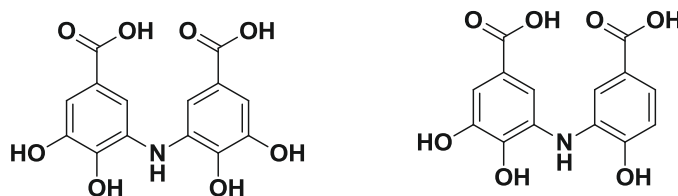
Medicin eller magi

Mistelten har en tusindårig historie som lægemiddelplante. Den har især været brugt mod forhøjet blodtryk, diabetes, slidgigt, epilepsi og kræft. Selvom udtræk af mistelten har været brugt mod kræft siden 1920'erne, er der ikke enighed om værdien af behandlingen. Mange studier har metodiske fejl. Der er undersøgelser, som beskriver en positiv effekt, men også gode undersøgelser, der ingen effekt finder.

Misteltenkemi

I betragtning af den lange tid, hvor behandlingen er praktiseret, er det forbavsende få af plantens naturstoffer, der er beskrevet.

Mistelten indeholder lectiner, der er cellegifte. Det er proteiner, som danner komplekser med sukkerarter og denatureres ved opvarmning. Viscotoxinerne er små proteiner i størrelsesordenen 5.000 Da med flere disulfidbroer. For nylig er en serie γ -hydroxybutansyrer (GHB), der er en helt ny type naturstoffer, beskrevet. De første alkaloider fra mistelten selv er først be-



To nye simple diphenylaminer, 4,5,4',5'-tetrahydroxy-3,3'-iminodibenzosyre og 4,5,4'-trihydroxy-3,3'-iminodibenzosyre, er de første alkaloider fra mistelten, som planten selv danner.

skrevet i 2012. De er simple substituerede diphenylaminer. Alkaloiderne fra mistelten har i lang tid været tilskrevet virkning mod kræft. Planten indeholder også tyramin, phenethylamin, cholin og acetylcholin.

Kilder

Novel GBH-derived natural products from European mistletoe (*Viscum album*). B. Amer *et al. Pharmaceutical Biology* 2013, Bind 51(8), side 981 – 986.
Novel aminoalkaloids from the European mistletoe (*Viscum album* L.). B. Amer *et al. Phytochemistry Letters* 2012, Bind 5, side 677-681.

DIN PARTNER I MILJØ OG TOKSIKOLOGI

- Risikovurdering af kemikalier
- Udfasning af problematiske stoffer
- Sikkerhed og dokumentation af ingredienser
- Faremærkning og sikkerhedsdatablade
- Software til kemikaliestyring

www.tox.dhi.dk

DHI
Agern Allé 5
DK-2970 Hørsholm
Tel: 4516 9200
Fax: 4516 9292
dhi@dhi-group.com

The expert in **WATER ENVIRONMENTS**



Ny pris for udvikling af enzymassays

Novozymes Enzyme Assay Scientist Award uddeles hvert andet år til en studerende, der har udviklet enestående enzymaktivitetsassays eller performanceassays.

Af Dorota Nissen og Ture Damhus, Novozymes A/S

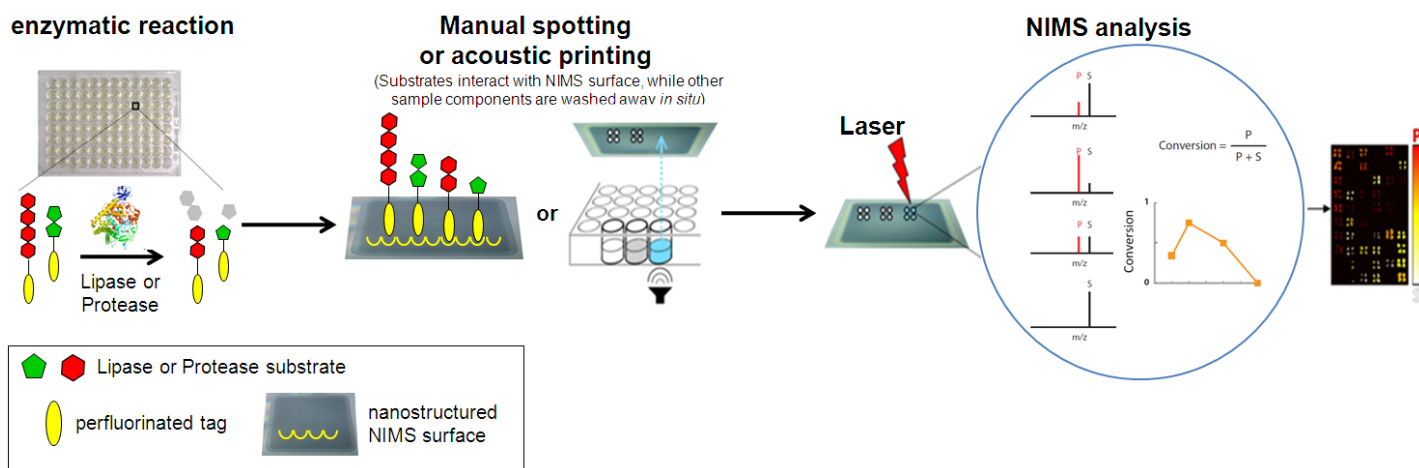
Sidste år indstiftede Novozymes A/S prisen *Novozymes Enzyme Assay Scientist Award*. Den er på 5000 €, vil blive uddelt hvert andet år og retter sig mod master- eller ph.d.-studerende og postdocs, der har udviklet enestående enzymaktivitetsassays eller performanceassays (metoder til vurdering af enzymefakter under anvendelsesbetingelser). Formålet med prisen er at øge opmærksomheden omkring, og anspore unge videnskabsfolk til at arbejde med, sådanne metoder, som er af afgørende betydning for udvikling af industrielle enzymer. Et antal fremragende ansøgninger blev modtaget i 2012 fra universiteter verden over, herunder højtrangerede institutioner som Caltech og universiteterne i Cambridge, Stanford og Berkeley. De beskrevne assays dækkede et bredt spektrum af enzymtyper og involverede mange forskellige teknikker.

Vinderen af den første pris blev Dr. Xiaoliang Cheng fra Lawrence Berkeley National Laboratory og JBEI (Joint Bio-

disiloxan ("initiator"). De nævnte tags vekselvirker med, og immobiliseres derved på, overfladen af chippen, hvilket giver en effektiv oprensning af prøverne. Taggene kan også indeholde en ioniserbar hjælpeggruppe, der fremmer ionisering af substrater og produkter. Ved laserbestråling fordampes initiatoren og prøverne fra overfladen og kan så analyseres i massespektrometret. Den "bløde" immobilisering muliggør effektiv desorption og ionisering, og samtidig kan overfladen underkastes *in situ*-vaskeprocesser, således at komplekse biologiske prøver kan undersøges. Ligeledes er det muligt at have mange reaktioner kørende samtidig og derved screene parallelt efter enzymer fra forskellige klasser i ét assay, f.eks. proteaser, lipaser og cellulaser. Der kan udføres op imod 10.000 assays om dagen.

Prisoverrækkelsen fandt sted den 12. september 2012 i Davis, Californien, hvor Novozymes har et datterselskab. Dr. Cheng præsenterede her sit arbejde.

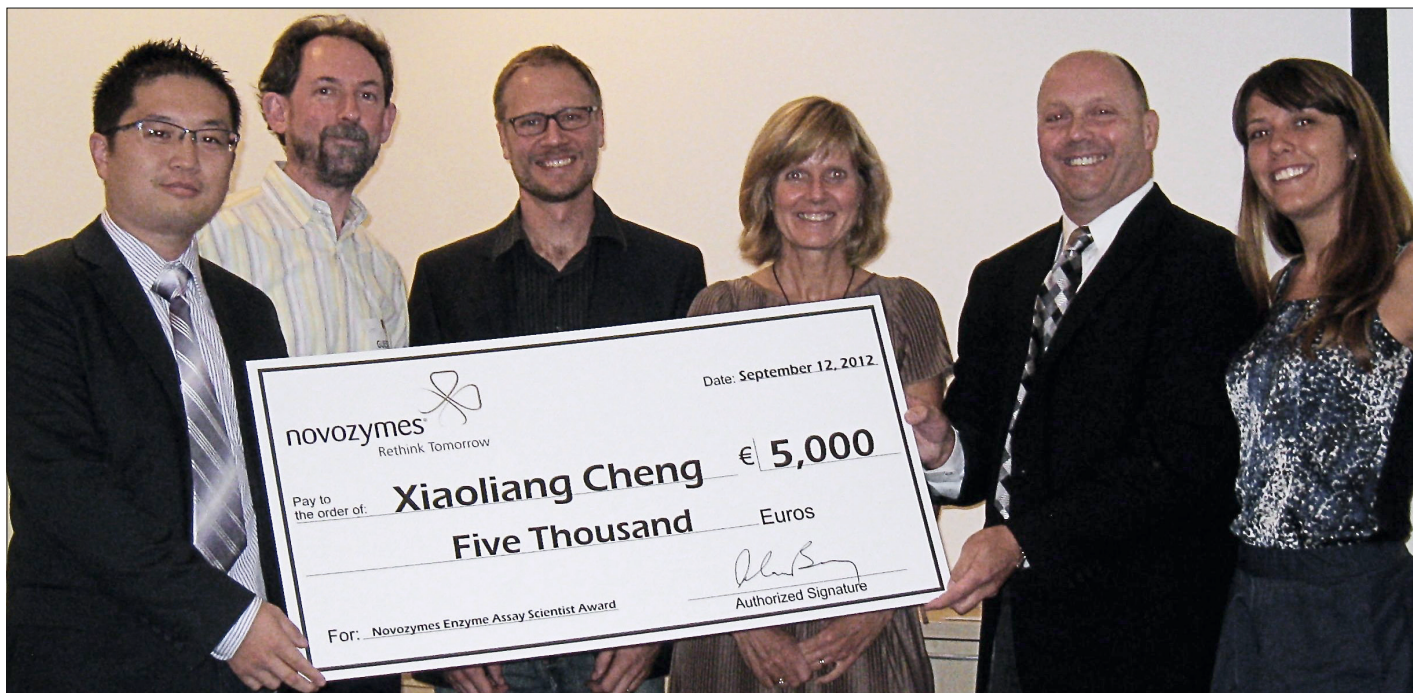
Dr. Cheng var ledsaget af sin vejleder ved Lawrence Berkeley-laboratoriet, Dr. Trent Northen, og vicepræsident for teknologi



Skematisk fremstilling af det vindende assay i 2012 til multiplex-high-throughput-screening baseret på NIMS (nanostruktur-initiator-massespektrometri).

Energy Institute). Han fik den for sin rolle i udviklingen af et multiplex-high-throughput-screeningsassay baseret på NIMS (nanostruktur-initiator-massespektrometri). I assayet udføres enzymreaktioner i mikrotiterplader med enzymsubstrater tagget med en perfluoralkylgruppe. Reaktionsblandingerne, der indeholder både substrater og produkter tagget med perfluoralkylgrupper, overføres ved akustisk printning til en NIMS-chip, som er en porøs siliciumchip coatet med en perfluoreret

ved JBEI, Dr. Paul Adams. Dr. Northen fik for nylig en pris fra præsident Obama for sine skelsættende metabolismestudier. Han er opfinderen af den ekstremt følsomme NIMS-teknik, og teknikken bruges nu i hans laboratorium til direkte visualisering af metabolitter i væv og til studier af kommunikation i mikrobielle befolkninger. Dr. Chengs arbejde fokuserede så på at udvide NIMS-teknologien fra metabolitprofilering til enzymassays.



Fra venstre mod højre: Xiaoliang Cheng, Paul Adams, Trent Northen, Lisbeth Bech (Global Assay Development, Novozymes, Danmark), Alan Berry (Managing Director, Novozymes, Davis) samt Dorota Nissen (Research Scientist, Novozymes, Danmark, og organisator af prisen).

Tidsfristen for ansøgninger om den næste pris er 1. april 2014.
Man kan finde mere information her:
<http://www.novozymes.com/en/innovation/Enzyme-Assay-Scientist-Award/Pages/event-and-awards.aspx>
Kontakt: assayaward@novozymes.com

GERSTEL


MSCi leverer

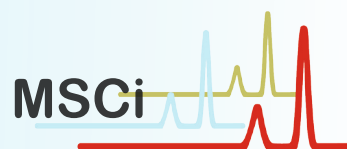
nøglefærdige
løsninger

baseret på GERSTEL prøveforberedelsesudstyr:

- Instrument
- Opstilling
- Instruktion og kursus
- Service og garanti
- Applikationssupport

Besøg vores demolab i Skovlunde

GET
GERSTELIZED!



Nobelprisen i kemi 2013

Den blev tildelt Martin Karplus, Michael Levitt og Arieh Warshel "for the development of multiscale models for complex chemical systems".



Foto: Harvard University/Wikimedia Commons. Nobelprismodtagerne i kemi 2013 Martin Karplus, Michael Levitt og Arieh Warshel.

Af dr. techn., docent emeritus Kjeld Rasmussen

Forfatteren af denne artikel var i de første år involveret i udviklingen af programmet CFF Consistent Force Field og var i perioder sammen med de tre nobelpristagere.

I artiklen beskrives den tidlige videnskabelige udvikling og almindelig omgang og livet på Weizmann Institute of Science dengang for længe siden.

Nobelinstitutionen har på sine hjemmesider udførlige redegørelser for tildelingen:

http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2013/advanced-chemistry-prize2013.pdf, <http://www.nobelprize.org/mediaplayer/index.php?id=1956>, og der er tillige interviews med Levitt og Warshel. Karplus har publiceret en udførlig videnskabelig selvbiografi: *Annu. Rev. Biophys. Biomol. Struct.* 2006. 35:1 - 47.

Weizmann Institute of Science i Israel

Det hele startede i de meget frugtbare år sidst i 1960'erne og først i 1970'erne på Chemical Physics Department ved Weizmann Institute of Science i Rehovot. Rehovot er en provinsby i Israel, og Institutet er et af verdenscentrene for naturvidenskabelig forskning. Chemical Physics Department var grundlagt af Shneior Lifson. Han var initiatoren af metoderne, der førte til det alment anvendelige program CFF, The Consistent Force Field. Var Nobelprisen kommet inden han døde i 2001, havde han været med blandt modtagerne.

I 1969-70 bestod gruppen af Charlotte og John Schellman fra Oregon, Martin og Susan Karplus fra Harvard, Arieh Warshel, en sabra født og opvokset i en kibbutz i Israel, der havde opnået sin PhD hos Shneior Lifson, og Michael Levitt, som var sendt til Lifson af John Kendrew i Cambridge, desuden forfatteren af denne artikel, og naturligvis Shneior Lifson, lærer og mentor for os alle. Mike Levitt har beskevet sin ankomst til feltet i de første tider i en artikel fra 2001 "The birth of computational structural biology", *Nature Structural Biology* 8, 392 - 393 (2001).

En optimal arbejdsfordeling

Det var Shneior Lifson, som konstruerede matematikken til de nye metoder, Arieh Warshel, som kodede dem, og Michael Levitt, der udarbejdede de mest intrikate koder til håndtering af alle de indre koordinater i molekyler og deres vekselvirkninger. Det var Mike, som hjalp mig med den dybe indsigt i koderne, så jeg kunne udvide Shneiors og Ariehs program til at behandle koordinationsforbindelser. Den meget vigtige detalje at kunne optimere parametrene i energifunktionerne blev opfundet af Shneior og kodet af Arieh, og flere år senere revideret af mig.

Martin Karplus, der sammen med sin familie undslap fra Østrig i 1937, blev senere kendt for at anvende klassisk mekanik i kemien. Han blev en af grundlæggerne af molekylodynamikken, som består i at anvende de klassiske bevægelsesligninger på molekyler. Men han interesserede sig også for molekylstatikken, som var Shneiors område. Senere inviterede han Arieh til Harvard, hvor de kobledes CFF med Pariser-Parr-Pople-metoden til at behandle π -elektroner.

Vi var alle ret tæt på hinanden i de tidligste år. Jeg passede en gang fire amerikanske småpiger og mine egne to, mens de andre gæster var på en daglang ørkenstur til Massada. Martin lærte mine døtre at gå på appelsinskur: man må plukke og stille sin tørst, men ikke tage frugten med sig.

Vi fulgte alle vore forskellige livsbaner. Arieh og Mike flyttede til Californien. Charlotte og John tilbage til



Ophavsmand til metoderne og mentor for alle: Shneior Lifson.

■ Nobelprisen i kemi 2013

Martin Karplus, Michael Levitt og Arieh Warshel modtog Nobelprisen i kemi 2013 for udvikling af computermodeller, der kan forudsige kemiske reaktioner. Ifølge Nobelkomiteen er arbejdet banebrydende, fordi det lykkedes at kombinere Newtons love med kvantemekanikkens. Med de nye computerprogrammer kunne man nu simulere kemiske processer på computeren. Dertil er computerprogrammet fundamentet bag de simuleringsprogrammer kemikere benytter i dag.

Før benyttede man Newtons love til at beskrive atomernes placering i molekylerne. Vha. lovene kan man modellere selv store og komplekse molekyler. Til gengæld antager lovene, at molekylerne befinder sig i hvile, hvilket kun sjældent er tilfældet under kemiske reaktioner. Kvantemekanikken giver derimod en utrolig detaljeret beskrivelse af, hvordan kemiske processer forløber. Udfordringen her er, at den giver meget tunge udregninger pr. reaktion, man vil teste. Indtil 1970'erne blev der derfor primært regnet på meget små molekyler med kvantekemien, eller også regnede man på de store molekyler med de klassiske love og valgte at se bort fra om et stof var opløst i en vandig blanding osv.

Da de tre forskere mødtes i starten af 1970'erne, havde Martin Karplus udviklet mange kvantemekaniske programmer, og Arieh Warshel og Michael Levitt var eksperter i de klassiske metoder. Levitt var desuden, trods sin ungdom, en højt kvalificeret specialist i kodning og desuden dedikeret til anvendelser på biologiske problemer.

De kombinerede deres viden og udviklede dermed et program, der kombinerer de to områder. I modellen bruges kvanteberegninger på de protoner, neutroner og elektroner, der bliver påvirket i løbet af reaktionen, mens den bruger klassisk kemi ved reaktionscentret.

Oregon, Charlotte med CFF, John med sine egne seneste udviklinger af programmer til beskrivelse af foldning af α -helixen baseret delvis på Lifson-Roig-modellen. Martin rejste tilbage til Harvard og blev senere associeret med flere lærdomssteder i Frankrig. Min kone og jeg besøgte engang Martin og Susan i Paris, og vi fik da også talt om CHARMM, der var et velkendt og udbredt program, som Martin sammen med andre havde commercialiseret.

Fortsat arbejde med CFF

Jeg var den, der mest dedikeret holdt mig til Shneiørs oprindelige koncept. Sammen med mine studenter videreudviklede jeg programmet CFF. Den danske gren af the Consistent Force Field, "The Lyngby Version", førte til flere PhDer, en disputats, to professorater og nogle akademiske stillinger. Det fik siden effekt med nye og egne udviklinger i Japan, Kroatien og Serbien. Foruden muligvis i Kina, Schweiz og Spanien, hvor vi underviste i CFF.

I 1973-74 var jeg igen sammen med Arieh og Mike under et langt ophold i Rehovot. Jeg mødte dem også et par gange rundt om i verden, senest ved mindemødet i Rehovot i 2002 et år efter Shneiørs død. I 1973-74 var det et længere ophold, hvorunder den reviderede optimering skulle indarbejdes sammen med en ny kodning af beregning af termodynamiske funktioner. I en del af opholdet deltog tillige en polytekniker, som lavede eksamensprojekt hos mig.

Opholdet startede kort efter Yom Kippur-krigen. Arieh var i pansertropperne og kom hjem med shellshock. Mike, som altid var et meget hjælpsomt menneske, støttede ham gennem de før-

ste måneder, så de kunne publicere sammen. Og igen hjalp han mig med sin ekspertise i kodning af indviklede problemer.

I maj 1974 var jeg hjemme i fem uger for at undervise på et tre ugers kursus. Min kone klarede sig fint med naboer og venner. Hun blev lidt af en heltinde, da hun opdagede en mand forklædt som soldat, som ved hovedindgangen til instituttet spurgte om vej til Weizmanns grav. Israels første præsident ligger begravet i den anden ende af området, og hans grav er kendt af hver eneste soldat i landet. Hun meldte ham til vagten og blev senere rost meget.

Næste ophold i Israel kom i efteråret 1980, da Shneior og jeg afholdt et kursus for MSc- og PhD-studerende i Rehovot med min kone som praktisk assistent. Det var under et besøg af Hanna og Shneior Lifson hos os, at Shneior inviterede til besøget, hvor vi begge blev ansat på instituttet.

Ud over at lære de mange russiske studerende, som var nyankomne i Israel, at kode input og tolke output, kunne min kone trøste dem, når jeg havde anvendt russiske kraftudtryk. Shneior var da rektor for Everyman's University, et nyt initiativ, som rettede sig mod mennesker med intellektuelt potentiale men ringe uddannelse og virkede ved fjernstudier. Siden beskæftigede han sig mindre med, hvad han selv havde startet, CFF.

John og Charlotte var i København i 1983 for at besøge gamle kolleger på Carlsberglaboratoriet. Vi diskuterede gamle minder og vore respektive udviklinger og resultater.

På det tidspunkt var jeg sammen med mine studenter og gæster i fuld gang med omfattende studier over DNA's backbone, koordinationsforbindelser og saccharider. Ikke mindst vore kortlægninger af meget fleksible disacchariders konformationer vakte opsigt og fremkaldte invitationer. Jeg har været gæsteforsker og gæsteprofessor i Frankrig, Kina, Kroatien, Spanien, Schweiz og USA, og jeg disputerede i 1986. Siden 2000 arbejdede jeg tillige med Peter Pulays skelsættende kvantemekaniske metoder på min egen computer bygget af Peters medarbejdere. Herved kom der også en kobling til CFF.

Efter min pensionering i 2003 gik jeg i gang med tre projekter plus et stort arbejde over hydrogenbindinger i et makrocyclisk tetrasaccharid, som blot blev fremlagt på et møde. En alvorlig hjertesygdom satte i 2007 brutalt stop for mine aktiviteter. Min computer kom på museum.

Jeg blev ikke overrasket, men, som flere af mine tidligere studenter, begejstret over Nobelprisen til de tre tidligere kolleger.

E-mail

Kjeld Rasmussen: BirgitogKjeld@gmail.com



Pipetteservice

Akkrediteret kalibrering
Reparation • Vedligeholdelse

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



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



DANAK
Cal. Reg. Nr. 482

HÅRREJSENDE fakta fra ferielandet

Sommerferien er slut. Håber du nød den. Men gad da vide hvad du egentlig puttede i håret?



Figur 1. De i artiklen analyserede sæber: 1: Italien 2008; 2: Sverige 2011; 3: Danmark ca. 1990; 4: Italien 2009; 5: Ukendt 2010-2012; 6: Italien 2008; 7: Ukendt 2010-2012; 8: Italien 2013.

Af Jens Glastrup, Rikke Bendixen, Tore Vulpius, MSCi

På hotelrejserne i udlandet er de fleste givetvis stødt ind i de små farvestrålende og flydende hotelsæber/shampoer/body gels m.v. som ligger og venter, og som sparer noget af besværet med at have flydende varer med på flyrejsen. Men det har længe slået os, at der aldrig er nogen varedeklaration på bagsiden. Da vi mest har "Minirisk" og lignende på hylderne hjemme, besluttede vi at lave en aldeles uvidenskabelig undersøgelse af, hvad der kan være i de sæber, vi støder på under vore ferierejser.

Det var ikke svært, for nogen-af-os er ikke så gode til at få smidt ud, når vi kommer hjem fra ferien. Så vi fandt hurtigt mere eller mindre brugte hår- og bodyshampoer fra diverse ferierejser. De kan ses på figur 1, og specielt nummer 3 er interessant, idet den i hvert fald er 20 år gammel, og lå allerbagest i skabet, og derfor er fra en tid hvor de *helt sikkert* kom næsten hvad som helst i sæberne. Vi var specielt interesserede i de mistænkte hormonforstyrrende stoffer, altså typisk parabenerne og phthalaterne. Men vi undersøgte også, om der skulle være andre interessante komponenter i sæberne.

En udfordrende analyse

Flydende sæber og sæbelignende produkter er lidt specielle at analysere, idet det er vandige blandinger med en del hydrofile komponenter tilsat. De er vanskelige at injicere på konventionel vis med væskeinjektion, idet de sviner injektionssystemet til efter få analyser. Vi har derfor anvendt en lidt speciel variant af dynamisk headspace, hvor der kun bliver tilsat en lille mængde til prøvevialen, men hvor alt bliver afdampet til en adsorbent. Denne adsorbent desorberes herefter termisk direkte til kolon-

nen. Metoden kaldes "Fully Evaporative-Dynamic HeadSpace (FE-DHS)".

Den har nogle unikke karakteristika:

- I: Selv de mest polære komponenter bliver overført til analyse, idet vandet fjernes fuldstændig. Meget polære komponenter rives derfor med over på adsorbenten.
- II: I modsætning til konventionel Purge-and-Trap og Dynamisk HeadSpace kan der analyseres store molekyler med systemet. Vi har uden problemer set C_{18} -forbindelser med denne analyse, og det ved en afdampning ved kun 80°C. Der kan afdampes ved maks. 200°C, dette vil formentlig kunne række op til ca. C_{30} . Purgegasen er helium eller nitrogen.
- III: Salte har "ikke" noget damptryk og bliver derfor i vialen.
- IV: Prøveforberedelsen reduceres til ingenting, idet alt, såvel adsorption som desorption, foregår fuldautomatiseret i autosampleren.

Prøveforberedelse og analysemetode:

Manuelt: Vi fortyndede sæberne med methanol 1:9, og tilsatte 10 µl af denne fortyndede opløsning til en tom vial.

Automatiseret (Gerstel DHS option): Prøverne blev sat på autosampler som kørte følgende procedure:

- 1: Prøverne blev afdampet i 20 min ved 80°C med 50 mL/min, flushgas helium. De afdampede komponenter blev opsamlet på adsorbent (Tenax) ved 30°C.
- 2: Adsorbenten blev flyttet til den termiske desorber (TDU) og desorberet ved 280°C i 5 min. De afgivne komponenter blev fokuseret på en kold injektor (CIS4, 10°C). Efter fuldstændig opsamling af komponenterne fra TDU'en blev injektoren opvarmet (12°C/sek.) og komponenterne injiceret på kolonnen. ►

Teknologisk Institut

-vi hjælper **dansk industri** med
at finde nye veje indenfor
Life Science



Vi tilbyder: **Rådgivning**, udvikling og kemiske-, mikrobiologiske- og molekylærbiologiske analyser. Vi råder over: **Viden**, moderne testfaciliteter, **laboratorier** og kan arbejde under GMP.

Vi hører gerne fra dig, kontakt:

Anne Maria Hansen
Innovationschef
amah@teknologisk.dk
7220 1916

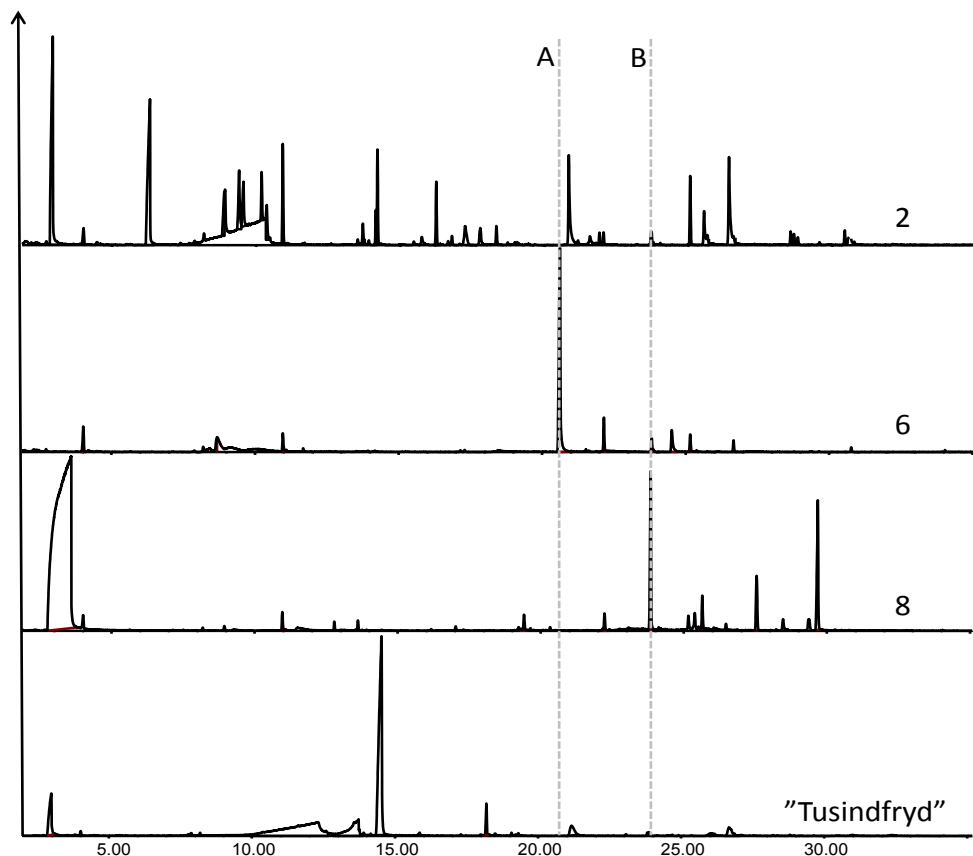


**TEKNOLOGISK
INSTITUT**

Kolonne: 5%-phenylmethylsilicone. Det er tvivlsomt, om vi ser et almindeligt anvendt konserveringsmiddel, Kathon CG med denne kolonne.

Hvad er der normalt i sæber?

Ud over de vaskeaktive stoffer i en vandig opløsning er der som regel fortykkelsesmidler og fugtbindere, glycoler, glycerol og lign. Herudover er der ofte duftstoffer, og for at forlænge duften og spare på de dyre aromastoffer er der af og til tilsat komponenter som eksempelvis phthalater. Disse holder på aromaen i længere tid, de damper langsommere af. Man dufter altså godt – længere. Uheldigvis er phthalaterne anset for at være hormonforstyrrende. Endelig vil en vandig opløsning af organiske



Figur 2. Kromatogrammer af prøver fra udvalgte hotelsæber: 2: Face shampoo; 6: Laura Kayal; 8: Antica Repubblica, Amalfi. Til sammenligning en "Tusindfryd" fra Irma, nederst. A: Top for methylparaben. B: Top for diethylphthalat:

komponenter samt sæbe være følsom over for vækst af mikroorganismer. Der kan altså være tilsat konserveringsmidler, eksempelvis parabener.

Hvad kiggede vi efter?

Allerførst skal det nævnes, at fundne toppe er identificeret vha. bibliotekssøgninger i NIST-biblioteket. Vi har altså ikke analyseret referencekomponenter. Vi har ydermere sorteret de mindste toppe fra. Det betyder selvsagt, at en del af de "fundne" komponenter må vurderes med en smule distance. Mange af glycolerne, aromakomponenterne, mono- og sesquiterpenerne og moskuskomponenterne er vanskelige at skelne fra hinanden. Ligeledes har alifatiske alkoholer, umættede-, og oxo-forbindelser ikke specielt karakteristiske spektre. Det skal specifikt nævnes, at cyclododekan (se nedenfor) ikke har et specielt karakteristisk spektrum, men vi ser en molekylarion på m/z 168, samt et lignende totalt spektrum, og tager dette som et indicium. Omvendt er phthalaterne ganske karakteristiske, og ligeledes er parabener nemme at genkende på deres massespek-

tre. Alt i alt fandt vi ca. 80 komponenter i de ni analyserede prøver. En samlet liste over fundne komponenter kan findes på: www.dansk kemi-online.dk/?page_id=29910

Vi har mellem hver analyse kørt en tom vial. Samtidig har vi anvendt det samme Tenaxrør til alle analyserne. Dette sikrede, at vi fik kørt en "blank" analyse, samt testet adsorptionsrøret, før den næste prøve blev analyseret.

Hvad fandt vi?

Allerførst skal det bemærkes, at de kat- og anioniske vaskeaktive stoffer ikke vil ses i denne analyse, idet den er baseret på termisk desorption. Kromatogrammerne fra et repræsentativt udsnit af de analyserede prøver ses i figur 2. Det er

bemærkelsesværdigt, at nogle af sæberne har et særdeles stort antal af komponenter i blandingen, f.eks. prøve 2 (samt prøve 1, ikke vist), mens andre er sammensat af få komponenter i større mængde. Et godt eksempel er "Tusindfryd" hvor vi finder en sæbe stort set baseret på (af de fordampelige komponenter!) propylenglycol, glycerol, benzoesyre, 2-phenoxyethanol og dehydroacetic acid (Biocide 470F). Gennemgående er der store toppe af varierende komponenter af glycoler, glycolethre og glycerol, hvilket knap er overraskende, sammen med diverse duftstoffer. I halvdelen af prøverne er der repræsentanter for moskusduftstofferne til stede. Hvad der derimod var mere opsigtsvækkende var tilstedeværelsen af såvel phthalater som parabener i nogle af kromatogrammerne.

Overordnet fandt vi diethylphthalat (DEP) i alle 8 analyserede prøver, men kun i den ene af disse (prøve 8) er det til stede i dominerende koncentration. Desuden er der "en del" i prøverne fra 4 og 5. Disse to ser i øvrigt ud til at komme fra samme producent, kromatogrammerne er stort set ens. En enkelt mulig overraskelse var der også:

Cyclododekan, et fast stof med et relativt højt damptryk. Det har formentlig samme effekt som phthalaterne, altså vedligeholdelse af duften, men er desværre også kendt for at være langsomt omsætteligt i naturen. Fundet af denne komponent bør dog nok verificeres yderligere ved kørsel af referencer.

Vi fandt også methyl- og/eller propylparaben i i alt 5 af produkterne. Der er dominerende toppe i prøverne fra 1 og 6.

Og prøve 3? Den var såmænd ikke værre end nogen af de andre, masser af glycerol og lidt DEP samt nogle duftstoffer og konserveringsmidler.

Overordnet vil vi konkludere, at hvis man gerne vil undgå de mere eller mindre ukontrollerede blandinger af kemiske stoffer på ferien, samt en stor sandsynlighed for at blive udsat for phthalater eller parabener, er det nok bedst at tage sine egne sæber og andre plejemidler med hjemmefra.

E-mail

Jens Glastrup: jens@msconsult.dk

Mass spectrometry transformed.

Announcing ground-breaking innovations in mass spectrometry—the Thermo Scientific™ Orbitrap Fusion™ Tribrid™ MS and the Thermo Scientific™ TSQ Endura™ and TSQ Quantiva™ triple-stage quadrupole MS—built from the ground up for uncompromising performance and usability. Together with nano RSLC; easy online SPLC; or fast, flexible intelligent multiplexing, these LC-MS systems deliver unprecedented experimental power and unrivaled sensitivity. Achieve more results, with more confidence, more quickly than ever before.

Transform your science.

• thermoscientific.com/mstransformed

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



Orbitrap Fusion LC-MS system
Unmatched analytical performance



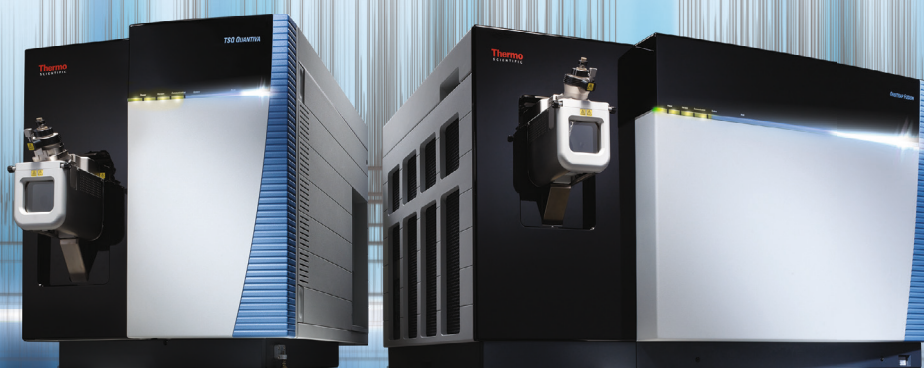
TSQ Endura triple-stage LC-MS system
Extreme quantitative value



TSQ Quantiva triple-stage LC-MS system
Extreme quantitative performance



Innovative Software
Rapid method-building with drag-and-drop interface



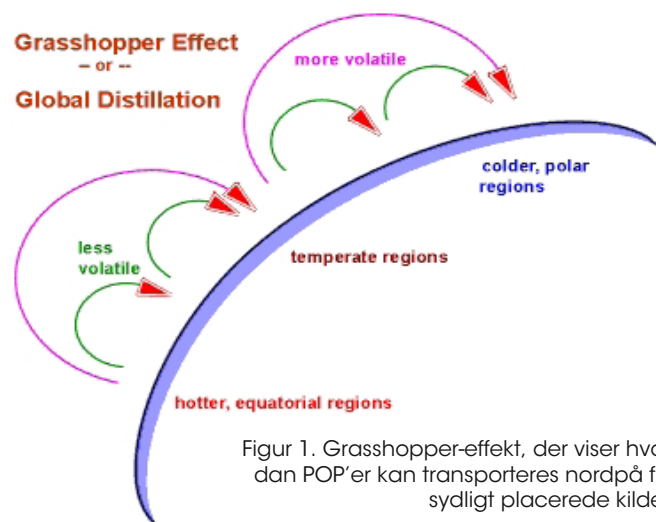
Organo-klorerede forbindelser i Arktis

Langtransporteret forurening og klima.

Af professor Henrik Skov¹, PhD, Senior Lecturer
Carsten Ambelas Skjøth² og PhD, Seniorforsker
Rossana Bossi¹

¹⁾ Aarhus universitet, ²⁾ University of Worcester

Mange persistente organiske forbindelser (engelsk; persistent organic pollutants, POPs) langtransporteres fra sydligere breddegrader mod nord ved den såkaldte græshoppeeffekt: forbindelser transporteres i luft til de afsættes til jordoverfladen, hvorefter de frigives igen til atmosfæren, f.eks. når solen opvarmer overfladen. På den måde transporteres de nordpå



Figur 1. Grasshopper-effekt, der viser hvordan POP'er kan transporteres nordpå fra sydligt placerede kilder.

Forbindelse	Middel	Median	Område	N	DG
α -HCH	8.9	8.9	0.15-12.0	32	0.001
β -HCH	0.004	0.001	0.001-0.02	9	0.001
γ -HCH	1.27	0.94	0.07-11.8	32	0.001
δ -HCH	0.008	0.005	0.001-0.05	16	0.001
Hexachlorobenzon	79.5	81.4	1.15-159	32	0.001
Heptachlor	0.148	0.057	0.001-1.14	33	0.001
Heptachlor epoxid	0.64	0.65	0.074-1.50	32	0.001
Aldrin	0.002	0.001	0.001-0.027	6	0.001
Dieldrin	1.69	1.17	0.23-17.0	32	0.001
Endrin	0.018	0.001	0.001-0.19	8	0.001
trans-Chlordan	0.24	0.21	0.017-1.03	32	0.002
cis-Chlordan	0.55	0.60	0.013-1.39	32	0.001
trans-Nonachlor	0.39	0.38	0.001-1.59	31	0.001
cis-Nonachlor	0.05	0.04	0.002-0.16	24	0.002
Endosulfan I	3.8	3.1	0.11-14.1	32	0.004
Endosulfan II	0.083	0.003	0.006-0.62	10	0.006
Endosulfan sulfat	0.090	0.002	0.005-0.97	8	0.005
o,p'-DDE	0.029	0.007	0.001-0.170	16	0.001
p,p'-DDE	2.7	0.42	0.073-24	32	0.002
o,p'-DDD	0.30	0.064	0.001-6.2	28	0.001
p,p'-DDD	0.32	0.063	0.001-6.2	29	0.001
o,p'-DDT	0.30	0.169	0.001-4.0	30	0.001
p,p'-DDT	0.51	0.22	0.003-5.8	34	0.003
Endrin keton	ND	ND	ND	0	0.003
Metoxychlor	ND	ND	ND	0	0.003

Tabel 1. Middel- og median-koncentrationer, koncentrationsområde (pgm³), antallet af prøver over detektionsgrænsen samt metodens detektionsgrænse (DG) for forbindelser målt fra 2008 til 2010 på Villum Research Station, Station Nord. Prøver under detektionsgrænsen blev sat en halv gang detektionsgrænsen for beregning af middelværdier.

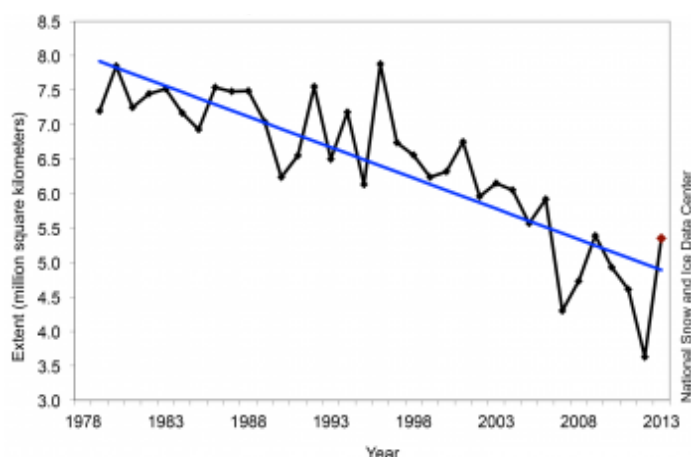
mod koldere egne. Til sidst nedbrydes de eller deponeres i kryosfæren (figur 1). Spørgsmålet er, hvad der sker med POPs, der tidligere er afsat og bundet i kryosfæren, når permafrosten og gletsjere begynder at tø, som det vi oplever pga. den globale opvarmning.

Arktis opvarmes mere end dobbelt så hurtigt i forhold til gennemsnittet af resten af verden [1,3,4]. Som konsekvens heraf tør områder med permafrost, gletsjere og havis med stor hastighed. Således er mere end 50% af sommerisen i Arktis forsvundet de sidste 35 år (figur 2) og de fysiske, kemiske og biologiske forhold ændres drastisk i Arktis [1,4].

Organo-klorerede POP's i atmosfæren

På Villum Research Station, Station Nord, har vi målt koncentrationen af udvalgte organo-klorerede POPs i atmosfæren fra 2008 til 2010 [2]. Stofferne er udvalgt, fordi de er fundet i skadelige niveauer i specielt havpattedyr [5], og fordi de er listet i Stockholm Konventionen (<http://chm.pops.int>) som stoffer, der er forbudt eller hvor brugen er stærkt begrænset. Således viser emissionsopgørelser, at f.eks. emissionen af α -HCH er faldet drastisk og i dag er stort set 0.

Alligevel finder vi stadig α -HCH i Arktis, se tabel 1 for en sammenfatning af målte koncentrationer af POP's. Ydermere



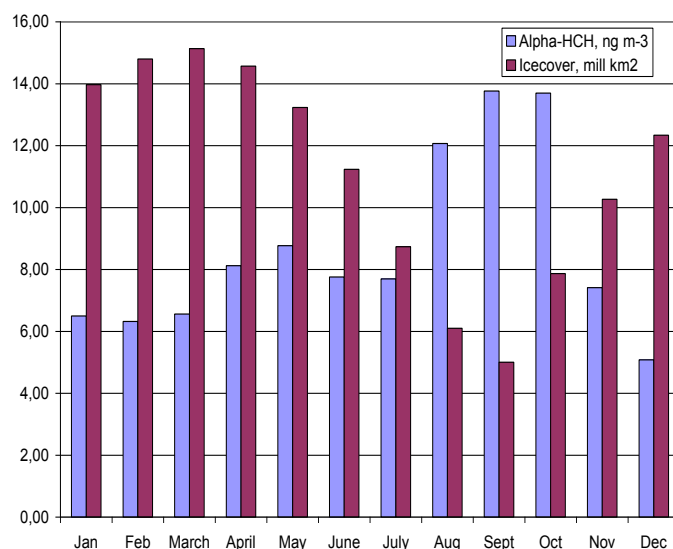
Figur 2. Udviklingen af arealet af sommerisen i Arktis fra 1979 til 2013, se <http://nsidc.org>.

finder vi, at α -HCH har en klar negativ korrelation med arealet af havisdækket (figur 2), og at den følger Clausius-Clapeyrons ligning, hvor logaritmen til koncentrationen er lineært negativt korreleret med den inverse temperatur. Således er de højeste koncentrationer fundet om sommeren og de laveste om vinteren. Dette er modsat POPs, der stadig er i brug, her er de højeste koncentrationer om vinteren pga. langtransport fra kildeområder længere mod syd. Resultaterne af korrelationsanalyserne for udvalgte stoffer er sammenholdt i tabel 2. For en mere detaljeret diskussion af resultaterne henviser vi til [2].

Resultater

Undersøgelsen viser, at sammenhængen mellem atmosfæriske koncentrationer og temperatur er ikke signifikant for endosulfan, γ -HCH og p, p'-DDT, hvilket angiver overvægt af transporten fra primære kilder snarere end fordampning fra

Vi henviser til Bossi et al. 2013 [2] for yderligere diskussion og præsentation af data.



Figur 3. Månedens midlet sæsonvariation af α -HCH i ng m^{-3} for 2008 til 2010 målt på Villum Research Station og isdække i mio. km^2 . Isdata er fra <http://nsidc.org>.

Taksigelse

Miljøstyrelsen takkes for støtte til dette projekt via DANCEA Fonden for miljøstøtte til den arktiske region. Resultaterne og konklusionen repræsenterer ikke nødvendigvis Miljøstyrelsens holdninger. Det Danske Luftvåben takkes for dets hjælp med infrastruktur og hjælp på Stationen. Endelig takkes Villum Fonden for støtte til bygningen af en ny forskningsstation på Station Nord, Villum Research Station.

Compound	N	R ²	Sign.	R ²	Sign.
CC equation			Ice cover		
α-HCH	30	0.23	Yes	0.43	Yes
γ-HCH	30	0.02	No	0.07	No
Hexachlorobenzen	28	0.17	Yes	0.01	No
Heptachlor	26	0.52	Yes	0.16	Yes
Heptachlor Epoxid	30	0.35	Yes	0.23	Yes
Dieldrin	30	0.44	Yes	0.14	Yes
trans-Chlordan	30	0.14	Yes	0.01	No
cis-Chlordan	30	0.25	Yes	0.10	Yes
trans-Nonachlor	29	0.20	Yes	0.00	No
Endosulfan I	30	0.06	No	0.00	No
p,p'-DDE	30	0.04	No	0.03	No
p,p'-DDT	28	0.27	Yes	0.11	Yes

Tabel 2. Mulig korrelation mellem koncentrationen af POP's efter Clausius-Clapeyrons (CC) ligning og med havisdække. Vist er antallet af observationer N, Pearson korrelationskoefficient R² og om der er signifikans på 0,05 niveau ved brug af student t-test.

forureneede overflader for disse forbindelser. Dette er i overensstemmelse med det faktum, at mindst to af forbindelserne (endosulfan og DDT) stadig er i brug. γ -HCH er næsten udfaset på verdensplan, men en vis anvendelse af gamle lagre af lindan (γ -HCH) kan ikke udelukkes.

Resten af forbindelserne fulgte Clausius-Clapeyrons ligning, og de fleste af dem korrelerede negativt med havisarealet. Denne konstatering er meget vigtig, da det er en indikation for, at POPs fanget i eller under havisen vil blive frigivet i fremtiden, når havisarealet falder. Havis kan dog også betragtes som en repræsentant for alle frosne arealer i Arktis: is, gletsjere og permafrost (kryosfæren). Resultatet af denne undersøgelse kan derfor repræsentere et nyt problem, når bl.a. havis smelter.

E-mail:

Henrik Skov:hsk@dmu.dk

Referencer

1. ACIA Arctic Climate Impact Assessment, 2005; p 1042p
2. Bossi, R.; Skov, H. Environmental Science: Processes and Impact. 2013, DOI: 10.1039/C3EM00304C
3. IPCC Fourth Assessment Report; 2007.
4. IPCC Fifth assessment report; 2013.
5. Letcher, R.J. Bustnes, J.O. Dietz, R. Jenssen, B.M. Jørgensen, E.H. Sonne, C. Verreault, J. Vijayan M.M. and Gabrielsen, G.W. Sci. Total Environ., 2010, 408, 2295-3043.

Ultrafine partikler fra gasmotorer på danske kraftvarmeværker

Det er tidligere vist, at gasmotorer på danske kraftvarmeværker kan emitte overraskende mange ultrafine partikler.

Denne undersøgelse analyserer omfanget og årsagen til partikelemissionen fra gasmotorer på danske kraftvarmeværker.

Af Fuglsang, K.¹, Rosenørn, T.¹, Frederiksen, T.G.¹, Kristensen, P.G.², Jørgensen, L.², Andersen, S.D.², Larsen, K.³, Iversen, B.⁴, Norrby, T.⁵, Tang, J.⁶
¹FORCE Technology, ²Dansk Gasteknisk Center A/S, ³Bergen Engines Denmark A/S, ⁴Wärtsilä Danmark A/S, ⁵Statoil Fuel & Retail Sweden AB, ⁶Dansk Fjernvarme

Der er i disse år stor fokus på at reducere indholdet af sundhedsskadelige partikler i udeluften. Reguleringen retter sig i stigende grad mod ultrafine partikler. I takt med at den fælles-europæiske regulering har haft succes med at reducere udledningen af disse skadelige partikler fra lette og tunge køretøjer på vejene, udgør bidraget af partikler fra stationære kilder i nærområder en stigende andel af indholdet af små og ultrafine partikler i udeluften i Danmark. FORCE Technology har i samarbejde med Dansk Gasteknisk Center (DGC) og Nationalt Center for Miljø og Energi ved Aarhus Universitet (DCE) tidligere undersøgt emissionen af bl.a. ultrafine partikler fra danske kraftvarmeværker. Der findes omkring 300 kraftvarmeværker med fjernvarmeforsyning i Danmark, og ca. 200 af disse producerer el og varme med naturgasfyrede gasmotorer. Hertil kommer en række naturgasfyrede gasmotorer, der anvendes på private virksomheder, herunder gartnerier. Resultatet af den tidligere undersøgelse indikerede, at der fra gasmotorer kunne opstå emissioner af ultrafine partikler, som var højere end de emissioner, der blev målt i røggassen efter rensning fra affaldsforbrændingsanlæg og biomassefyrede anlæg [1]. På baggrund heraf blev der i 2010 iværksat et projekt med støtte fra Energinet.dk med det formål at undersøge nærmere, hvor stor partikelemissionen fra gasmotorer på repræsentative danske kraftvarmeværker er, og hvilke faktorer, der giver anledning til partikelemissionerne. Projektet blev gennemført af FORCE Technology, DGC, Bergen Engines Denmark A/S, Wärtsilä Danmark A/S, Statoil Fuel & Retail Sweden AB og Dansk Fjernvarme. Denne artikel opsummerer projektets væsentligste resultater.

Projektets primære formål

Det primære formål med projektet var at undersøge omfanget af, og årsagen til, partikelemissioner fra de gasmotorer, der typisk anvendes på danske kraftvarmeværker. Fem danske gasmotoranlæg blev udvalgt ud fra motortype og størrelse, som værende repræsentative for danske, gasmotorfyrede kraftvarmeværker. Gennem et omfattende måleprogram på disse anlæg blev omfanget af partikelemissionen vurderet. Partiklerne blev vurderet ift. egenskaber og størrelse, og det blev vurderet, hvilke faktorer der kan påvirke partikeludslippet.

Måleprogram

Måleprogrammet omfattede i alt 7 feltmålinger foretaget i perioden 2011-2012 på fem danske kraftvarmeværker, som vist i tabel 1. En liste over værkernes motor- og smøremiddeltyper er vist i tabel 1.

Anlæg	Motor type (mærke)	El-effekt (kW)	Motorolie (mærke)
A	Wärtsilä 18V34SG	6074	Shell Mycella
B	RR type K	3118	Geotex PX40
C	RR type K	2066	Geotex PX40
D	Wärtsilä 18V34SG	4794	Mobil 805
E	RR type K	3271	Q8 Mahler

Tabel 1. Oversigt over de fem udvalgte kraftvarmeværker, deres motortyper og anvendte smøreolier.

Der blev gennemført en målekampagne på hvert af de nævnte anlæg for at undersøge variationen mellem gasmotorerne under normal drift. Disse målinger blev udført af FORCE Technology (FT) og DGC i tæt samarbejde med de enkelte værker. Tabel 2 opsummerer de parametre, der blev målt af hhv. FT og DGC i de enkelte kampagner. De anvendte målemetoder er ligeledes vist i tabel 2. Figur 1 viser målingen af ultrafine partikler i forbindelse med en af feltkampagnerne.



Figur 1. Måling af ultrafine partikler på et gasmotorfyret kraftvarmeværk.

Resultater og diskussion

Tabel 3 viser målte gennemsnitskoncentrationer af partikler i emissionen fra de fem gasmotorfyrede kraftvarmeværker under drift.

Test #	Anlæg	Partikel antal- og størrelsesfordeling	Partikel, flygtig andel	Olietåge	UHC	CO	NO _x	O ₂	Størrelsesopdelt elementar analyse	Olieanalyse	Røggas temperatur
		ELPI	TD-ELPI	Filter/XAD	FID	NDIR	CLD	ZrO ₂	SEM-EDX	AAS/ICP-MS	Thermocouple
1	A	FT	FT	DGC	DGC	DGC	DGC	DGC	FT	Statoil	DGC
2	A	-	-	FT/DGC	-	-	-	-	-	-	DGC
3	B	FT	FT	DGC	DGC	DGC	DGC	DGC	-	Statoil	DGC
4	C	FT	FT	DGC	DGC	DGC	DGC	DGC	-	Statoil	DGC
5	D	FT	FT	DGC	DGC	DGC	DGC	DGC	-	Statoil	DGC
6	E	FT	FT	DGC	DGC	DGC	DGC	DGC	FT	Statoil	DGC
7	E	FT	FT	FT/DGC	DGC	DGC	DGC	DGC	-	-	DGC

Tabel 2. Oversigt over anvendte målemetoder i de enkelte målekampagner. ELPI: Elektrical Low Pressure Impactor, TD: Thermodenuder, Filter/XAD: Kombination af opvarmet filter og absorptionsrør pakket med XAD ® polymer adsorbent, FID: flammeionisationsdetektor, NDIR: Non-dispersiv infrarød detektor, CLD: Chemiluminescence Detector, ZrO₂: Zirconium Oxide sensor, SEM: Scanning Electron Microscope, EDX: Energi-røntgenfluorescens spektroskopi, AAS/ICP-MS: atomabsorptionsspektroskopi /Ion Coupled Plasma - massespektroskopi. FT/DGC angiver om målingen er udført af FORCE Technology eller DGC.

Anlæg	Motor type (mærke)	Motor effekt (kW)	PN ₁ (#/cm ³)	Flygtig andel, PN ₁ (ved brug af TD)	PM ₁ (mg/m ³)	Flygtig andel, PM ₁ (ved brug af TD)	Olieforbrug (g/kWh)
A	Wärtsilä 18V34SG	6074	1.66E+06	61%	0.365	26%	0.160
B	RR type K	3118	1.99E+06	75%	0.716	57%	0.107
C	RR type K	2066	1.49E+06	84%	0.186	37%	0.409
D	Wärtsilä 18V34SG	4794	1.96E+07	54%	2.082	32%	0.146
E	RR type K	3271	1.31E+06	52%	0.166	39%	0.080

Tabel 3. Målte koncentrationer af partikelantal og -masse i emissionen fra de fem gasmotorfyrede kraftvarmeværker. Anlæggenes motortype, smørelie type og motorlast under drift er vist sammen med olieforbruget, oplyst af de enkelte anlæg.

Dräger

Sikkert gennem labyrinten af farlige stoffer



Let antændelige stoffer

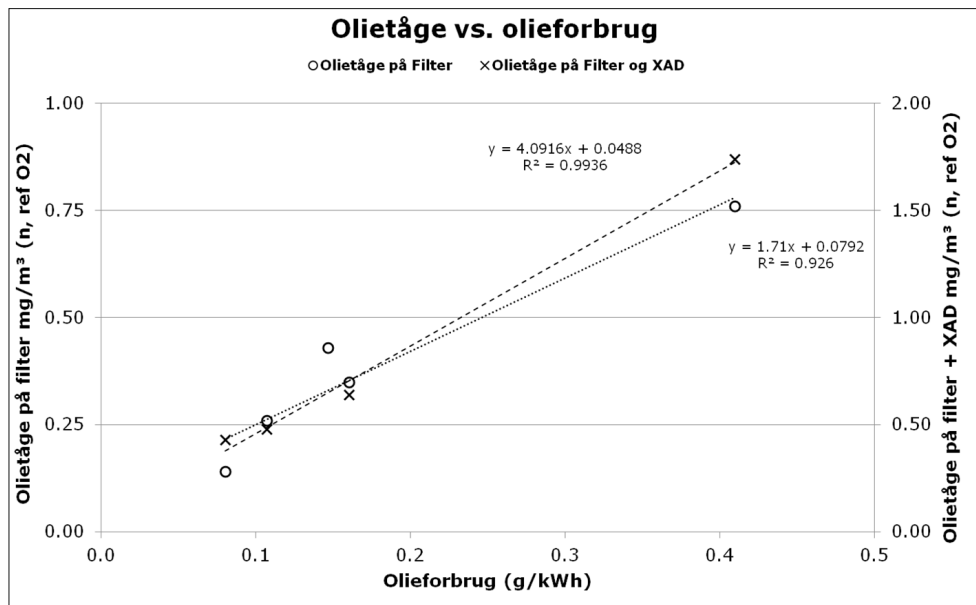
Arbejde med farlige stoffer kræver den største opmærksomhed. Dette skilt gør opmærksom på let antændelige stoffer. Dräger tilbyder løsninger indenfor bærbar gasdetektion, stationær gasdetektion samt flugtapparater.

Benyt dig af vores mangeårige erfaring indenfor området sikkerhed på arbejdspladsen!

www.draeger.dk

Dräger. Teknik for Livet.

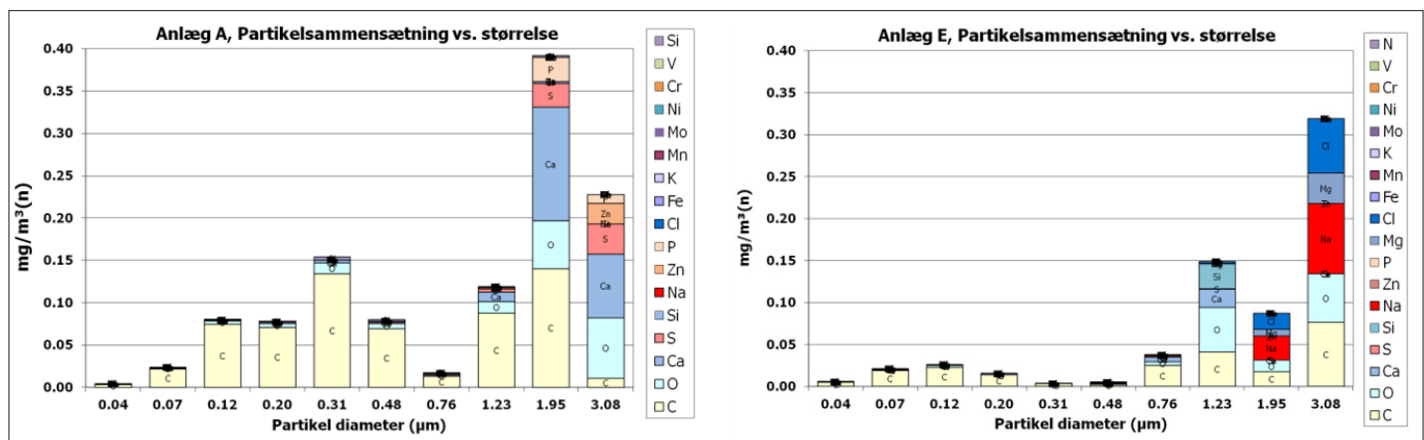




Figur 2. Den målte emissionskoncentration af oletåge som funktion af motorens samlede forbrug af smøreolie. De åbne cirkler angiver resultater, hvor kun måletallet fra filterprøverne er inkluderet, krydserne viser summen af filterprøver og gasformig fraktion (XAD-kolonne).

Ud fra resultaterne i tabel 3 kan der ikke påvises nogen sammenhæng mellem motortype og olieforbrug. Dette stemmer overens med resultatet af en større spørgeskemaundersøgelse, som Dansk Fjernvarme har gennemført i forbindelse med projektet. Undersøgelsen omfattede en opgørelse af olieforbrug

er derfor undersøgt ift. en analyse af metaller i den anvendte smøreolie. Figur 3 viser resultatet af en EDX-analyse af partikelfraktioner i området fra 0,04 µm og op til 3,0 µm. Analysen er foretaget på prøver fra to forskellige kraftvarmeværker (anlæg A og E). Det er her tydeligt, at de primære bestanddele



Figur 3. Resultatet af en grundstofanalyse udført ved EDX af forskellige partikelstørrelsesfraktioner. Partiklerne er opsamlet vha. en kaskadeimpaktor (ELPI) på to af de fem undersøgte gasmotorer.

og -type fra ca. 100 gasmotorer. Der synes heller ikke at være nogen sammenhæng mellem motortype og emissionen af partikelmasse, partikelantal, eller indholdet af olie i de emitterede partikler.

Resultatet af målingerne af koncentrationen af oletåge er vist i figur 2 som funktion af den enkelte motors olieforbrug. Oletågemålingen omfatter dels den del af olien, der er på dråbeform (opsamlet på filter), og den gasformige del af oliekomponenterne i røggassen (opsamlet på polymeradsorbenten XAD). Emissionen af oletåge stammer fra den anvendte smøreolie, som ikke når at blive fuldstændigt forbrændt i motorens forbrændingskammer. Der ses her at være en klar korrelation: Jo højere olieforbrug motoren har, jo højere er koncentrationen af oletåge i udstødningsgassen fra motoren. Det skal bemærkes, at de målte koncentrationer af oletåge er betydeligt lavere end de koncentrationer af oletåge, der blev fundet fra gasmoto-

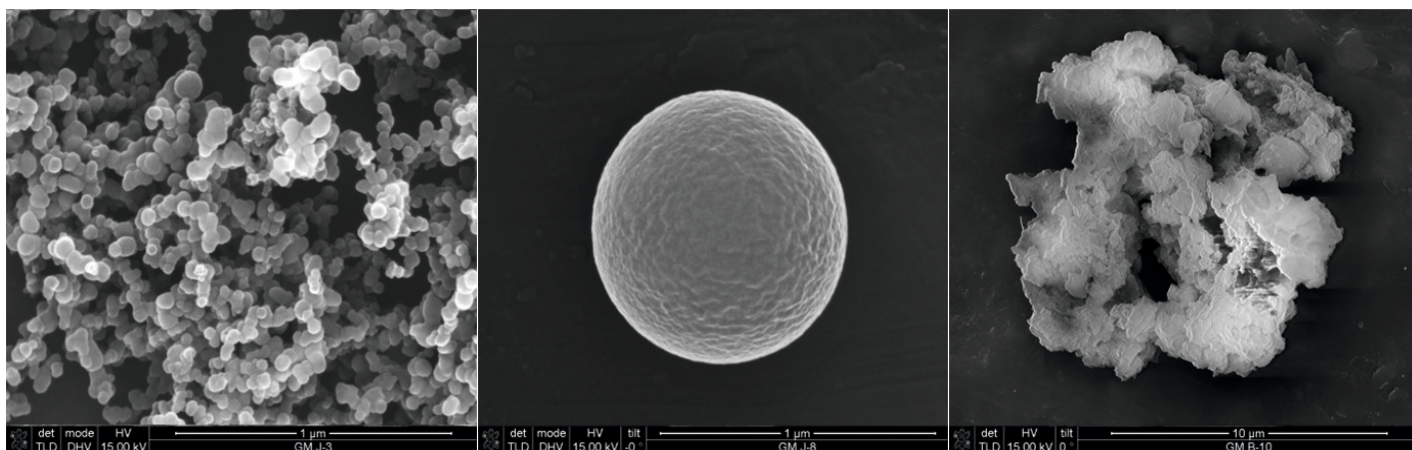
af de mindste partikler (< 0,5 µm) er kulstof, og i mindre grad ilt. Denne fraktion udgøres af sodpartikler, der primært består af elementar carbon (EC) og med en vis andel af oxiderede organiske forbindelser. For de større partikler (> 1 µm) ses det, at der optræder signifikante mængder af calcium, zink og magnesium. Disse stoffer kan korreleres direkte med forekomsten af Ca, Zn og Mn i smøreolien. At der tillige optræder natrium og chlor i partiklerne fra anlæg E, og ikke i partiklerne fra anlæg A, tilskrives at anlæg E ligger i et kystnært område, som påvirkes af saltholdige partikler. Disse partikler trækkes ind i motoren via forbrændingsluften. Da anlæg A ligger væsentlig længere fra kysten, vil denne effekt ikke ses i samme grad på anlæg A.

Figur 4 viser eksempler på partiklernes morfologi, analyseret vha. scanning elektronmikroskopi (SEM). Det er tydeligt, at der er tale om partikler opstået ved helt forskellige dannelses-

rer på danske kraftvarmeværker i en undersøgelse fra 2001 [2].

Vha. en thermodenuder (TD vist i tabel 2) blev partiklerne varmet op til 300°C og ført gennem en absorptionsenhed inden måling i partikeltælleren (ELPI). Herved kunne det måles, hvor stor en andel af partiklerne, der bestod af flygtige forbindelser. Det viste sig, at 50-80% af partikelantallet bestod af flygtige partikler. Omregnet til masse (PM₁₀) var andelen af flygtige partikler 30-60%. Det antages, at den flygtige andel af partiklerne udgøres af mere eller mindre uforbrændte smøreoliepartikler.

Typen og mængden af additiver i smøreolien oplyses ikke af producenterne, og det var derfor ikke muligt at korrelere måleresultaterne med specifikke additiver. Additiverne består bl.a. af en række organiske forbindelser og metaller (især calcium, zink, barium, magnesium) samt fosfor og svovl. Partiklernes sammensætning



Figur 4. SEM-billeder af partikler opsamlet på anlæg A. Det venstre billede viser sodpartikler, der er dannet ud fra enkeltpartikler med en diameter på 40-60 nm. Det midterste billede viser en stor, sfærisk partikel med en diameter på omkring 1 μm - formodentlig dannet ud fra små smøreliedråber i forbrændingskammeret. Det højre billede viser en irregulær partikel opsamlet på anlæg E, der formodentlig består af NaCl og oxiderede metaller hidrørende fra mekanisk slid i motoren.

mekanismer. Billedet længst til venstre viser små sodpartikler, der som nævnt oven for har et meget højt indhold af kulstof. Det midterste billede viser en meget stor partikel, som formodes at stamme fra en forbrænding af oliedråber afrevet fra stem-pelvæggen i motorens forbrændingskammer. Det højre billede viser en irregulær partikel opsamlet på anlæg E, der formodentlig består af NaCl og muligvis en kerne af oxiderede metaller hidrørende fra mekanisk slid i motoren.

Partikelemissioner ved forskellige motorindstillinger

For at undersøge, hvad typiske motorindstillinger betyder for partikelemissionen, blev der på anlæg E udført en række forsøg, dels hvor motorens luftoverskud (λ) blev ændret, og dels hvor motorens tændingsvinkel blev ændret. En ændring af λ vil – ligesom en ændring af tændingsvinklen – ændre NO_x -koncentrationen, og det var formålet at undersøge, hvordan en ►

Nyt lovkrav -1. januar 2014
Alle optiske alarmgivere i ABA-anlæg skal være EN-54-23 certificeret jf. DBI.

Er du klar til EN54-23?

Verdens førende producent af alarm-udstyr, Pfannenberg, introducerer nu advarselsblink og -sirener, som er certificerede i overensstemmelse med -

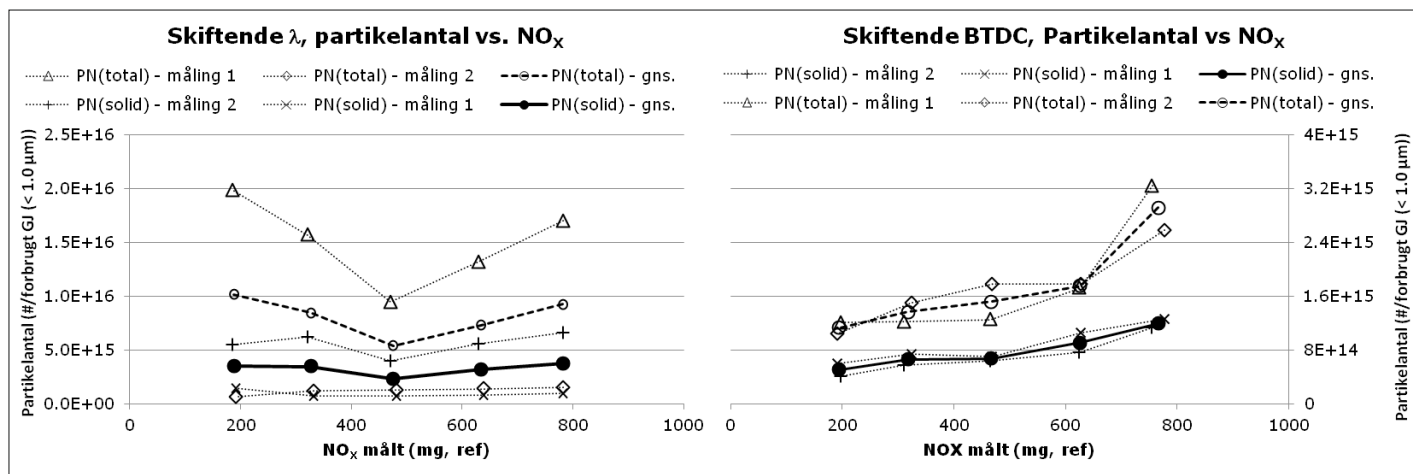
EN 54-23, EN 54-3 og VdS, og overholder standarder gældende i hele Europa fra 2014.

- Kontakt os for mere information eller læs mere på gas.dk...



Gas Detect





Figur 5. Partikelantallet som funktion af NO_x -koncentrationen fra en gasmotor på kraftvarmeværk E. I venstre plot ændres NO_x -koncentrationen ved at variere luft/brændstof-forholdet. I det højre plot indstilles NO_x -koncentrationen ved at variere tændingsvinklen.

ændring af NO_x -emissionen ville påvirke partikelemissionen. Figur 5 viser gennemsnittet af to identiske forsøgsrækker, hvor partikelantallet i udstødningen er målt som funktion af NO_x -koncentrationen. Den stiplede linje viser summen af faste og flygtige (olie) partikler (PN(total)), og den sammenhængende linje viser koncentrationen af de faste partikler (PN(solid)).

Det er tydeligt, at der er en signifikant stigning i partikelkoncentrationen, når NO_x -koncentrationen øges ved ændring af tændingsvinklen, men at denne stigning ikke forekommer i samme grad, når NO_x -stigningen styres ved ændring af λ . Dette er en vigtig information i forbindelse med begrænsning af partikelemissioner. En ændring af tændingsvinklen, der halverer NO_x -koncentrationen fra en gasmotors normale driftspunkt vurderes jf. figur 5 at medføre en halvering af partikelemissionen. Dette vurderes at koste op til 1% point elvirkningsgrad. Trods et tab i elvirkningsgraden er der for kraftvarmeværkerne et incitament til at reducere NO_x -emissionen ved at ændre tændingsvinklen på gasmotorerne, idet tabet i elvirkningsgrad udlignes af en reduceret NO_x -afgift. Ved ændring af tændingsvinklen har anlæggene således mulighed for både at opnå en NO_x -reduktion og en reduktion i partikelemissionen.

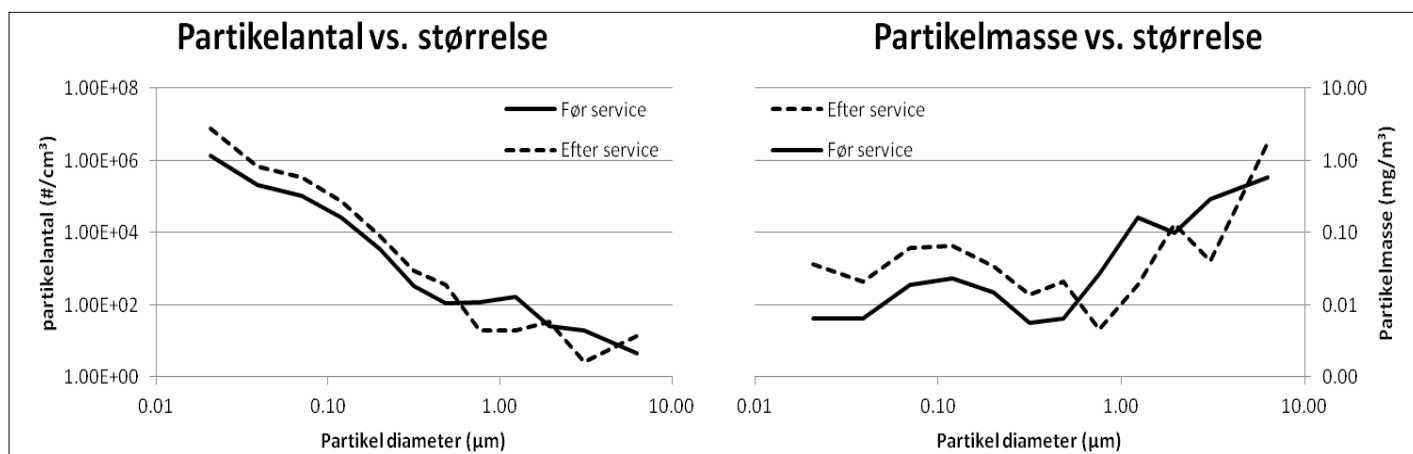
stempelringe og foringer. Målingen efter service blev først udført efter cirka 500 driftstimer for at sikre, at udskiftede reservedele var kørt ind og motorens drift dermed stabiliseret. Det totale partikelantal fra motoren øgedes fra $1,31 \cdot 10^6$ partikler/ cm^3 før service til $8,81 \cdot 10^6$ partikler/ cm^3 efter service, og massekoncentrationen (PM_{10}) steg fra $0,17 \text{ mg/m}^3$ før service til $0,26 \text{ mg/m}^3$ efter service. På trods af at disse tal er markant forskellige, er de begge inden for de koncentrationsområder, der observeres under normal drift af gasmotorer undersøgt i dette arbejde.

Figur 6 viser den gennemsnitlige partikelstørrelsesfordeling hhv. før og efter service på motoren.

Som det ses på figur 6, er der ikke stor forskel i partikelstørrelsespopulationer før og efter den udførte service på motoren. Der synes dog at være en svag tendens til, at der opstår lidt færre store partikler ($> 0,75 \mu\text{m}$) og lidt flere små partikler ($< 0,75 \mu\text{m}$), efter at der er udført service på motoren.

Beregning af emissionsfaktorer

Den samlede emission af partikler er beregnet ud fra de målte koncentrationer og ud fra det aktuelle røggasflow. Emissionerne er i tabel 4 omregnet til emissionsfaktorer for PN_1 , PM_{10} , NO_x



Figur 6. Partikelantal og masse målt som funktion af partikelstørrelse før og efter udførelsen af en omfattende service på motoren.

Partikelemissioner før og efter udførelse af service på gasmotoren

På et af de fem anlæg blev der udført en målekampagne før og efter, at der blevet udført en omfattende service på motoren. Denne service, der bliver udført af motorleverandøren efter 25.000 timers driftstid, omfatter bl.a. udskiftning af motorens

og UHC baseret på den indfyrede energimængde. Beregningsmetoden følger den metode, der er anvendt i tidligere emissionsopgørelser [3]. De viste emissionsfaktorer for NO_x og UHC stemmer overens med de emissionsfaktorer, der er bestemt for danske gasfyrede kraftvarmeværker i forbindelse med tidligere undersøgelser [3].

Anlæg	PN ₁ (#/GJ indfyret)	PM ₁ (mg/GJ indfyret)	NO _x (g/GJ indfyret)	UHC (gC/GJ indfyret)	Energieffektivitet (GJ produceret/GJ indfyret)
A	5.78E+14	127	103	319	43%
B	6.97E+14	252	160	480	42%
C	5.20E+14	65	165	572	41%
D	6.84E+15	726	191	357	41%
E	4.57E+14	58	138	501	40%
Gennemsnit (Ekskl. D)	5.63E+14	125	141	468	42%

Tabel 4. Beregnede emissionsfaktorer for partikelantal (PN₁), partikelmasse (PM₁), NO_x og UHC på de fem gasmotorfyrede kraftvarmeværker. Resultater fra anlæg D er udeladt i det beregnede gennemsnit, da motorens drift på anlæg D viste sig at være ustabil og derfor ikke repræsentativ.

Tabel 5 sammenligner de beregnede emissionsfaktorer for PN₁ og PM₁ med en tidligere undersøgelse udført af DCE, DGC og FORCE [3].

Tabel 5 viser, at emissionsfaktoren under normale driftsforhold varierer relativt lidt fra anlæg til anlæg. Samtidig viser

vinklen, er der mulighed for at opnå en samtidig reduktion i partikelemissionen.

	Antal anlæg	Partikel antal (#/GJ indfyret)	RSA	Partikel masse (g/GJ indfyret)	RSA	Reference
Gennemsnit, dette studie (Ekskl. D)	4	5.6E+14	18.00%	0.125	72.00%	Dette studie
Gasfyret anlæg (naturgas)	1	1.6E+16	NA	2.618	NA	(DMU RAPPORT)
Gasfyret anlæg under opstart (naturgas)	1	4.1E+17	NA	13.694	NA	(DMU RAPPORT)
Gasfyret anlæg (deponigas)	1	1.6E+13	NA	0.012	NA	(DMU RAPPORT)
Dieselfyret anlæg	1	2.4E+14	NA	0.173	NA	(DMU RAPPORT)
Biomasseanlæg med posefilter	1	5.4E+13	NA	0.119	NA	(DMU RAPPORT)
Biomasseanlæg med elektrostatisk udfælder	1	3.2E+14	NA	0.811	NA	(DMU RAPPORT)
Affaldsforbrænding med posefilter	1	3.6E+12	NA	0.251	NA	(DMU RAPPORT)
Affaldsforbrænding med elektrostatisk udfælder	1	2.3E+13	NA	0.053	NA	(DMU RAPPORT)

Tabel 5. Sammenligning mellem emissionsfaktorer bestemt for partikelantal (PN₁) og partikelmasse (PM₁) i denne undersøgelse og tidligere bestemte emissionsfaktorer fra en række forskellige typer.

resultaterne, at der - som vist for anlæg D i tabel 4 - kan opstå en signifikant højere partikelemission under uregelmæssig drift. Denne undersøgelse har fokuseret på emissioner under normal motordrift. Tidligere undersøgelser har som det fremgår af tabel 5 desuden vist, at opstart af gasmotoren kan give kortvarige men høje partikkelkoncentrationer, såvel målt som partikelantal som -masse.

Konklusion

Undersøgelsen viser, at gasmotorer på danske kraftvarmeværker under normal drift giver anledning til partikelemissioner, der er af samme størrelsesorden som affaldsforbrændingsanlæg eller biomassefyrede kraftvarmeværker, der er forsynet med velfungerende filterteknologier. Under uregelmæssig drift, eller under opstart, vil der kunne opstå højere partikelemissioner. Det skal dog i den forbindelse nævnes at gasmotorer, grundet deres status som relativt rene kraftværker, ofte ligger i byområder og ikke nødvendigvis har samme skorstenshøjde som større energiproducerende anlæg. Der kunne ikke måles nogen sammenhæng mellem partikelemissionen fra motoren og motortypen (Bergen RR og Wärtsilä), smøreolietypen, og partikelemissionen var ikke væsentligt påvirket af, om der blev udført service på motoren.

En yderligere reduktion af partikelemissioner fra gasmotorer vil ud fra undersøgelsens resultater kunne opnås ved at reducere tændingsvinklen. Mange gasmotoranlæg er i gang med at reducere deres NO_x-emissioner pga. NO_x-afgiften. Da denne reduktion bl.a. foregår ved justering af tændings-

E-mail

Karsten Fuglsang: kfu@force.dk

Referencer:

1. Fuglsang m.fl. (2009). Måling og karakterisering af ultrafine partikler fra danske kraftvarmeværker. Dansk Kemi 91 (4), pp. 20-23.
2. Kortlægning af emissioner fra decentrale kraftvarmeværker (2003). Eltra projekt 3141, delrapport 4. Måleprogram og analyse af emissioner fra gasfyrede decentrale kraftvarmeværker < 25 MW_e.
3. Emissionskortlægning for decentral kraftvarme 2007 – Energinet.dk miljøprojekt nr. 07/1882. Delrapport 5. Emissionsfaktorer og emissionsopgørelse for decentral kraftvarme, 2006. Faglig rapport fra DMU nr. 781 2010.

Pipettecenteret

Kalibrering og service af alle fabrikater pipetter.

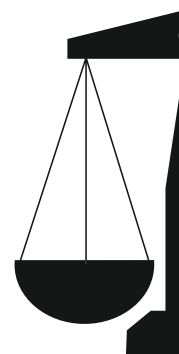
Vi kalibrerer både ved indsendelse eller på kundens adresse.

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



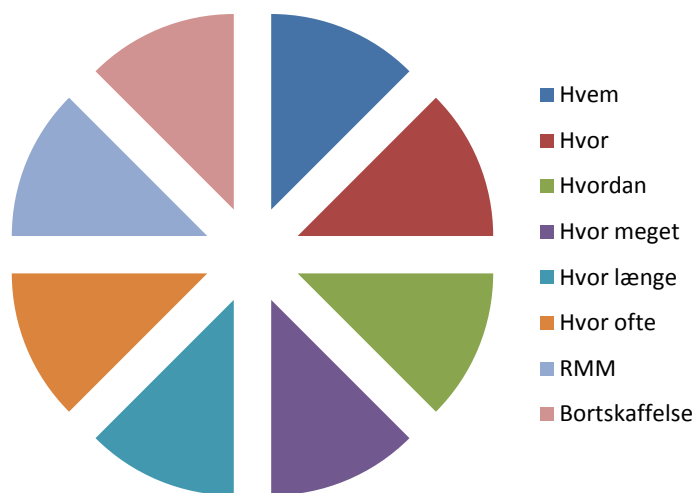
Eksponerings-hvaffornogenet?

Når der tales om eksponeringsscenarier, så får mange kemikalie-ansvarlige et tomt blik i øjnene. For det kræver en længere forklaring, at få overblik over de praktiske opgaver og konsekvenser i forbindelse med eksponeringsscenarierne. Her beskrives det praktiske arbejde som følger af eksponeringsscenarierne.

Af Lars Bugge, CHYMEIA ApS

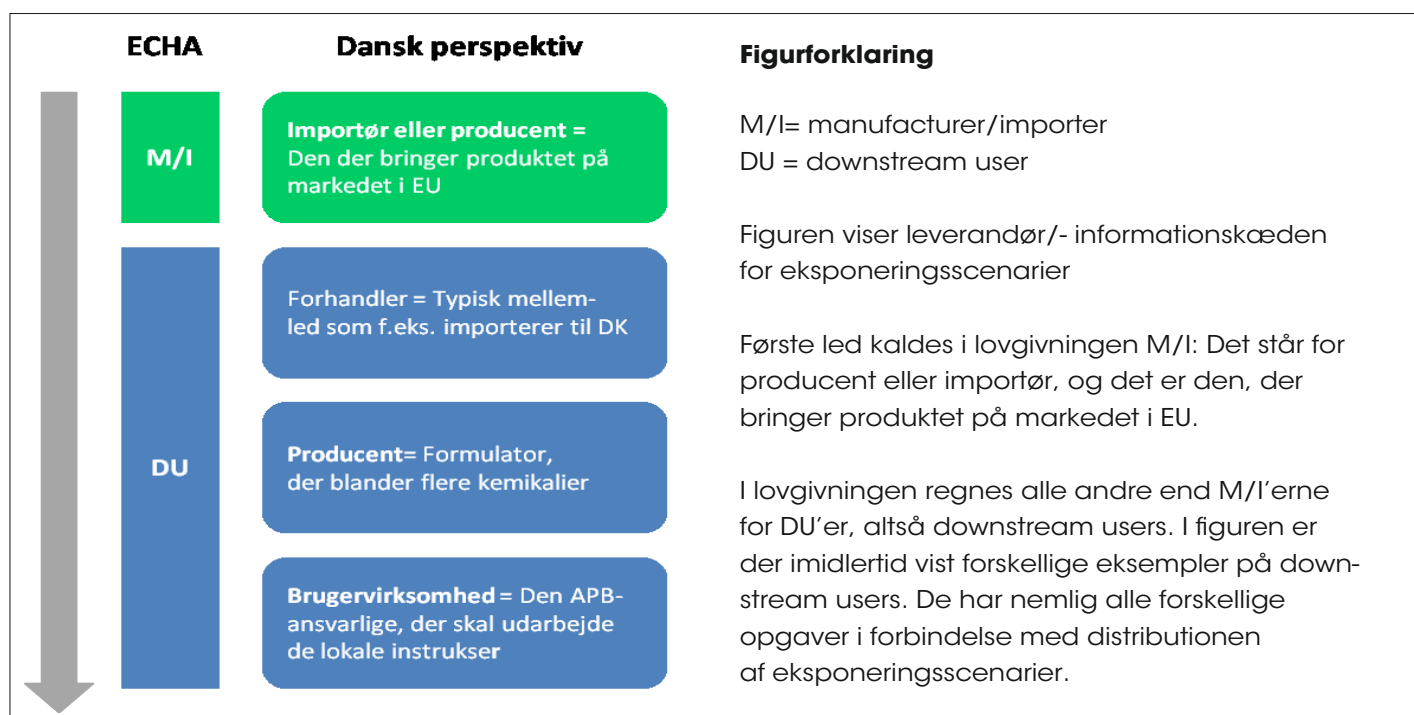
Mange har nok bemærket, at sikkerhedsdatabladene med tiden er blevet længere og længere. Et sikkerhedsdatablad (SDS) på 10-15 sider er dog stadig et meget langt SDS. Men hvis der følger eksponeringsscenarier med sikkerhedsdatabladet, så er et langt SDS pludselig på over 100 sider. Mange vil reagere med hovedrysten på sådan en informationsbombe. Det var jo besværligt nok i forvejen, så hvad er meningen? Meningen er god nok, selvom informationsmængden er overvældende. Sikkerhedsdatablade, som vi kender dem, beskriver, hvordan man beskytter sig generelt. Dvs. at uanset om man bruger 10 liter af et kemikalie 8 timer dagligt i et kosteskab uden udluftning, eller om man kun bruger 4 ml af kemikaliet en gang om året i et stinkskab, så er det de samme forholdsregler, der beskrives i SDS'et.

Den procedure bliver der lavet om på med de eksponeringsscenarier, som fremover skal følge med SDS'er for farlige kemikalier (hvis der produceres eller importeres mere end 10 tons af kemikaliet årligt). Eksponeringsscenarierne beskriver forskellige forholdsregler for forskellige anvendelser. Brugerne



Figur 1. Et eksponeringsscenarie beskriver anvendelse ift. følgende parametre (RMM = risikohåndteringsforanstaltninger).

kan således finde eksponeringsscenariet for deres anvendelse, og følge de præcise anvisninger for netop denne anvendelse.



Figur 2.

Use Descriptor-Systemet		
Forkortelse	Betydning	Eksempel
SU	Anvendelsessektor (Sector of Use)	SU21 = Anvendelse i private husholdninger
PC	Produktkategori (Product Category)	PC21 = Laboratoriekemikalier
Proc	Proceskategori (Process Category)	Proc 1 = Anvendelse i lukkede systemer
ERC	Miljøkategori (Environmental Release Cat.)	ERC9b = Udendørs anvendelse i lukkede systemer
AC1	Artikkelkategori (Article Category)	AC1 = Køretøjer og fartøjer

Leverandør- og informationskæden

For at forstå arbejdet med eksponeringsscenarier er det vigtigt at forstå hele leverandør-/informationskæden i kemikalielovgivningen, der vises i figur 2.

Informationsflowet går normalt fra producent/importør til slutbruger. Det gælder også for eksponeringsscenarierne. Men i den første fase af REACH skulle alle, der anvendte kemikalier, sende besked op gennem leverandør-/informationskæden. Brugere af kemikalierne skulle oplyse om deres anvendelser af kemikalierne til deres leverandør, som skulle give besked videre, indtil producenten/importøren havde et fuldt overblik over, hvad deres stof/kemikalie blev anvendt til hos slutbrugerne. Dette var det første led i processen mod eksponeringsscenarier. Her blev "identified uses" registreret.

Producenterne/importørerne skulle herefter i gang med at lave eksponeringsscenarier for alle disse identified uses. Producenterne/importørerne skulle vurdere kemikaliets sikkerhed (opbevaring, anvendelse og bortskaffelse) over hele dets levetid, for hver eneste anvendelse - med henblik på at styre/forhindre uønsket eksponering af mennesker og miljø.

Dette var/er et omfattende arbejde, som sker i en proces, der kaldes en CSA (Chemical Safety Assessment), dvs. en kemikaliesikkerhedsvurdering. Til sidst samledes det hele i en CSR (Chemical Safety Report) dvs. en kemikaliesikkerhedsrapport. Endelig formidles selve eksponeringsscenarierne som bilag til sikkerhedsdatabladet, som nu bliver til et udvidet sikkerhedsdatablad, et eSDS (extended SDS).

■ Hvor skal jeg henvende mig?

Har man spørgsmål omkring eksponeringsscenarier, skal disse rettes til Arbejdstilsynet, men der vil også være hjælp at hente i brancheforeningerne, eller man kan kontakte en kemikaliekonsulent.

Use Descriptor-Systemet

For at sikre en ensartethed i kommunikationen formidles de forskellige anvendelser i nogle overordnede kategorier. Det kaldes Use Descriptor-Systemet.

Det vil tage lidt tid at lære disse kategorier at kende, men de bliver vigtige for downstream-brugeren. Det er nemlig med udgangspunkt i disse kategorier, at de skal finde deres anvendelser, så de kan sikre sig, at deres brug er omfattet af eksponeringsscenariet.

Forpligtelser og opgaver for den typiske danske virksomhed

Langt de fleste danske virksomheder er downstream-brugere i fht. kemikalielovgivningen (REACH). Der er mange forskellige

typer af downstream-brugere. F.eks. forhandlere, producenter og slutbrugere. Men i lovgivningen skelner man ikke mellem de forskellige typer, selvom deres opgaver i forhold til eksponeringsscenarierne kan være forskellige. Helt overordnet har alle downstream-brugere dog de samme forpligtigelser:

1. De skal sikre sig, at deres anvendelse er dækket af eksponeringsscenariet.
2. De skal sikre sig, at de overholder anvisningerne i eksponeringsscenariet.
3. De skal videreformidle de relevante informationer fra eksponeringsscenariet.

Alligevel er konsekvenserne og opgaverne lidt forskellige for de tre typer af downstream brugere, som beskrevet i skemaet på side 28-29.

Forhandleren

For en forhandler, der importerer kemikalier fra et andet land i EU, er det enkelt at sikre sig, at retningslinjerne i eksponeringsscenariet overholdes. Forhandlerens eneste anvendelse af kemikaliet er således typisk opbevaring. Videreformidlingen kan derimod være lidt mere problematisk, for importøren skal sikre sig, at SDS og tilhørende eksponeringsscenarier (=eSDS) findes på det nationale sprog. Hvilket kan være lidt af en opgave for eSDS'er på 100 sider, hvis ens leverandør ikke kan hjælpe med en dansk udgave.

Producenten

Når man blander flere kemikalier (stoffer og råvarer) til et nyt produkt, så bliver det let en større opgave både, at sikre sig, at anvendelsen er omfattet og at videreformidle de relevante informationer.

Hvis der indgår 17 stoffer i en blanding, så skal alle tjekkes i forhold til den aktuelle anvendelse. Bagefter skal producenten ►

HIGH PERFORMANCE CRUSHING

RETSCH's new benchtop jaw crusher BB 50 reduces hard, brittle and tough samples with a feed size of up to 40 mm in one single operation to a final fineness of down to 0.5 mm!

SKANLAB

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

Retsch
Solutions in Milling & Sieving

Nyhed!



videresende relevant information, og det kan være sin sag med alt den bagvedliggende information, som 17 stoffer kan akkumulere. Der findes grundlæggende fire metoder til at løse denne opgave, de beskrives alle fire i skemaet på side 28-29.

Slutbrugervirksomheden

Slutbrugervirksomheden skal (som de andre led i kæden) sikre sig, at deres anvendelse er dækket af eksponeringsscenarioet. Selve videresendelsen af den viden, der er i eksponeringsscenarioet, skal ske via en arbejdspladsbrugsanvisning (APB). Den metode vi i Danmark bruger til at konkretisere informationerne fra sikkerhedsdatabladene for de medarbejdere, der skal bruge kemikalierne. Den APB-ansvarlige vil kunne finde vejledninger om den præcise anvendelse i eksponeringsscenarioet, og derved lettes arbejdet. Men der kan være lidt mere arbejde i at identificere de rigtige informationer.

Fremover vil det ikke være tilrådeligt at lave APB udarbejdet som et tillægssdatablad (som beskrevet i AT-vejledningen), hvis tillægssdatabladet skal hæftes sammen med et meget langt e-SDS. En sådan telefonbog af oplysninger kan sikkert virke afskrækkende på mange.

Hvis min anvendelse ikke er beskrevet i eksponeringsscenarioet

En af de centrale problemstillinger ved eksponeringsscenarierne opstår, når ens anvendelse ikke er dækket. Eksponeringsscenarier omfatter alle de identificerede anvendelser, men der kan være flere. Hvis virksomhedens anvendelse ikke er dækket af eksponeringsscenarioet, må man ikke anvende kemikaliet. I sådanne tilfælde har man følgende muligheder:

- 1. Undgå problemet:** Skaf informationen fra leverandøren.
- 2. Find et alternativ:** Substituer kemikaliet med et andet.
- 3. Lav jeres egen downstream CSR/eksponeringsscenario, medmindre I er omfattet af en undtagelse.** I så fald kan I nøjes med en anmeldelse til ECHA: Man vil være dæk-

Opgaver og forpligtelser ved distribution af eksponeringsscenarier

Hvem	Opgaver	Hvad betyder det konkret?
Producent eller importør = Den der bringer produktet på markedet i EU. (Forkortet: M/I)	CSA = Kemikalie-sikkerheds-vurdering CSR = Kemikalie-sikkerheds-rapport Eksponerings-scenarier(ES) Use Descriptor eSDS	Når et stof skal på markedet, så skal producenten/importøren lave en vurdering (CSA), der viser, at stoffet kan anvendes sikkert og hvordan. Det kræver ekspertviden og et større analysearbejde at gennemføre en CSA. Arbejdet omfatter bl.a. vurderinger af forskellige eksponeringer (jf. nedenfor) over kemikaliet levetid, dvs. før, under og efter brug. Vurderingen samles i en rapport (CSR). Ved opstarten af REACH blev alle virksomheder bedt om at sende informationer tilbage gennem leverandørkæden, og fortælle, hvad de anvender kemikalierne til = dette kaldes de identificerede anvendelser . Hver identificeret anvendelse udgør en specifik eksponering, og for hver identificeret anvendelse skal der udarbejdes retningslinjer for sikker anvendelse. De forskellige anvendelser, der behandles i et eksponeringsscenario, beskrives via nogle kode-grupper, som kaldes Use Descriptor. PC9c betyder f.eks. fingermaling. Selve formidlingen af eksponeringsscenarierne sker som bilag til sikkerhedsdatabladet, som derved bliver til et udvidet SDS eller eSDS (extended SDS).

ket af en undtagelse, hvis man anvender mindre end 1 ton om året, hvis kemikaliet er omfattet af REACH § 9 om produkt- og procesorienteret forskning og udvikling, eller hvis farligheden i forhold til koncentrationen betyder, at kemikaliet ikke skal oplyses. Selvom der skulle være en undtagelse, betyder det ikke, at kemikaliet kan anvendes uden værnemidler. Sikker anvendelse skal stadig beskrives i forbindelse med anmeldelsen til ECHA via REACH-IT.

4. Skalering: Nogle gange findes der også en mulighed i eksponeringsscenarioet for at lave skalering. Det betyder, at selvom jeres anvendelse ikke direkte er behandlet i eksponeringsscenarioet, så er der retningslinjer for, hvordan forholdsreglerne kan udvides til at omfatte andre anvendelser.

Status

Reglerne om udarbejdelse og formidling af eksponeringsscenarier trådte i kraft for flere år siden. Alligevel er der endnu kun



Softwareløsninger

Eksponeringsscenarierne betyder, at mange flere informationer skal bearbejdes, sendes rundt og oversættes. Derfor er mange på udkig efter løsninger, der kan gøre arbejdet lettere. De fleste avancerede SDS authoring løsninger kan i dag håndtere eksponeringsscenarier, men på brancheplan arbejder man på at gøre det endnu enklere. Det gør man bl.a. ved at lægge informationerne fra eksponeringsscenarierne ind i XML-kode, så de kan distribueres elektronisk sammen med sikkerhedsdatabladet. Herefter kan det hele hentes ind i ens SDS/APB authoring software, hvis det understøtter denne funktionalitet. Brancheforeningen for den europæiske kemikalieindustri Cefic har lanceret en sådan mulighed i deres *ESCom Standard* software, der kan downloades på deres hjemmeside.

Down-stream users (dvs. alle andre end den, der bringer produktet på markedet).		
Forhandler = Typisk mellemled som f.eks. importerer til DK	Tjekke og videreformidle ES	Forhandlerens skal sikre, at han overholder eksponeringsscenariet (typisk kun for opbevaring) samt videreformidle de relevante oplysninger.
	Sikre at eSDS findes på det lokale sprog	Hvis eksponeringsscenariet ikke findes på det lokale sprog, skal han sørge for en oversættelse.
Producent = Formulator, der blander flere kemikalier	Tjek for overensstemmelse med ES.	Producenten skal først og fremmest sikre, at de indgående kemiske stoffer anvendes sikkert/rigtigt. Dette gøres ved at kontrollere, at betingelserne for sikker anvendelse i eksponeringsscenariet er overholdt.
	Lav evt. downstream user CSR eller en anmeldelse.	Hvis producenten vil anvende stoffet til en anvendelse, som ikke er omfattet af eksponeringsscenarie, må de selv udarbejde et downstream CSR medmindre kemikaliet er omfattet af en undtagelse, og en anmeldelse er nok.
	Videreformidle oplysninger fra ES	<p>Producent blander flere indgående stoffer og råvarer til et nyt produkt. Producenten skal herefter videreformidle den relevante information fra alle de indgående eksponeringsscenarier. Den opgave kan løses på forskellige måder.</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Eksponeringsscenarier for alle indgående stoffer/råvarer kan vedhæftes SDS som bilag. Men det vil være noget farligt rod i mange tilfælde, og ifølge vejledningen fra ECHA bør det kun ske, hvis modtageren har forudsætninger for at afkode den tilsendte information. 2. Hvis den relevante information kan indarbejdes i SDS'et, så er det en mulighed. Der er således ikke noget krav om, at downstream brugeren skal sende et eksponeringsscenarie videre til slutbrugeren, hvis informationen kan formidles i et SDS. 3. Virksomheden kan også vælge at lave et konsolideret eksponeringsscenarie for blandingen, altså udarbejde et dokument, der sammenfatter alle de indgående eksponeringsscenarier i forhold til blandingen af disse. 4. I nogle tilfælde vil det også være en mulighed, at bruge et GES, altså et generisk eksponeringsscenarie udarbejdet på produktniveau - f.eks. af en brancheorganisation eller en leverandør. Altså et eksponeringsscenarie, der dækker over en bestemt produktgruppe til en bestemt anvendelse. Der findes pt. ikke mange af disse, men det kunne sagtens blive mere udbredt.
Brugervirksomhed = Den APB-ansvarlige	Tjek for overensstemmelse med ES.	Brugervirksomheden skal først sikre sig, at den anvendelse man bruger kemikaliet til i virksomheden er omfattet. Hvis det ikke er tilfældet, må man ikke bruge kemikaliet. I så fald skal man enten finde en anden leverandør, eller man må sende en forespørgsel (via sin leverandør) om at få den ønskede anvendelse vurderet og derefter medtaget.
	Præsenter info i en APB.	<p>Arbejdspladsbrugsanvisningen (APB) skal ikke længere "bare" udarbejdes på baggrund af oplysningerne i et SDS. Det skal udarbejdes konkret for netop den anvendelse (og dermed eksponering) der sker på virksomheden. Hvis der er to forskellige anvendelser, så skal man udarbejde to forskellige APB'er.</p> <p>APB'en skal helst ikke blive mere kompliceret end den er i dag. Derfor er det op til den APB ansvarlige, at udvælge de relevante informationer, og indarbejde disse i APB'en. Selve eSDS'et egner sig ikke til at blive præsenteret for brugeren af kemikaliet.</p>

få eksponeringsscenarier i omløb, og endnu færre, der ved, hvordan de skal håndtere dem.

Det skyldes bl.a., at myndighederne har lagt et meget lavt kontrolpres, men det skyldes i høj grad også opgavens kompleksitet. Producenten/importøren som skal skabe hele informationsgrundlaget for eksponeringsscenarierne, har haft en meget stor opgave med registrering m.m. Der har været eksempler på kemikaliesikkerhedsrapporter, der var på 800 sider. Derfor er der også et betydeligt arbejde i at uddrage de informationer, som skal overføres til eksponeringsscenarierne.

Samtidig har der været en læringsproces, hvor virksomhederne skulle lære eksponeringsscenarierne at kende som koncept, og få en forståelse af, hvad et eksponeringsscenarie bør (ikke bør) indeholde. Den proces er reelt stadig i gang. Opfyldelse af sprogkrav (oversættelse og udvikling af standardsætninger) har ligeledes givet forsinkelser.

Længere nede i oplysningskæden skal man også lære at håndtere oplysningerne. Man kan sige, at lovgivningen har mødt virkeligheden, og det tager tid, at indarbejde en så kompleks lovgivning, som samtidig er så omfangsrig på information.

I ECHA (EU's kemikalieagentur) er man bevidst om problemet, og man arbejder fortsat på at finde løsninger, der kan gøre arbejdet lettere. Men det er særligt brancheorganisationerne på EU-plan, der har arbejdet med at gøre lovgivningen praktisk håndterbar med værktøjer og vejledninger. Herhjemme er Kemi & LifeScience under Dansk Erhverv ved at udforme to pjecer med korte, konkrete og praktiske råd om kommunikation af eksponeringsscenarier i forsyningskæden og check af egne anvendelser.

Selvom eksponeringsscenarier stadig er lidt sjældne, så bliver de mere og mere udbredte. Når man modtager et eksponeringsscenarie har man 12 måneder til at agere på, indarbejde og formidle informationerne. Derfor skal man - før eller siden - sætte sig ind i reglerne og indarbejde en praktisk håndtering på arbejdspladserne.

E-mail
Lars Bugge: lb@chymeia.dk

Raman af hvide pigmenter

Et samspil mellem kunst og kemi. I et samarbejde mellem Statens Museum for Kunst og Kemisk Institut på KU er Ramanspektroskopi brugt til at definere sammensætningen af blandinger af blyhvidt og calcit i maleriers hvide pigmenter.

Af Nini E. A. Reeler*, Ole Faurskov Nielsen, Stephan P. A. Sauer, Henrik G. Kjaergaard, Kemisk Institut, Københavns Universitet og Niels Borring, Troels Filtenborg, Anna Vila, Jørgen Wadum, CATS og Bevaringsafdelingen, Statens Museum for Kunst

I 2008 påbegyndtes på Statens Museum for Kunst (SMK) en konservering og restaurering af Gottorfer Codex [1]. Codex betyder bog på latin, og Gottorfer Codex er en bog i 4 bind på i alt 365 sider, som indeholder 1180 illustrationer af blomster, buske og frugter. Hertug Frederik III af Slesvig-Holsten-Gottorp

(1597-1659) hyrede, fra 1649 til 1659, blomstermaleren Hans Simon Holtzbecker (1610/20-1671) til at male de mange smukke blomster fra Gottorp Slotshave. Gottorfer Codex har således fået navn efter oprindelsesstedet for blomsterne og planterne. Der optræder fra et til ti motiver på hver side. Alle malerierne er malet på kalvepergament med gouachefarve, hvis farvestyrke er enestående godt bevaret. Gottorfer Codex befinder sig nu på SMK, hvor det er registreret som "krigsbytte, 1749", fordi det sammen med biblioteket på Gottorp Slot blev hjembragt til København efter sejren i Store Nordiske Krig (1700-1721).

Inden konservering af pergamentbladene og restaureringen af farvelagene kunne starte, var det for konservatorerne på SMK vigtigt at vide, om det hvide pigment, der var strøget over pergamentet som malebund, indeholdt blyhvidt eller calcit. Da blyhvidt som pigment $[2\text{PbCO}_3 \cdot \text{Pb}(\text{OH})_2]$ er meget giftigt, kunne det nemlig betyde, at dele af behandlingen af værkerne af helbredsmæssige grunde skulle foregå med ansigtsbeskyttelse og udsugning!

Derfor henvendte konservatorerne sig til Kemisk Institut, (KI) på Københavns Universitet (KU), med spørgsmålet, om man kunne hjælpe med at fastslå, om der var blyhvidt til stede.

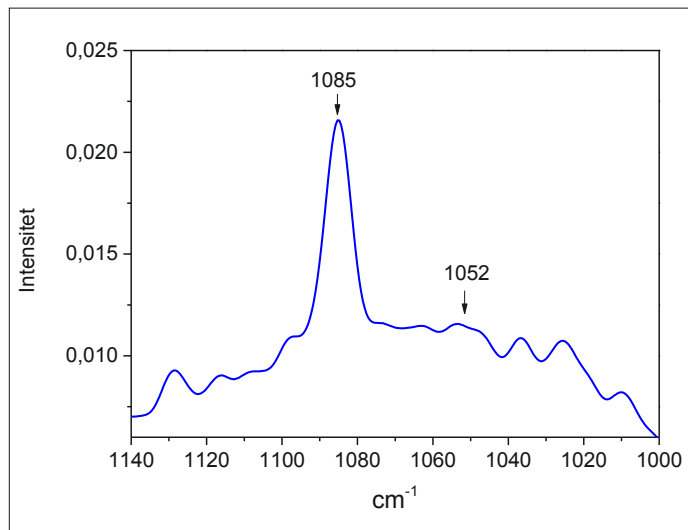
Ramanspektroskopi er i dag en meget anvendt metode til at analysere den kemiske struktur af pigmenter i kunstværker. Det ideelle ville have været at undersøge bogsiderne direkte med Raman på KI. Desværre er instrumentet ikke flytbart, og det er ikke tilladt at fjerne bøgerne fra SMK.



Figur 1. Gottorfer Codex, blad 1 i bind 2, med blomsterne: rundbladet stenbræk, skygge-stenbræk, porcelænsblomst (KKSgb2948-01).

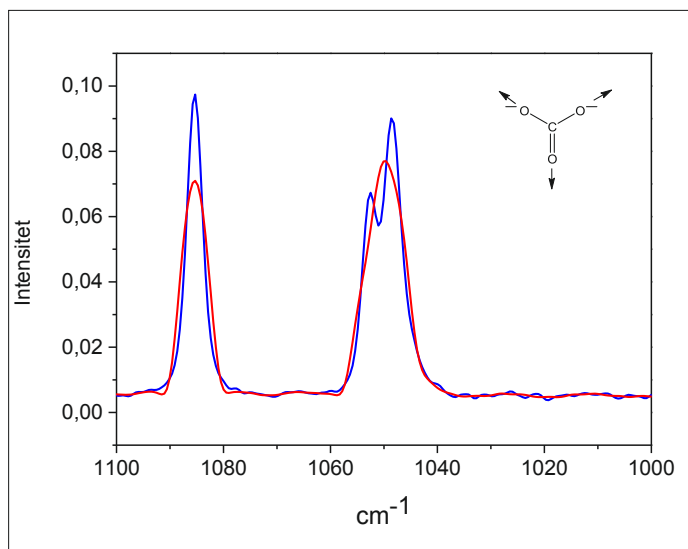
Gottorfer Codex

En prøve på mindre end 1 mm² blev derfor udtaget med en skalpel fra et ikke farvet område af bogsiden fra Gottorfer Codex vist i figur 1. Ramanspektret blev optaget gennem et mikroskop med et 10x objektiv på Ramaninstrumentet på KI, tidligere beskrevet i Dansk Kemi [2,3].



Figur 2. Ramanspektrum af en prøve fra Gottorfer Codex.

I figur 2 ses båndet ved 1085 cm⁻¹ fra CO₃²⁻ i calcit. De ”bølger”, der ses i spektret, skyldes, at selve Ramanspektret er af dårlig kvalitet og svarer til støj i spektret. Desværre destrueres prøven ved længere tids optagelse, så et spektrum med et bedre signal/støj-forhold kunne ikke opnås. ”Bølgen” ved 1052 cm⁻¹ kunne stamme fra CO₃²⁻ i en mindre forekomst af blyhvidt. Intensiteten er ikke kraftigere end for nærliggende områder. Derfor konkluderedes det, at mængden af blyhvidt var meget lille, og det var ikke nødvendigt at anvende beskyttelsesmasker, man kunne nøjes med effektivt udsug ved restaureringen af bogsiderne i Gottorfer Codex. Restaureringen er nu overstået, og resultatet vist på SMK's nylige udstilling ”Blomster og Verdenssyn” [4].



Figur 3. Ramanspektrum af en blanding af calcit og blyhvidt. Den symmetriske strækningsvibration af CO₃²⁻ for calcit ved 1085 cm⁻¹ og blyhvidt ved 1052 cm⁻¹. Spektralopløsning 1 cm⁻¹ (blå kurve) og 4 cm⁻¹ (rød kurve).

Raman af blyhvidt- og calcit-blandinger

Imidlertid blev der også fra malerikonservatorernes side på SMK rejst interesse for mere kvantitativt at analysere indhold af calcit og blyhvidt i maleriers hvide pigmenter. I malerier findes der i den hvide farve ofte en blanding af blyhvidt og calcit, og man ville gerne vide, om Ramanspektroskopi kunne bruges til at definere sammensætningen af blandinger af disse pigmenter og fyldstoffer. Et Ramanspektrum af en blanding af calcit og blyhvidt ses i figur 3. Den symmetriske strækningsvibration i CO₃²⁻ ses pga. krystaleffekter ved lidt forskellige bølgetal (cm⁻¹). For calcit, CaCO₃, ses båndet ved 1085 cm⁻¹ og ved ca. 1052 cm⁻¹ for blyhvidt, 2 PbCO₃·Pb(OH)₂. Ved ca. 1052 cm⁻¹ findes imidlertid også bånd fra andre hvide pigmenter indeholdende CO₃²⁻-ioner. Det gælder cerussit, PbCO₃, og plumbonacrit, 3 PbCO₃·Pb(OH)₂·PbO [5]. Krystaleffekter gør også, at den symmetriske CO₃²⁻-strækningsvibration splitter op i et forskelligt antal komponenter afhængig af, hvilket stof der er tale om [5]. Ved en høj spektral opløsning er der 2 komponenter for blyhvidt, 3 for plumbonacrit og én for cerussit [5]. I figur 3 viser den blå kurve, hvordan båndet for blyhvidt splitter op i to komponenter ved 1 cm⁻¹ spektral opløsning.

Raman er altså en effektiv analysemetode til at skelne mellem nært beslægtede kemiske forbindelser som blyhvidt, cerussit og plumbonacrit. Når identiteten af pigmentet er fastslået, anvendes ofte en lavere spektral opløsning, simpelthen for at få en acceptabel tid for optagelsen af spektret. Det vil for prøver fra kunsthverker, hvor der ofte er meget lille prøvemængde, sige timer. I denne artikel er der anvendt en spektralopløsning på 4 cm⁻¹, hvilket svarer til den røde kurve i figur 3.

C. I-Analyse

Gasanalyse – Gasalarmer – CEM systemer – Rådgivning – Service – Nanopartikler – Aerosoler – IAQ

En Målbart forskel i gasanalyse



Delta-F O₂ Trace analyser
ppt / ppb / ppm / %



Servomex
O₂ / CO / CO₂ mm. Process analyser



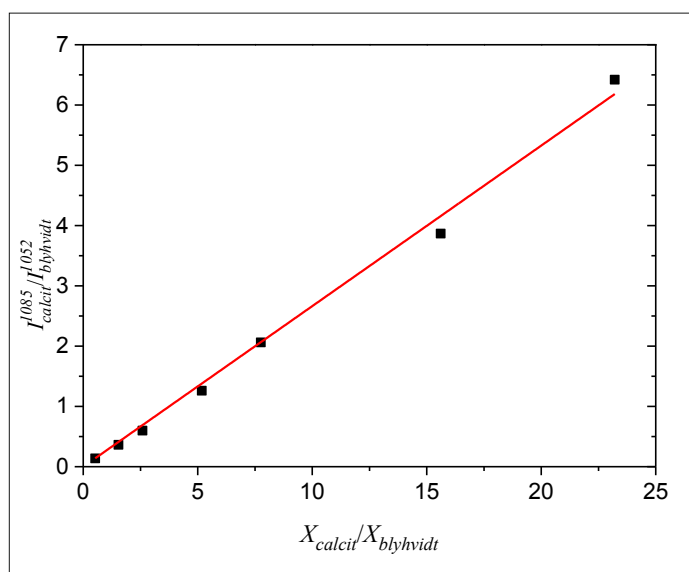
IQM 60 Indeks klimamålestation/logger
CO₂/O₃/VOC/rH/Temp/PM 10/2,5 mm.

C. I-Analyse · Nattergalevej 7 · DK-3650 Ølstykke · Tlf.: +45 4717 9299 · Mobil: +45 2961 1783
www.ihle-andersen.dk · claus@ihle-andersen.dk

Intensiteten af båndet ved 1085 cm^{-1} , I_{calcit}^{1085} , er proportionalt med stofmængden af CO_3^{2-} fra calcit, n_{calcit} , og intensiteten af båndet ved 1052 cm^{-1} , $I_{\text{blyhvidt}}^{1052}$, med stofmængden af CO_3^{2-} fra blyhvidt, n_{blyhvidt} [6]. For en blanding af calcit og blyhvidt kan forholdet mellem intensiteterne også udtrykkes ved molbrøker for de 2 forbindelser,

$$\begin{aligned} x_{\text{calcit}} &= \frac{n_{\text{calcit}}}{n_{\text{calcit}} + n_{\text{blyhvidt}}} \text{ og} \\ x_{\text{blyhvidt}} &= \frac{n_{\text{blyhvidt}}}{n_{\text{calcit}} + n_{\text{blyhvidt}}}, \\ \frac{I_{\text{calcit}}^{1085}}{I_{\text{blyhvidt}}^{1052}} &= a \frac{n_{\text{calcit}}}{n_{\text{blyhvidt}}} = a \frac{x_{\text{calcit}}}{x_{\text{blyhvidt}}} \quad (1) \end{aligned}$$

Brugen af molbrøk har den fordel, at man er uafhængig af mængderne af de to stoffer.



Figur 4. Forholdet mellem intensiteterne af båndet ved 1085 cm^{-1} og båndet ved 1052 cm^{-1} som funktion af forholdet mellem molbrøker af calcit og blyhvidt.

For at bestemme proportionalitetskonstanten a , blev der fremstillet 7 blandinger af calcit og blyhvidt med kemikalier fra SMK's eller KI's kemikaliesamlinger. For hver blanding bestemtes forholdet mellem stofmængderne for calcit og blyhvidt.

Forholdet mellem intensiteterne for calcit ved 1085 cm^{-1} og blyhvidt ved 1052 cm^{-1} blev så fundet ved at bestemme arealerne under de respektive bånd i Ramanspektret vha. OriginPro 8.1. En graf over forholdet mellem intensiteter som funktion af forholdet mellem molbrøker ses i figur 4, der viser en lineær sammenhæng med en hældning $a = 0,27$.

Denne kurve, eller ligning (1) med $a = 0,27$, kan nu bruges til at finde forholdet mellem calcit og blyhvidt i ukendte blandinger ved at måle forholdet mellem intensiteterne af båndene ved 1085 cm^{-1} og 1052 cm^{-1} i Ramanspektret.

Blyhvidt og calcit i et maleri fra midten af det 19. århundrede.

For at illustrere anvendelsen af Raman til at definere forholdet mellem blyhvidt og calcit blev prøver fra et dansk maleri fra midten af det 19. århundrede analyseret. Figur 5 viser maleriet (u. invnr.), der er malet på en træplade. Kunstneren er ukendt, men selve værket menes at stamme fra midten af det 19. år-

hundrede. Dateringen er baseret på malestil og -teknik. Med en skalpel blev tre prøver udtaget, mindre end 1 mm fra overfladen af malelaget: Prøve 1 fra den røde blomst, Prøve 2 fra et grønt område og Prøve 3 fra et hvidt område i den gul/røde blomst (figur 5).

Ramanspektrene af disse tre prøver, som blev optaget gennem et 10x objektiv ved en spektralopløsning på 4 cm^{-1} , ses i figur 6. Ved en spektralopløsning på 1 cm^{-1} splitter båndet ved 1052 cm^{-1} op i 2 komponenter i overensstemmelse med, at det kommer fra blyhvidt. Selv om intensiteten i Ramanspektre ikke direkte giver kvantitative oplysninger om mængden af en kemisk forbindelse ses det, at Prøve 2 fra det grønne område viser en meget lille intensitet for båndet ved 1052 cm^{-1} fra blyhvidt og en endnu mindre ved 1085 cm^{-1} (calcit). Så i det grønne område er forekomsten af hvidt pigment meget lille.



Figur 5. Dansk maleri fra midten af det 19. århundrede. Ukendt kunstner (u. invnr.).



Beskyt med omtanke Få dine biocidprodukter godkendt

EU og medlemslandene vurderer og godkender alle aktivstoffer og biocidprodukter på det europæiske marked. Jeres virksomhed bliver berørt, både hvis I markedsfører, sælger eller bruger biocidholdige produkter.



Beskyt med omtanke

Biocider er kemiske stoffer og produkter, der beregnet til at slå levende organismer i hjel. Derfor skal de omgås med omtanke.



Ny lovgivning

I kraft af EU's biocidforordning skal alle biocidprodukter godkendes for at blive på markedet. EU-lovgivningen træder gradvist i kraft i takt med, at EU godkender aktivstofferne i produkterne.



Konsekvenser

Produktionsstop - midlertidigt eller permanent. Det kan blive resultatet, hvis tilladelserne ikke er i orden. Den, der markedsfører produktet i Danmark, har ansvaret for, at det er godkendt.



Søg information

Få mere information og følg processen på biocidinfo.dk, spørg jeres brancheorganisation, eller skriv til Miljøstyrelsens helpdesk på biocidshelpdesk@mst.dk.

Skal jeres produkter godkendes nu?

Hvis jeres produkt står foran godkendelse, har I tre valgmuligheder: Opgiv produktet, betal for en produktgodkendelse eller etabler samarbejde om godkendelsen med en større aktør. Det er jeres egen pligt at søge rettidigt. Tidsfrister, vejledning og inspiration findes på biocidinfo.dk.

PRODUCENTER
& IMPORTØRER

Må produkter i jeres sortiment fortsat sælges og bruges?

Sørg for, at I kun sælger eller benytter lovlige produkter. Det er jeres egen pligt at følge med i processen og få ryddet ud i tide. Kontroller jeres sortiment, spørg producenten eller importøren, og få solgt ud af produkterne, inden de skal trækkes fra markedet.

FORHANDLERE
& BRUGERE

Hold øje med dine aktivstoffer

Vær opmærksom, hvis dit produkt indeholder et aktivstof, der stadig er under vurdering i EU. Hvis aktivstoffet ikke er vurderet, så skal visse produkttyper stadig godkendes efter nationale regler. Det gælder for f.eks. træbeskyttelsesmidler og insektmidler. Se mere på biocidinfo.dk.

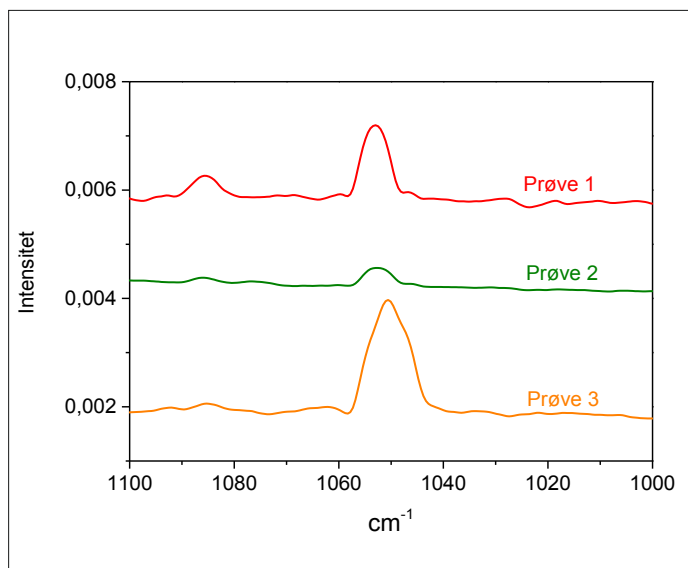
PRODUCENTER
& IMPORTØRER

Biocidinfo.dk Miljøstyrelsens hjemmeside om biocidlovgivningen

Biocidprodukter kan f.eks. være desinfektionsmidler, insektmidler og træbeskyttelse samt en lang række produkter, der er behandlet med biocider for at opnå en desinficerende eller konserverende effekt - eksempelvis klude, tekstiler, møbler, træ mv.



Miljøministeriet
Miljøstyrelsen



Figur 6. Ramanspektre af Prøve 1 (rød blomst), Prøve 2 (grønt område) og Prøve 3 (gul/rød blomst).

Ved at analysere forholdet mellem arealerne af båndene ved 1085 cm⁻¹ og 1052 cm⁻¹ og bruge kalibreringskurven i figur 4 bestemmes molbrøkerne for calcit og blyhvidt i Prøve 1 og Prøve 3 (tabel).

Tabel 2. Indhold af calcit og blyhvidt

Prøve	$\frac{I_{1085}^{calcit}}{I_{1052}^{blyhvidt}}$	X_{calcit}	$X_{blyhvidt}$
1	0,2694	0,50	0,50
3	0,0310	0,10	0,90

Tabel. Indhold af calcit og blyhvidt.

Det ses, at molbrøken for blyhvidt ift. calcit varierer alt afhængig af farveprøven. Dette kunne tyde på, at kunstneren selv har blandet sine pigmenter og ikke anvendt en standardblanding af calcit og blyhvidt. Da molarmassen for blyhvidt er ca. 8 gange større end for calcit, er der i blandingen vægtmæssigt anvendt væsentlig mere blyhvidt end calcit. Prøve 1 består vægtmæssigt af ca. 8 gange så meget blyhvidt som calcit, og Prøve 3 af ca. 70 gange så meget blyhvidt, hvilket betyder, at Prøve 3 var næsten ren blyhvidt.

På denne måde kan Ramanspektroskopi bruges til at definere sammensætningen af blandinger af blyhvidt og calcit i male-riers hvide pigmenter.

Perspektiver

Indtil nu har det været en væsentlig akilleshæl ved samarbejdet mellem SMK og KI, at kunstgenstande og Ramaninstrument har været bundet til hver sin institution. Men i 2011 oprettedes, med støtte af Villum Fonden og Velux Fonden, et center for kunstteknologihistoriske undersøgelser, Centre for Art Technological Studies and Conservation (CATS). Dette er et strategisk forskningssamarbejde mellem SMK, Nationalmuseet og Konservatorskolen på KADK.

Her har man ud over en lang række analyseapparater såsom XRF, FTIR, GC-MS og SEM, bl.a. også anskaffet et Ramaninstrument, så kunstgenstande kan analyseres *in situ*. Men da de laserbølgelængder, der benyttes i CATS's Ramaninstrument, et Bruker Senterra, er henholdsvis 785 nm og 532 nm, opererer det ved andre laserbølgelængder end de, der anvendes på KI (1064 nm), og instrumenterne på SMK og KI kan derfor også fremover supplere hinanden. Det inspirerende samarbejde mellem kunst og kemi er således under fortsat udvikling, og en kandidatstuderende fra KI arbejder nu i CATS med tekniske analyser af moderne kunstnerfarver.

*Støttet af Sino-Danish Center for Education and Research (SDC).

E-mail

Henrik G. Kjærgaard: hgk@chem.ku.dk

Jørgen Wadum: j.wadum@smk.dk

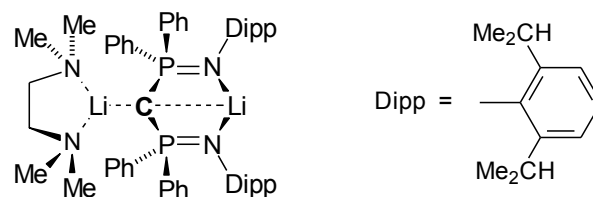
Referencer

1. Stiftung Schleswig-Holsteinische Landesmuseen, Schloß Gottorf medfinancier konserveringen og digitaliseringen af Gottorfer Codex
2. O. Faurskov Nielsen, P. Refstrup, M. Gniadecka, H.C. Wulf, S. Bang, K. Liltorp, P. Westh, Dansk Kemi 83 24-30 (2002).
3. N. E. A. Reeler, O. Faurskov Nielsen, M. Jørgensen, Dansk Kemi 91 21-2 (2010).
4. N. Borring, C.B. Jensen, A. Scocozza i H.K. Poulsen, E. de la Fuente Peder- sen *et al.*, Katalog til udstillingen *Blomster og Verdenssyn*, SMK 172-173 (2013).
5. M. H. Brooker, S. Sunder, P. Taylor, V.J. Lopata, *Can. J. Chem.* 61, 494-502 (1983).
6. A. B. Myers, T.R. Rizzo, *Laser Techniques in Chemistry*. John Wiley & Sons, Inc., 1995.

Nyt om ...

... Plant fire-koordineret carbon-atom

Siden van't Hoff i 1874 foreslog, at det fire-koordinerede carbon-atom havde tetraedisk struktur, har kemikere forsøgt at lave et monomert fire-koordineret plant carbon-atom. Det er nu lykkedes for en gruppe forskere ved University of Nottingham at fremstille endnu et eksempel på dette, forbindelsen nedenfor, som ved Röntgen-struktur-analyse er vist at have plan konfigu-



ration omkring det centrale C-atom. Forbindelsen er et farveløst krystallinsk stof, som er opløseligt i toluen.

Carl Th.

A Monomeric Dilithio Methandiide with a Distorted *trans*-Planar Four-Coordinate Carbon. *Angewandte Chemie International Edition* 49 2010, DOI:10.1002/anie.201002483.

Kvalitets-kontrol-metoder, der gør en forskel!

Hvordan får du sammenhæng i dit kvalitets-kontrol-arbejde?

Farmaceutiske produkter, som skal opfylde en række kriterier for at overholde kunders og myndigheders krav, underkastes en række tests inden de kan distribueres. Det er essentielt i dag, at man anvender betaleligt, pålideligt udstyr for at gennemføre kvalitetstests som underbygger at tabletter, kapsler, eleksirer, salver m.m. har de rigtige fysiske egenskaber.

Større virksomheder investerer villigt i apparatur til testning af fysiske egenskaber såsom viskositet af væsker og halvfaste præparater, hårdhed af tabletter og kapsler, brug af sprøjter til injektabilia og pulvers flydeegenskaber. Er de ubekendte med metoder kontakter de potentielle udbydere for at få hjælp/information. Kan mindre virksomheder forvente samme opmærksomhed fra potentielle leverandører? Hvad kan man forvente af omkostninger for at bringe disse metoder i hus? Eller er det eventuelt bedre at kontakte et servicelaboratorium?

Accept og implementering af en given QC-testmetode påhviler ofte virksomhedens R&D-funktion. I mindre virksomheder er der ofte sammenfald mellem R&D- og QC-funktionerne, idet det er vigtigt at QC har en tilbundsgående forståelse for en given metodes virkemåde. Dermed også en forståelse af data, hvis testresultater udløser spørgsmål. Her er et par eksempler på instrumenter, som giver løsninger!



1) Den udfordring, der ligger i pulverets flydeegenskaber!

Formuleringsfolk i f.eks. farmaceutisk industri dukker nærmest ugentligt op med en ny pulverblanding. Nogle gange handler det om nye aktive ingredienser eller

additiver som skulle forbedre egenskaber ved en efterfølgende proces, andre gange er der en ny leverandør af råmaterialer på banen – med en mulig besparelse til følge. R&D har til opgave at sikre, at den nye formulering virker, når den bringes op i produktionsskala.

Et pålideligt flow, under tyngdekraftens indvirkning, gennem en tragt er ofte en udfordring. De gængse metoder er simple, men desværre ofte behæftede med mange usikkerhedsfaktorer. Tests som anvender Flodex Cups, måling af anlægsvinkler, bankning o.l., måler ikke den nøgleparameter, der påvirker et pulvers flydeegenskaber. Sammenblanding i beholdere som følge af pulverets egenvægt er den primære variable, som afgør om et givet pulver vil flyde eller ej. Testinstrumentet, der er kendt som en "Shear Cell", er det mest velegnede, da det måler den friktion, der opstår, når de enkelte pulverpartikler "glider" mod hinanden efterhånden som de kommer gennem tragten.

2) Hvor sej er din kapsel?

Hårde kapsler fremstilles i store mængder hos producenter i hele verden. Man udvikler et kapseldesign, der er holdbart fra det tidspunkt, hvor kapslen fyldes, lukkes, pakkes, distribueres, udpakkes og skal indtages. At kende kapslens styrke er nøglen til, om den vil overleve de forskellige påvirkninger og stadig være egnet, når kunden anvender den. Tekstur-analysatorer er generelt de bedst egnede instrumenter til måling af hhv. træk- og trykbrudstyrker.

Tekstur-analysatorer kan forsynes med passende værktøjer for at være velegnede til de enkelte målinger.

3) Hænger tabletten sammen?

R&D-folk koncentrerer sig om, hvorvidt en tablets aktive stof hjælper patienten, men de koncentrerer sig også om at formulere tabletten, så den har de rette egenskaber såsom hårdhed, henfald, afgivelse af aktivt stof osv.

Tekstur-analysatorer bliver relevante ved, at man med et passende værktøj sikrer, at en given tablet reagerer korrekt under en given påvirkning. Disse tests sikrer, at tabletten bevarer sin egnethed gennem produktion, pakning, lagring og distribution til patientens endelige brug. Træk- og trykbrudstyrke, slidstyrke samt opløselighedstests er efterhånden



standard ved de forskellige tabletproducenters QC-funktioner.

4) Gør det ondt at smøre salve på?

Patienter er hurtige til at klage over smerter, hvis en salve eller creme svier efter påføring. Hvis salvens konsistens er for tyk, kan det være grund til genen. Produktet kan nemt have været testet for viskositet uden at testmetoden har taget højde for den påvirkning, der sker, når en patient anvender produktet. Enkeltpunktsmålinger er ofte standard i kvalitetskontrol, men de er ikke nødvendigvis tilstrækkelige til at kvalificere den endelige oplevelse af en salve/creme. Det er vigtigt, at anvende "shear rates" (rotationshastighed), der er relevante og simulerer patientens typiske "gniden".

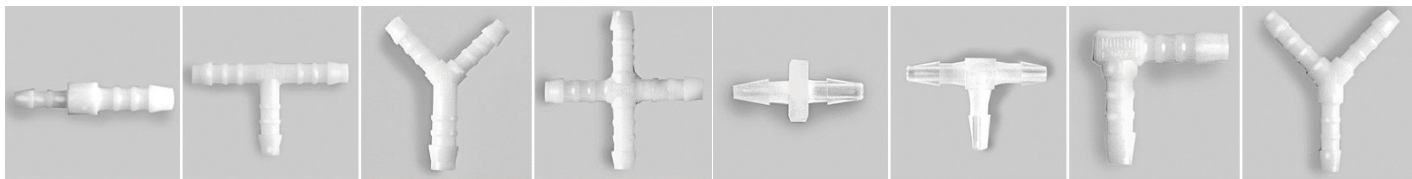
5: Er eleksiren til at synke?

Oplevelsen, når man får noget i munden, er en kombination af smag og konsistens. Derfor er det vigtigt at en eleksir eller mikstur ikke blot smager godt, men at den også har den rette viskositet. For at kortlægge eller kontrollere dette benyttes en helt almindelig opstilling bestående af et bord-viskosimeter med termostatbad, der er meget velegnet til netop denne type kontrol.

Enkle kvalitets-kontrol-tests med passende udstyr kan sikre ensartethed og egnethed af et givet produkt. I den forbindelse er det en god ide at kontakte Deres Brookfield leverandør for et uforpligtende møde.

Yderligere information:
Buch & Holm
Tlf. 44 54 00 00
E-mail: b-h@buch-holm.dk

Slangefittings til pumpeslanger



Drifton præsenterer 8 forskellige modeller og mange forskellige størrelser, så det er muligt at finde den helt rigtige plast slangefitting til ethvert formål.

Der kan bl.a. vælges mellem standard-slangefittings i 5 forskellige modeller og

reducerende slangefittings i 3 forskellige modeller.

De fleste modeller er lavet af acetal-kunststof (POM, polyoxymethylen), men der er nogle enkelte undtagelser, der er lavet af polypropylen. Se udvalget af slan-

ger og slangefittings på www.drifton.dk.

Yderligere information:
Drifton A/S c/o Diatom A/S
Tlf. 36 79 00 00
E-mail: info@drifton.dk

AC Extraction Plate

Tecan's newly launched AC Extraction Plate is a automation-friendly solution designed to streamline sample preparation for LC-MS analysis of small molecules. The plate, which is based on proprietary TICE™ (Tecan Immobilized Coating Extraction) technology, reduces the sample preparation process to a convenient 'pipette and shake' routine.

The AC Extraction Plate is a 96-position, deep-well microplate, with the inner surface of each well coated with a highly controlled layer of TICE material. This coating efficiently extracts low molecular weight analytes – such as vitamin D and

testosterone – from aqueous solutions, eliminating the need for the laborious and time-consuming filtration, centrifugation and evaporation steps that are often integral to other methods. Unlike many of these techniques, sample preparation with the AC Extraction Plate can also be easily automated, providing a rapid, walkaway solution for the extraction of small molecules from biological fluids for LC-MS analysis.

More information:
Tecan Trading AG
CH-8708 Männedorf



Tel +41 (0)44 922 81 11
info@tecan.com
www.tecan.com

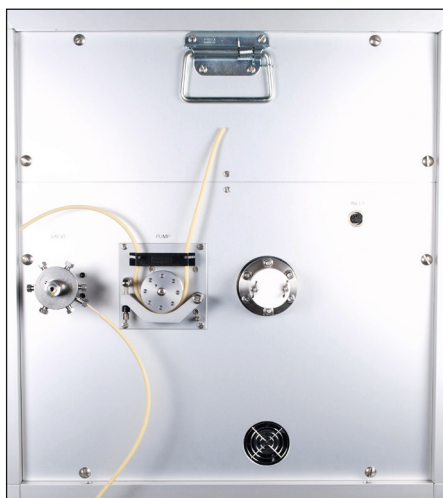
Online-analyse af flygtige stoffer

Mikrolab Aarhus A/S præsenterer et massespektrometer med membran-inlet til direkte online-analyse af vand og luft for indhold af opløsningsmidler.

Metoden er særdeles følsom (ng/l i vand og ug/m³ i luft for chloralifater) og er specielt velegnet som detektor ved overvågning af grund- og spildevand samt industrielle processer, der involverer gasser og flygtige organiske stoffer.

Membran-inlet massespektrometrien adskiller sig fra de fleste andre analysemetoder ved at vandige medier, uanset konsistens, kan analyseres uden forbehandling af nogen art. Hertil kommer at metoden er relativ hurtig med en analysetid på ca. 2 minutter.

Der tilbydes køreklare systemer udviklet til overvågning af grund- og spildevand. Systemerne kan leveres med 2-3 dages indkøring og træning af personale. Alle enheder er sammenbygget i et kabinet. Der kræves kun en netledning. Der er nem adgang til alle enheder.



Det er muligt at specialdesigne inlets til næsten alle applikationer, som involverer analyse af flygtige organiske stoffer.

Detektionsgrænserne er: Opløsningsmidler i vand: < 1 mg/l, opløsningsmidler i luft: ug/m³.



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

Leverandørregister

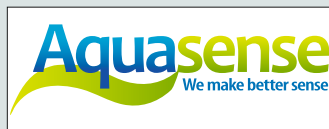
Analyse

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

Analyse- og laboratorieudstyr



Aquasense
Stensgårdvej 2
5500 Middelfart
Tlf. 42 42 50 80
info@aquasense.dk
www.aquasense.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 laboratorieudstyr

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

Lab-Science ApS
Vesterfælledvej 19
1750 København V
Tlf. 33 23 00 10
info@lab-science.com

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

Fermentering og cellekultur-udstyr



Svanholm.com
Nordisk Pharma og Analyzer Center
Tlf. 70 26 58 11 - Fax 69 80 31 33
mail@svanholm.com
www.svanholm.com
Nordens største sensor og analyzer
udvalg til lab, pilot og proces

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



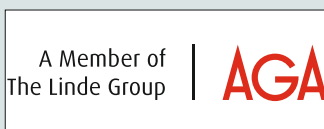
GasDetect
Stensgårdvej 2
5500 Middelfart
Tlf. 42 42 50 70
info@gas.dk
www.gas.dk

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 Deuterium Lamper

Lab-Science ApS
Vesterfælledvej 19
1750 København V
Tlf. 33 23 00 10
info@lab-science.com

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, proces



Svanholm.com
Nordisk Pharma og Analyzer Center
Tlf. 70 26 58 11 - Fax 69 80 31 33
mail@svanholm.com
www.svanholm.com
Svanholm.com er distributør af
Thermo Scientific proces MS

Leverandørregister

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



Svanholm.com
Nordisk Pharma og Analyzer Center
Tlf. 70 26 58 11 - Fax 69 80 31 33
mail@svanholm.com
www.svanholm.com
Til styring af fermentering og
farmaceutisk pulvertørring

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



Svanholm.com
Nordisk Pharma og Analyzer Center
Tlf. 70 26 58 11 - Fax 69 80 31 33
mail@svanholm.com
www.svanholm.com
Til QbD og PAT ved pulvertørring,
tabletoproduktion og fermentering

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

A Member of
The Linde Group | **AGA**

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

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
Rigsgade 11
1316 København K
Tlf. 43 99 55 11 - Fax 43 99 99 11
kbenhavn@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

Rådgivning

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

Software

A

Arbejdspladsbrugs- anvisninger og etiketter



CHYMEIA ApS
Universitetsparken 7
4000 Roskilde
Tlf. 72 40 16 22
info@chymeia.dk
www.chymeia.dk
APB/SDS software med beregning af
CLP klassificeringer

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

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



10th Aarhus Winter Meeting

Trends in Modern Chemistry

Fredag den 24. januar 2014, kl. 11 – 18
Institut for Kemi, Aarhus Universitet
Langelandsgade 140, 8000 Aarhus C.

Foredragsholdere:

- Prof. **Simon Billinge**, Columbia University, New York and Brookhaven National Laboratory, Upton, New York
"The materials complexity frontier: nanostructure and heterogeneities"
- Prof. **Horst Kunz**, Institute of Organic Chemistry, Johannes Gutenberg-University of Mainz, Mainz, Germany
"Synthetic antitumour vaccines based on tumour-associated glycopeptide antigens"
- Prof. **Mogens Brøndsted Nielsen**, Kemisk Institut, Københavns Universitet
"Photochromic dihydroazulenes – from light-controlled molecular electronics components to energy storage devices"
- Prof. **Dietmar Stalke**, Institut für Anorganische Chemie, Georg-August-Universität Göttingen, Germany
"Low valent silicon – a carbon copy?"
- Prof. **Ove Christiansen**, Institut for Kemi, Aarhus Universitet
"You can ignore some quantum effects all of the time, and all quantum effects some of the time, but you cannot ignore all quantum effects all of the time"
- Senior chemist **Bistra Andersen**, LEGO Systems A/S, Billund
"Polymer chemistry in the manufacturing of LEGO products"

Det er gratis at deltage i mødets faglige del, og der vil blive arrangeret gratis fællestransport til og fra mødet for Kemisk Forenings medlemmer i København, Odense og Aalborg.

Tilmelding til mødet skal ske på Institut for Kemis hjemmeside www.chem.au.dk/Wintermeeting eller via link fra Kemisk Forenings hjemmeside (www.chemsoc.dk). Sidste frist for tilmelding er **mandag den 13. januar 2014**.

Dansk Selskab for Historisk Kemi

Selskabets medlemmer er af HITEK, Selskabet for Historisk Teknologi, inviteret til følgende foredrag:

Et mageløst metal: Aluminium i historisk perspektiv

v/ professor, dr.scient. & dr.phil. Helge Kragh, Center for Videnskabsstudier, Aarhus Universitet.

Tirsdag 21. januar 2014, kl. 16.00 – 18.00
Ingeniørhuset, Kalvebod Brygge 31-33, 1780 København V

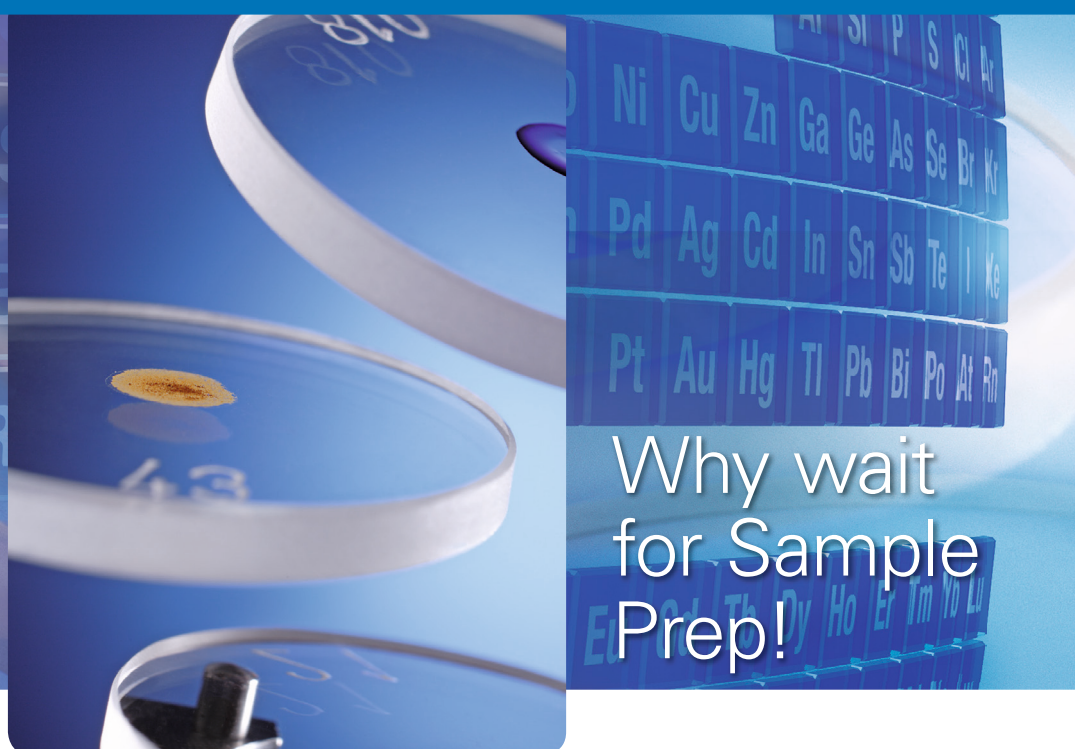
Aluminium har en overraskende og instruktiv historie, både videnskabeligt og teknologisk. Det er det mest hyppige metal i jordskorpen, men alligevel blev det først isoleret af H.C. Ørsted i 1825, og det tog yderligere 80 år, før det fik sit industrielle gennembrud. De tidlige forsøg på at tilvirke aluminium i industriel målestok udgør et fascinerende kapitel i den kemiske industrihistorie. Dele af denne historie var desuden tæt knyttet til et andet industrieventyr, nemlig produktionen af soda ud fra det grønlandske mineral kryolit. I foredraget vil dette aspekt, med dets særlige betydning for dansk teknologi- og industrihistorie, blive fremhævet.

Deltagelse er gratis for medlemmer af Dansk Selskab for Historisk Kemi, men tilmelding på ida.dk/arrangementer eller bedre: tlf. 3318 4848 er nødvendig.

Med venlig hilsen
 Christian B. Knudsen og Børge Riis Larsen

Mødekalender (12) 2013

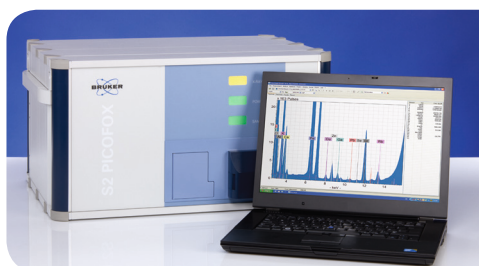
- 4.12. 2013** Interessegruppen for Gasanalyse og Kemiingeniørgruppen, IDA. Temamøde, NFA, København. Se dk 2013 (11).
21.01. 2014 Kemisk Forening, Dansk Selskab for Historisk Kemi. Foredrag. Ingeniørhuset, Kalvebod Brygge 31-33, 1780 Kbh. V. Se dk 2013 (10, 12).
24.01.2014 Kemisk Forening, 10th Aarhus Winter Meeting, Trends in Modern Chemistry, Aarhus Universitet. Se dk 2013 (12).



S2 PICOFOX

Benchtop TXRF for Ultra Low Detection Limits

- **NEW** Gas purge for sensitive Ag and Pd detection
- Concentrations from 0.1 ppb to 100 percent
- Sample amounts down to nanograms
- Fast sample preparation without digestion



www.s2picofox.com

Innovation with Integrity