Dit branchemagasin fra TechMedia

Kemisk Forening - Kemiingeniørgruppen

dansk kemi

Nummer 6-7 - Juni 2013 / 94. årgang

Ideen bag Zealand Pharma

Dielektrisk spektroskopi i aktion

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.

MEDECINS SANS FRONTIERES
LÆGER UDEN GRÆNSER

INDHOLD

1 Forsidebillede: Koffein er et forunderligt stof. Vi har samlet nogle af de nyeste resultater i dette nr.

6 Kaffe forlænger livet. Undersøgelser af over 400.000 amerikanere i 14 år viser, at kaffedrikkere lever længere end ikke-kaffedrikkere.

8 Skal koffein reguleres? Foruden i kaffe og te findes koffein i et hav af produkter, hvor det kan have meget ubehagelige følger.

10 Det blev peptidernes verden, der fangede ham. Bjarne Due Larsen ville ellers have været lærer – i stedet blev han en af idemændene bag biotek-virksomheden Zealand, hvis første produkt baseret på peptidkemi kom på markedet i marts i år.

12 Automatiseret dynamisk headspace - den letteste vej til høj følsomhed ved analyse af lavmolekylære stoffer.

15 Computersimuleringernes "grand old man" i Danmark, professor Søren Toxværd, er still going strong.

16 Tantal – et spændende metal. En donation fra Nordea-fonden medførte i 2012, at 3.xKe på Aabenraa Statsskole fik et spændende, naturvidenskabeligt projekt med fokus på at undersøge grundstoffet tantal.

19 Dielektrisk spektroskopi er blevet langt mere tilgængeligt som karakteriseringsværktøj både offline og direkte tilsluttet forskelligt produktionsudstyr. Her gives en række eksempler på anvendelser, hvor ellers svært tilgængelig information er blevet langt nemmere at opnå vha. dielektrisk spektroskopi.

22 Maillardreaktionens udøvere er bagere, bryggere, kokke, kafferistere og husmødre. Reaktionen er en af levnedsmiddelkemiens vigtigste, men den byder også på mange udfordringer.

26 Anden-ordens kalibrering i praksis. I sidste klumme så vi, at anden-ordens kalibrering kan foretages vha. Rank Annihilation Factor Analysis. Sådan startede det, men i dag anvendes andre metoder og især PARAFAC.

31 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, seniorforsker Henrik Skov
hsk@dmu.dk

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

Redaktionssekretær:
Else Frederiksen
else.f@techmedia.dk

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

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

Hjemmeside:
www.danskkemi.dk

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

Scan og hent Dansk Kemi's medieinformation 2013 hér!
Brug for scanner? Send en sms til 1220 med ordet "scan" og få scanlife som app.

Layout:
Morten Malmgren

Tryk:
KLS Grafisk Hus A/S

Trykt på miljøvenligt papir med vegetabilske miljøfarver.

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

GRØNT KONTOR
Drift med miljøhensyn
Grønt kontor 2009-2012
og modtager af Albertslund Kommunes Grønne Initiativpris 2009.

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

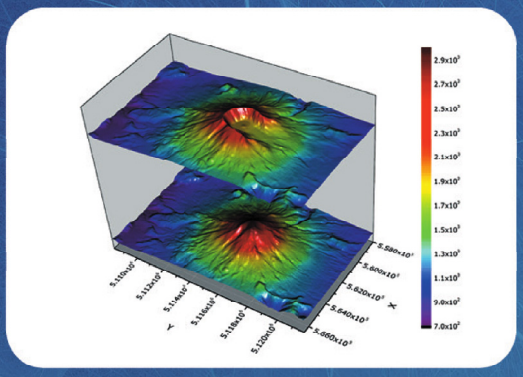
ISSN 0011- 6335

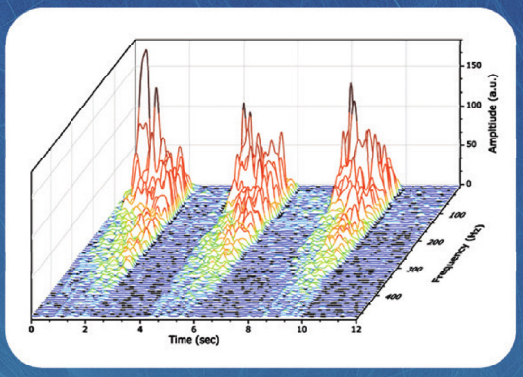
UK: Huson European Media -
Tel.: (+44) 1932-564999
USA, New York: Huson International Media
Tel.: +1 212 268 3344
USA, California: Huson INternational Media
Tel.: +1 408 879 6666
Germany: Huson International Media
Tel.: (+49) 89-9500-2778

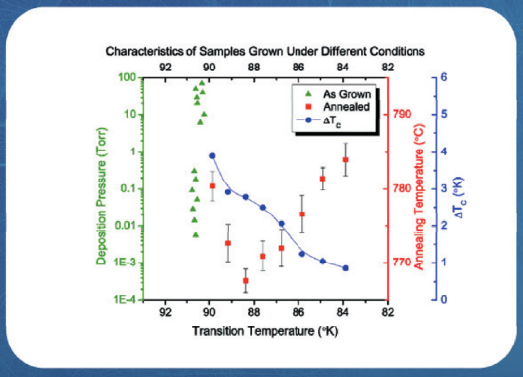
NEW VERSION

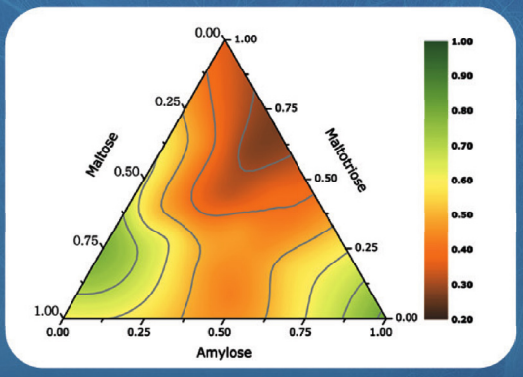
ORIGIN® 9

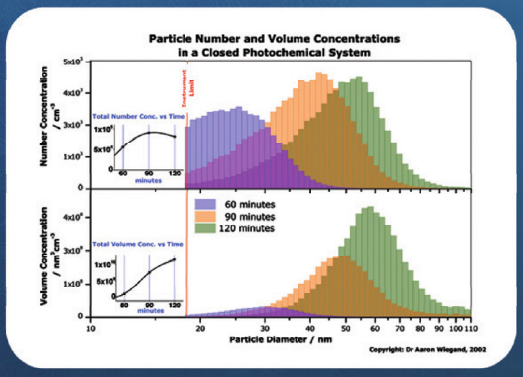
Data Analysis and Graphing Software.
Powerful. Flexible. Easy to Use.

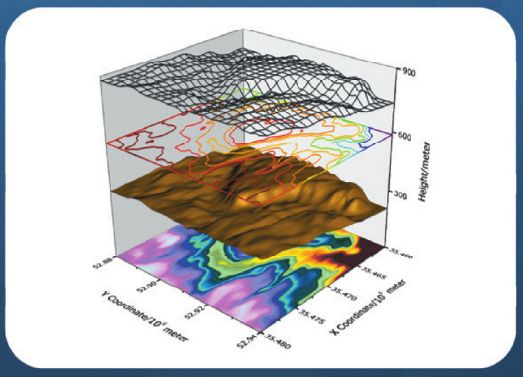


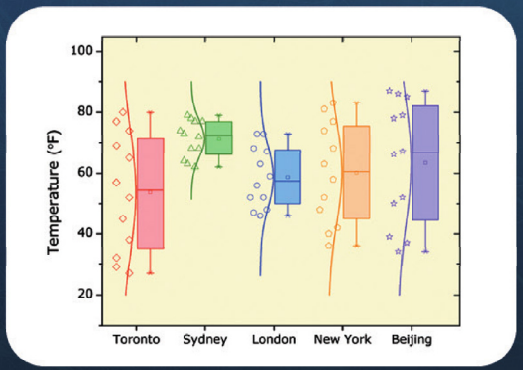












Inno-Max

Tlf: 9696 1111

http://innomax.dk

LEDER

Kemikalieindsats – nye mål og midler?

> Det er vigtigt at gøre debatten om kemi og kemiske stoffer mere ansvarlig og nuanceret

I denne tid lægges grunden til miljømyndighedernes kemikalieindsats for årene 2014–2017. Miljøministeren har signaleret, at den kommende indsats skal have et overordnet sigte med vægt på grøn omstilling og vækst. Samtidig har hun på et tidligt tidspunkt indbudt borgere og erhverv til at bidrage med inspiration.

Ud over det traditionelle fokus på de sundheds- og miljømæssige effekter af kemikalier skal der også ses på de ressourcemæssige virkninger, herunder muligheder for genanvendelse og fornybare stoffer og materialer. Målet er udvikling af grønne løsninger og nye produkter, som kan bidrage til vækst i Danmark.

Med den europæiske kemikalielovgivning i REACH har vi fået en meget ambitiøs og ressourcekrævende lovgivning, både for virksomheder og myndigheder. Virksomhederne bruger mange kræfter på at tilvejebringe den nødvendige dokumentation for stoffernes virkninger og formidling af information op og ned i værdikæden. Og for myndighederne er der behov for at lægge ressourcer i det internationale arbejde med at implementere og evaluere samt opstille fælles vilkår og begrænsninger for de problematiske stoffer.

Men REACH er også netop den lovgivning, som kan give betydelige resultater for sundhed og miljø og virksomhedernes konkurrenceevne på længere sigt. Hvis bare den får lov at virke. Og hvis børnesygdommene overstås. Der er imidlertid desværre den indbyggede svaghed i REACH i forhold til de politiske systemer i EU og medlemslandene, at implementeringen strækker sig over lang tid, og at resultaterne først kan måles, når valgperioden er udløbet. Derfor kan politikerne ikke lade være med at lave nationale hovsa-løsninger. National særlovgivning skaber som regel en masse besvær uden at sætte sig mærkbare aftryk på sundhed og miljø.

Fristelsen for politikerne til at markere sig i forhold til kemikalier skyldes i høj grad den unuancerede og skævvredne offentlige debat, hvor ”uden kemi” og ”naturlig/økologisk” er synonymt med risikofrit. Og hvor pressen gerne sælger frygt og skandaler baseret på myter og fordomme.

Vi har i erhvervslivet drøftet mulighederne for at påvirke debatten og har desuden fremsat ønsker til principper for og fokusområder i den kommende kemikalieindsats.

Der er identificeret tre principper, som efter vores opfattelse bør være styrende for indsats og debat:

- Potentialet i kemiske stoffer, produkter og processer skal udnyttes maksimalt uden at skade sundhed og miljø.
- Vi forpligter os alle på ansvarlig og nuanceret kommunikation.
- Vi skal arbejde internationalt og fagligt/videnskabeligt.

Det er et lang sejt træk at ændre på holdninger og debat om kemi og kemiske stoffer, men vi tror på, at det er væsentligt at blive ved.

Ulla Hansen Telcs, chefkonsulent i DI Miljø, UHA@DI.dk

Nyt om …

… Koffeinafhængige bier

Når bier samler koffeinholdig nektar fra blomster fra *Coffea*- eller *Citrus*-slægterne, husker de blomstens karakteristiske duft mindst tre dage efter. Så god er deres hukommelse slet ikke, hvis der ikke er koffein i nektaren. Det er usikkert, om bier ligefrem bliver afhængige af koffein, men det er sikkert at de nyder den. Bien eftersøger blomster, der forsyner den med stimulansen. Planterne på den anden side har nøje afstemt niveauet af koffein, så det ikke overskrider biens tærskel for bitter smag. Fordelen for planten er, at den vinder i kapløbet om bestøvning.

Carsten Christophersen

Caffeine Boosts Bees' Memories. L. Chittka og F Peng *Science* 2013, Bind 339, Side 1157-1159 og Caffeine in Floral Nectar Enhances a Pollinator's Memory of Reward. G. A. Wright *et al. Science* 2013, Bind 339, Side 1202-1204.

Kaffe forlænger livet

Undersøgelser af over 400.000 amerikanere i 14 år viser, at kaffedrikkere lever længere end ikke-kaffedrikkere.

Af Carsten Christophersen, carsten@techmedia.dk

Kaffe hører til blandt de mest populære drikke. En stor undersøgelse af over 400.000 amerikanere gennem 14 år, i alt dækkende 5.148.760 person-år, afslører, at kaffedrikkere har omkring 10% nedsat risiko for at dø sammenlignet med ikke-kaffedrikkere. Deltagerne i undersøgelsen var fra 50 til 71 år gamle ved projektets start i 1995-1996.

Kaffedrikkere lever længere

Undersøgelsen måler ikke kun det totale antal dødsfald, men også hvilken sygdom deltagerne døde af. Reduktionen af den generelle dødsrisiko gælder også død pga. hjertesygdom, åndedrætssygdom, slagtilfælde, beskadigelser og uheld, diabetes og infektioner, men ikke kræft.

Blodtryks-paradokset

Koffein i kaffen giver et let forhøjet blodtryk. Den nuværende viden om blodtrykkets indflydelse på hjerte-kar-sygdomme forudsiger, at antal sygdomstilfælde burde øges blandt kaffedrikkere, men det modsatte er tilfældet. Og endnu mere uforklarligt, så viser det sig, at dem der drikker koffeinfri kaffe ikke klarer sig bedre end koffeindrikkerne i undersøgelsen. Forklaringen er ukendt, men virkningen af de omkring 1000 andre påviste organiske forbindelser i kaffen er ufuldstændigt kendt. Der findes næsten helt sikkert synergistiske effekter mellem forskellige indholdsstoffer. Desuden så brygges og drikkes kaffe på

Tjek kaffen

Kaffebønner markedsføres til meget forskellig pris. Prisen på almindelig finmalet kaffe kan variere fra ca. 50 til ca. 130 kr./kg. Men kvaliteten svinger tilsvarende meget. Forbrugeren har ikke mange muligheder for at få oplyst indholdet (mængden) af akrylamid og furan, der dannes ved ristningen af bønnerne, og som mistænkes for at være kræftfremkaldende. Ochratoksin A, der stammer fra skimmelsvampe, varierer ligeledes i de forskellige mærker, men deklareres heller ikke. Alle forbindelserne er lovmæssigt regulerede til et niveau, som ikke anses for farligt. Koffeinindholdet kan nemt variere med en faktor tre.

vidt forskellig måde. Kan man stole på folks hukommelse? Og dem, der drikker koffeinfri kaffe – har de gjort det under hele undersøgelsen, og gør de det altid? Her grupperes folk, der angiver, at de drikker koffeinfri kaffe hver anden gang som koffeinfri kaffedrikkere. Har de andre vaner som afspejles i deres kaffedrikning? Tager de medicin?

Kohorteundersøgelser

Resultater fra befolkningsundersøgelser styrkes af det ofte meget store antal personer, der indgår i undersøgelsen. Personer med alvorlige sygdomme udelukkes. I denne undersøgelse af 400.000 amerikanere blev 100.000 valgt fra inden undersøgelsen startede pga. alvorlig sygdom eller andet, der kunne påvirke undersøgelsen negativt. Men, der er stadig en række problemer

Koffeinfri kaffe

Koffeinfri kaffe indeholder kun små mængder koffein. Der er et utal af metoder til at fjerne koffein fra bønnerne. Den først udviklede metode fra 1903 bestod i at udtrække de dampede bønner med benzen. Senere fulgte metoder, hvor benzen blev erstattet med methylenchlorid, ethylacetat eller andre organiske opløsningsmidler. Den blideste metode er den relativt nye ekstraktion med superkritisk CO_2. Det er svært at afgøre hvilke andre bestanddele, der fjernes fra bønnerne eller hvilke reaktioner, der foregår i den utroligt komplicerede blanding af organiske forbindelser.

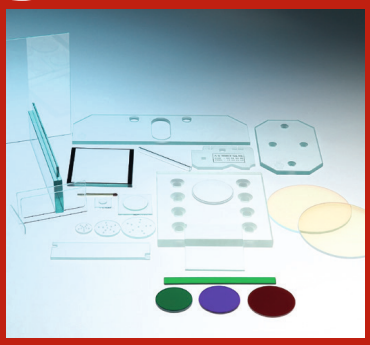
tilknyttet konklusionerne af undersøgelserne. De bedste studier, som det her omtalte, tager hensyn til alder, køn, overvægt, uddannelsesniveau, rygning, alkoholforbrug, spisevaner og fysisk aktivitet. Men multivariate undersøgelser korrelerer også med faktorer, der hænger sammen med andre variable, der ikke medtages i analysen. F.eks. så viser denne undersøgelse, at der er stigende dødsrisiko for kaffedrikkere, men når rygning inddrages i undersøgelsen, så vender billedet.

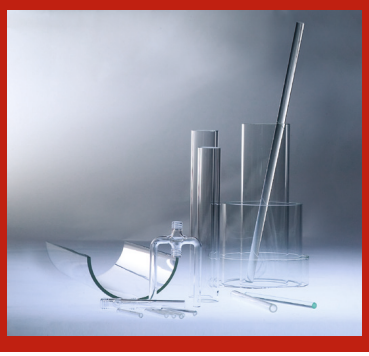
Kilder
Association of Coffee Drinking with Total and Cause-Specific Mortality. N. D. Freedman *et al. The New England Journal of Medicine* 2012, Bind 366, Side 1891-1904.
Epidemiology of Caffeine Consumption and Association of Coffee Drinking with Total and Cause-Specific Mortality: An Interview with Neal D. Freedman, PhD, MPH. J. E. James, *Journal of Caffeine Research* 2012, Bind 4, Side 153-158.

Glas efter opgave

Sikkerhedsglas
Skueglas
Hærdet glas
Glasrør
Teknisk glas
Inspektions glas
Borosilikat glas
Kvartsglas
Varmebestandigt glas
Varmeruder
Afskærmningsglas

Vi fremstiller glas efter individuelle behov og leverer alt fra enkelt styk til større serier





Tlf. 4494 4449
Fax 4494 0844

Mirit Glas
Vi ser en løsning

www.mirit.dk
post@mirit.dk

Salg & service: Harmonivej 1, 2730 Herlev, Danmark • Produktion: Industriparken 12, 6500 Vojens, Danmark

Skal koffein reguleres?

Foruden i kaffe og te findes koffein i et hav af produkter, hvor det kan have meget ubehagelige følger.

Af Carsten Christophersen, carsten@techmedia.dk

Koffein er et udbredt industrielt kemikalie og naturstof. Ikke blot møder vi det i en kop af de utallige varianter af kaffe – espresso, filterkaffe, stempelkaffe, café au lait eller cappuccino, men også i te. Tillige findes det i et meget stort antal produkter, hvor funktionen ikke er umiddelbart gennemskuelig. Det har en værdsat opkvikkende virkning, men det er også giftigt og kan være dødeligt. Derfor kan der være grund til at drøfte om koffein skal reguleres lovmæssigt.

Koffein før og nu

Nutiden har et mere afslappet forhold til koffein end tidligere tider. I 1911 nedsatte Coca-Cola frivilligt mængden af koffein i deres drikke under et retsligt opgør. Sagsøgeren vurderede, med henvisning til den nyligt vedtagne Food and Drug Act, koffein som en alvorlig trussel mod offentlighedens helbred. Loven blev vedtaget hovedsageligt på følelsesmæssige formodninger og antagelser og ikke på kontrollerede undersøgelser.

Så giftigt er det

Den dødelige dosis for en voksen har længe været sat til omkring 10 g. Eksperimentelt er LD_{50} – altså den orale dosis der afliver halvdelen af forsøgsdyr som katte, hunde og rotter, omkring 150-200 mg/kg. Disse værdier er ikke i sig selv alarmerende, men værdien af den dødelige dosis for mennesker varierer meget. Et barn er omkommet efter den halve dosis, mens en ung kvinde har overlevet en anslået mængde på 100 g.

Symptomer på koffeinforgiftning

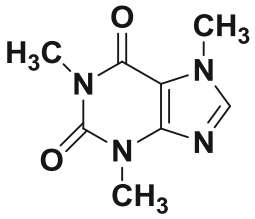
Typiske symptomer på forgiftning inkluderer mavesmerter, opkast, hurtig puls, uregelmæssig hjerterytme, ophidselse, kramper og slagtilfælde. Symptomerne kan forstærkes ved additive eller synergistiske reaktioner med medicin eller andre stimulerende forbindelser.

Pas på energidrikke

Den store synder i forgiftninger relateret til koffein er energidrikke. De kan indeholde 320 mg/L koffein i blanding med andre stimulerende ingredienser. Indholdet er omtrent tre gange lavere end i stærk kaffe (~ 1000 mg/L). Men indtaget af energidrikke kan være højt, specielt blandt unge mennesker, og de blandes ofte med andre stimulanser eller alkohol. Mange energidrikke indeholder samtidig store mængder sukker og høje koncentrationer af syrer, der i længden ødelægger tandemaljen. I 2006 blev over 500 nye energidrikke markedsført på verdensplan. Koffein kan findes tilsat til så forskellige produkter som sodavand, vand på flaske, øl og spiritus, chokolade, konfekt, is, tyggegummi, yoghurt, kornprodukter til morgenmad, småkager, mælk med smag, solsikkefrø, tørret kød, en stor mængde kosmetik, hudcremer, sæbe, shampoo samt i mange slankeprodukter.

Dødelige forgiftninger er sjældne

Dødsfald direkte relateret til koffein er sjældne, men det er meget svært at afgøre i hvor høj grad koffein har bidraget til alvorlige forgiftninger med andre stoffer. I 2011 registrerede American National Poison Data System 2.304 tilfælde, hvor energidrikke nævnes i forbindelse med forgiftninger. Andelen af forgiftede under 20 år var 77%. Det er samme procentdel, som i tilfælde hvor alkohol plus koffeindrikke blev registreret.



Koffein

Koffein og alkohol

Mange populære færdigblandede alkoholiske drikke er tilsat koffein. Det er meget uheldigt, da mange populære færdigblandede drikke næsten ikke smager af alkohol, men virkningen er der. De fleste konsumenter bliver tilpas døsige og afslappede efter et stort alkoholindtag. Men hvis der er opkvikkende koffein iblandet drikken, så opdager mange ikke rusen. F.eks. mener nogle, at de nemt kan køre bil, men det kan føre til alvorlige uheld til skade for både dem selv, og i værste fald til drab på uskyldige medtrafikanter.

Kilder
Death By Caffeine: How Many Caffeine-Related Fatalities and Near-Misses Must There Be Before We Regulate? J. E. James *Journal of Caffeine Research* 2012, Bind 2, side 149-1152.
http://www.tandlaegeforeningen.dk/Pressen/Pressemeddelelser/~/media/Tandlaegeforeningen/presse/media/energidrikke_2011.ashx

BENDT WIKKE MARKETING A/S

Sikrer analyserent laboratorieudstyr med intelligent og effektiv rengørings-proces

NYHED laboratorieopvaskemaskine PG 8536

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

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

Miele Professional A/S · Erhvervsvej 2 · 2600 Glostrup
Tlf. 43 27 15 00 · www.miele-professional.dk

Miele PROFESSIONAL

Bjarne Due Larsen foran Zealand Pharma. Foto: boesenfoto.dk

Ikke for tøsedrenge

Det blev peptidernes verden, der fangede ham. Bjarne Due Larsen ville ellers have været lærer – i stedet blev han en af idemændene bag biotek-virksomheden Zealand, hvis første produkt baseret på peptidkemi kom på markedet i marts i år.

Af Katrine Meyn, km@techmedia.dk

Bjarne Due Larsen elsker naturvidenskab, og han elsker at fortælle om den. Og det er han blændende dygtig til. Han tilhører det fåtal, der formår at formidle kompliceret stof simpelt og forståeligt.

Interessen for naturvidenskab har altid været der – nogle gange har den været hjulpet godt på vej af inspirerende undervisere – men den har været der uanset påvirkninger. Og da han begyndte at læse fysik-kemi på Københavns Universitet, var det, fordi han ville være gymnasielærer. Som de fleste blev han i første omgang tiltrukket af uorganisk kemi, der med mange spektakulære forsøg, farver og historier om f.eks. Madame Curie havde en masse fascinerende historier at byde på. Men mødet med lektor Arne Holm ændrede det for altid.

- Da jeg traf lektor Arne Holm, endte jeg på organisk kemi, hvor jeg lavede speciale i photolyse af heterocykliske forbindelser, fortæller han.

I forbindelse med specialet brugte han 1½ år på at syntetisere en photokemisk aktiv heterocyklisk aromat, hvorefter han brugte to timer på at ødelægge den, fordi målet var at studere det photokemiske produkt thiiren, en antiaromatisk treleddet ring.

Speciale-årene gør ham til en erfaren organisk kemiker, hvilket han har haft glæde af lige siden.

- Det var ikke kemi for tøsedrenge, men det var utrolig spændende, siger han.

En ny verden af peptider

Interessen for peptider opstod helt automatisk da hans vejleder Arne Holm skiftede fokus. Arne Holm opholdt sig et stykke tid hos nobelprisvinder Bruce Merrifield, Rockefeller University, og kom retur grebet af begejstring.

- Selvom jeg intet kendte til peptider, blev jeg grebet af hans begejstring, siger Bjarne Due Larsen. Det tiltalte mig at "bygge med legoklodser".

Bjarne Due Larsen fik et nyt mål. At lave sin ph.d. om peptider. Men først skulle han skaffe penge. Det var hårdt arbejde, men han gav ikke op, selvom han fik mange afslag. Lykken vendte, da det bl.a. lykkedes at få 3 måneders løn fra Harboes Laboratorium, via Jakob Ramlau.

Alanin giver besvær

Helt tilfældigt valgte Bjarne Due Larsen at arbejde med homo-oligo alanin-sekvenser, som han umiddelbart synes har en lovende struktur. Men alanin kommer hurtigt til at volde ham rigtig store kvaler. Hver gang han lavede et HPLC på sit slutprodukt, fik han Andesbjergene ud – i stedet for en enkelt afgrænset top. Alle de andre studerende reproducerede uden de store problemer en enkelt top hver gang. Han var tæt på at give op. Indtil det en dag lykkedes ham at lave en analysemetode, der klart viste, at Andesbjergene bestod af forskellige alanin-sekvenser: fra ala6-ala10 samt tilsvarende sekvenser med en Fmoc-beskyttelsesgruppe siddende på.

Da han præsenterede sin iagttagelse på et symposium, viste

Gap Junctions

Gap Junctions (eng. ”forbindelser mellem åbninger”), kanalforbindelser mellem naboceller, opbygget af særlige proteiner, kaldet *connexiner*. Cellerne bruger disse kanaler til intercellulær kommunikation. Kommunikationen består i at mindre molekyler og ioner passerer gennem kanalerne. Det er bl.a. Gap Junction-kanaler, der er medvirkende til at hjertet pumper rytmisk baseret på intercellulær kommunikation mellem cardiomyocyterne (hjertemuskelceller).

det sig, at mange andre havde gjort samme observation omkring manglende fjernelse af Fmoc-beskyttelsesgruppen, men troede at de selv var årsag til problemet. Nu manglede der bare en forklaring på, hvorfor det hænger sådan sammen.

Raman bliver nøglen

Heldigvis har resinen polyacrylamid, der bruges til fast-fase peptidsyntesen, to vinduer i ramanspektret. Ramanspektroskopi bliver nøglen til problemet. I samarbejde med Ole Faurskov fra Københavns Universitet viste de ved at måle på amide-I- og amide-III-båndene, at peptidets struktur ændrer sig fra random coil – ustruktureret – til b-sheet lige præcis ved kobling af ala6. Peptidsekvenserne bliver netop så lange, at de nu kan nå hinanden og begynder at danne b-sheet-strukturer, der kommer til at virke som en forøget krydsbinding af polymeren.

Alt stemmer med denne strukturændring. Lige fra koblingshastighederne, der drastisk nedsættes netop efter ala6, til den rent fysiske ændring af resinen: det kan ses med det blotte øje, at peptid-resinen trækker sig sammen (pga. den forøgede krydsbinding som følge af β-sheet-dannelsen).

Løsningen på alanin-problematikken blev at montere lysiner i starten af peptidet, hvorved peptiderne omdannes fra vanskelige sekvenser til ”lette” sekvenser.

Teknologien fik navnet SAPS (Struktur Assisteret Peptid Syntese), og den er kendt for at transformere vanskelige peptider (vanskelige at fremstille) til nemme sekvenser, hvilket har vist sig overordentligt attraktivt i forbindelse med fremstilling af peptidbaserede lægemidler.

Lysinerne viste sig hurtigt at kunne bruges til andet end at lette fremstillingen af vanskelige peptider.

I sin senere ansættelse på Farmaceutisk Universitet i Prodrug-gruppen opdagede Bjarne Due Larsen, at seks lysiner koblet til biologisk interessante peptider kunne beskytte disse mod enzymatisk nedbrydning, samtidig med at deres biologiske aktivitet var bevaret. Teknologien bliver døbt SIP (Struktur Inducerende Prober).

- Dette koncept ligger til grund for dannelsen af Zealand, fortæller Bjarne Due Larsen.

Fra to til fire

Bruce Merrifields føl på Rockefeller University var James P. Tam. Her havde Bjarne Due Larsen arrangeret et post.doc.-ophold, men to gange må han udsætte opholdet, da han noget uventet først bliver far for tredje gang og året efter for fjerde gang. Endelig lykkes det. Bjarne Due Larsen flyttede med familien til Vanderbilt University i Nashville, Tennessee.

Det blev en hård men lærerig tid. Som Bjarne selv udtrykker det – James P. Tam er ikke nogen mr. nice guy, men han er dygtig.

- Jeg kan give dig følgende citater, der meget fint illustrerer dette:

James P. Tam: ”Man har meget mindre tid, end man tror, og det gælder om at udnytte hvert minut optimalt”.

James P. Tam: ”Fokuser 110% på din forskning ellers bliver du ikke god nok (den bedste)”.

Zealand

Opdagelsen af SIP-teknologien på Farmaceutisk Universitet får nogle år senere en afgørende betydning, idet Bjarne sammen med nogle stykker pusler med ideen om at starte en virksomhed med fokus på at udvikle peptid-lægemidler. Ideen er at udnytte den beskrevne SIP-teknologi. Anthony Sinkula rådgiver ham om at patentere ideen i en frygtelig fart, og det gør han for lånte penge.

Eva Steiness, der kommer fra Lundbeck, siger ja til at blive projektleder, og hun får en del andre tidligere Lundbeck-ansatte med.

Samtidig giver Erhvervsstyrelsen 6 mio. kr. og Bankinvest 63 mio. kr., og så går det stærkt.

Zealand har i dag lige godt 100 ansatte. Fokus er udelukkende på opfindelse og udvikling af lægemidler baseret på peptider. Naturligt forekommende peptider nedbrydes meget hurtigt i kroppen. Som fortalt kan man forlænge deres levetid bl.a. vha. SIP-teknologien. Zealand fokuserer på at udvikle produkter mod sygdomme på det kardio-metaboliske område, så som diabetes og fedme. I marts 2013 kom virksomhedens første diabetesmiddel, lixisenatid på det europæiske marked, markedsført under navnet Lyxumia® af medicinalgiganten Sanofi.

Zealand har i dag en bred pipeline af peptid-baserede lægemidler, der også danner grundlag for en række profitable samarbejdsaftaler. Herunder aftalen med Sanofi vedrørende Lyxumia®, der fra og med i år forventes at generere vedvarende licensindtægter til virksomheden, og som også udvikles som et kombinationsprodukt sammen med Lantus® (verdens mest udskrevne insulin). Der er også en aftale med Boehringer Ingelheim vedrørende ZP2929, et helt nyt dobbeltvirkende peptid-produkt, der er i klinisk udvikling som et potentielt nyt middel til behandling af diabetes.

Et nyt ben kunne nemt blive Gap Junction-modulerende peptider.

- Jeg tror, at Gap Junction-området i de kommende år vil byde på en række nye lægemidler ikke kun til behandling af sygdomme i hjertet, hvor Zealands fokus for projektet er for nuværende, men også til en række andre tunge indikationer såsom diabetes, inflammation, blodpropper etc., slutter han.

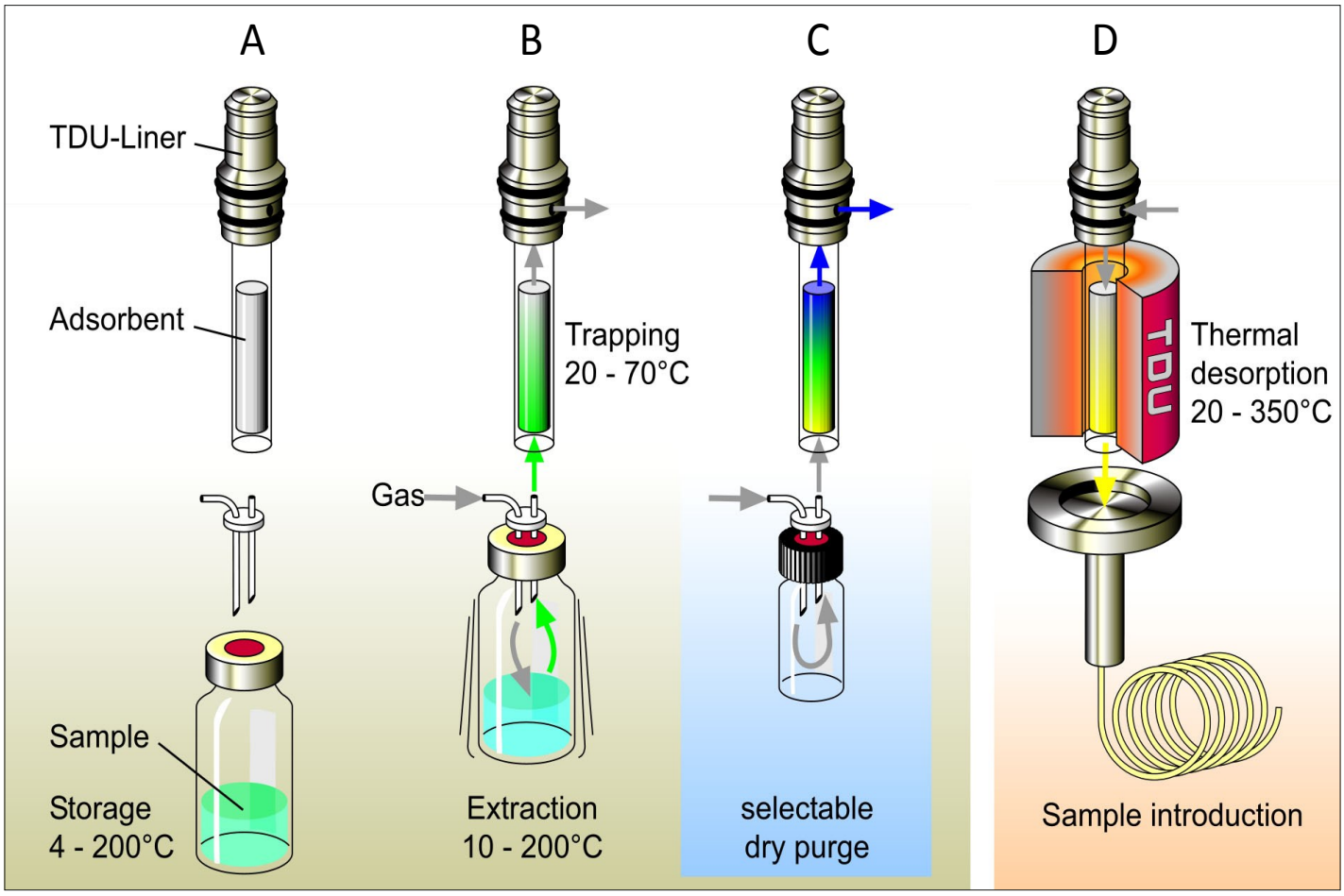
Automatiseret dynamisk headspace

- den letteste vej til høj følsomhed ved analyse af lavmolekylære stoffer.

Af Jens Glastrup, Rikke Bendixen og Tore Vulpius, MSCi Aps

Analyse af stofblandinger med en gaskromatograf forudsætter, at de indgående enkeltkomponenter har en vis flygtighed. Dog kan man med passende valg af injektor og kolonne udmærket analysere stoffer med en molekylvægt på op mod 1000g/mol.

lige og kunstige aromasammensætninger, og mono- og flerumættede hydroxy- og oxo-forbindelser er nyttige indikatorer for oxidationen af fedtsyrer, og dermed for vores opfattelse af fødevarer som friske eller harske. Organiske svovlforbindelser har stor betydning for aromadannelsen i ost, kaffe og øl, og såmænd også for duften fra såvel råddent tang som fra svinestalde. Næsten alle indgår i den samlede aroma i lave ppb-ni-

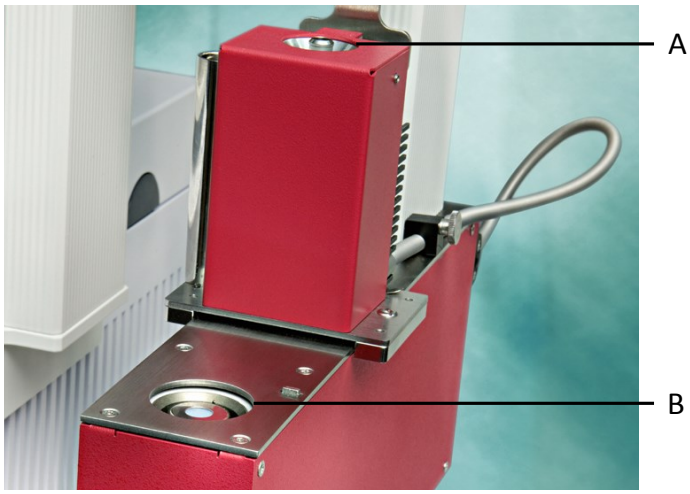


Figur 1. Funktionen af Gerstel Dynamisk Headspace(DHS). A: Vial med prøve (nederst) sammenkobles med adsorptionsrør (øverst) vha. en dobbeltnål. B: Det gyroskopisk ophængte vial omrøres, samtidig skylles vial med purge-gas, typisk 200-500 mL, hvorved flygtige komponenter flyttes over på adsorptionsrøret. C: Hvis nødvendigt kan adsorptionsrøret tørres med tør purge-gas. D: Adsorptionsrøret flyttes til den termiske desorber, og prøven påsættes GC.

I den modsatte ende af skalaen, de helt små komponenter fra C_1 til C_{15}, er det lettere at få stofferne gennem systemet; til gengæld ligger der mange andre udfordringer ved analysen af disse. Netop fordi de har et højt damptryk forsvinder de let fra matrix, og de kan være vanskelige at fange reproducerbart.

Mange af disse stoffer har stor betydning for stofblandingers aroma, såvel god som dårlig. Monoterpener er vigtige i naturveauer, i en ofte særdeles kompleks heterogen og/eller emulsionsmatrix. Det vil derfor ofte være nødvendigt at analysere gasfasen over prøven i et forsøg på at karakterisere de vigtige komponenter. Det stiller store krav til analysemetoden, samt til det apparatur som skal anvendes.

Statisk headspace udtager en prøve af gasfasen og analyserer den med GC. Denne metode giver sjældent tilstrækkelig



Figur 2. Gerstel DHS monteret på autosampleren. A: Holder til adsorptionsrør og B: Holder til vial med prøve. Holderen A er monteret på en slæde, ved analyse køres A over B, og dobbeltnålen forbinder de to enheder.

følsomhed til karakterisering af aromakomponenter. Dynamisk headspace (DHS) flytter gasfasen over på et adsorptionsrør, og da ligevægten forskubbes og nye molekyler kommer op i gasfasen kan DHS stort set "tømme" en prøve for flygtige komponenter i løbet af relativt kort tid. Når tømningen er fuldført, flyttes adsorptionsrøret over i den termiske desorber, og komponenterne desorberes over i injektoren og analyseres på almindelig vis.

Specielt i USA har en parallel metode været populær, purge-and-trap, hvor man gennembobler en væskeformig prøve og dermed river komponenter med over på adsorptionsrøret. Flygtighedsintervallet for analytterne er i begge tilfælde typisk fra C_1 til C_{15}.

I begge tilfælde giver metoderne anledning til lave detektionsgrænser. Akilleshælen ved begge typer af analyse er tendensen til at hvirvle aerosoler og/eller støv (afhængig af matrix) med i bæregassen. Det er helt essentielt for en god DHS-analyse, at det kun er gasserne, der overføres. I denne henseende er DHS typisk lidt mindre kritisk end purge-and-trap, idet gennemboblende bæregas i purge-and-trap næsten altid vil rive små mængder af aerosol med, som efterfølgende vil sætte sig længere inde i systemet. Hvis og når det alligevel sker, er det derfor ligeledes essentielt at systemet er nemt at rense.

Opbygning af DHS-udstyr

GERSTEL DHS-udstyret er opbygget over standard autosampleren (MPS), hvor såvel adsorptionsrør som vials med prøver til analyse står i en tray. Man kan vælge, om man vil bruge samme adsorptionsrør hver gang, eller om der skal anvendes et nyt for hver prøve. Det er typisk nok med 1-2 mL prøve i et 20 mL vial, idet dette normalt giver en følsomhed på 0,1-1 ppb. Der er lagt mange kræfter i at gøre omrøringen så effektiv og samtidig så nænsom som mulig, og vial er derfor ophængt gyroskopisk, med en stillestående top og en bevægelig bund.

Den automatiserede procedure er følgende, se også figur 1.

- Vial til analyse flyttes over i DHS-holder, omrøring og opvarmning til ønsket temperatur starter (**A**).
- Adsorptionsrør flyttes til DHS-holder og rør og vial sammenkobles, så der kan skylles med inert gas, N_2 eller He. Flygtige komponenter flyttes fra gasfase til adsorptionsrør (**B**).
- Adsorptionsrør afkobles fra vial og eventuelt vand fjernes med en "tørregas" (**C**).
- Adsorptionsrør flyttes til den termiske desorber (TDU). TDU opvarmes, CIS holdes kold. Herved overføres analytter til CIS (**D**).
- Når alle komponenter er overført, adsorptionsrør fjernes, blindrør sættes i, CIS varmes op og analytter kromatograferes.

Selve DHS'en ses i figur 2, holderen til adsorptionsrørene ses øverst (**A**) og holderen til vial nederst (**B**). Der er ganske mange trin involveret i processen, men disse udføres, mens GC kører den foregående analyse. Denne vil, under næsten alle omstændigheder, være længere end præparationstiden. Der vil derfor altid være ensartede prøveforberedelsesbetingelser før injektion. Til gengæld skal køletray overvejes til prøverne, hvis der er tale om sensitivt materiale. Der er typisk plads til 30-80 kørsler/døgn, afhængig af analysetiden.

Desorptionen sker i modsat retning af adsorptionen, altså efter sidst-ind-først-ud princippet, og det giver derfor god mening at anvende double- eller triple-bed sorbenter, med en svag adsorbent nederst, en middel adsorbent i midten og en stærk adsorbent øverst. DHS anvendes typisk ved sporanalyser, og der er derfor sjældent brug for høj kapacitet, men ofte for adsorption af vidt forskellige komponenter med forskellig polaritet og molekylvægt. Ved at anvende multi-bed adsorbenter vil de stærkt adsorberende analytter sætte sig på den svage adsorbent, længere oppe vil de svagere adsorberende analytter sætte sig på den stærke adsorbent. Den efterfølgende eluering i TDU, i modsat retning, sikrer, at de stærkt adsorberende analytter aldrig kommer i nærheden af den stærke adsorbent, hvilket ellers kunne give anledning til carry-over-problemer. ▶

Intelligent Chemistry

Now available from Biolab A/S: Hands Free Pipetting

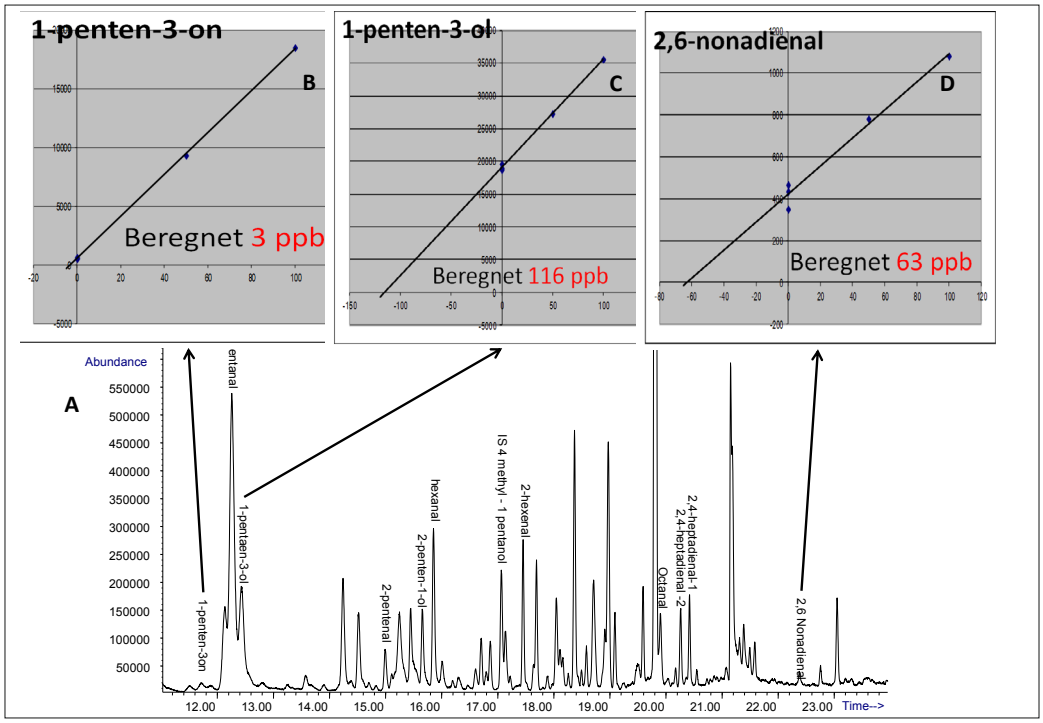
Andrew™

The Innovative fully automated Pipetting Robot using Original Gilson Pipetman

BIO LAB

Andrew Alliance

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



Figur 3. Analyse af to-fase-system, 70% olie i mælk. Autosampler GERSTEL MPS med DHS, GC/MS Agilent 6890/5973. Fokus var på aroma- og oxidationskomponenter fra C_5-C_9. Adsorptionsrøret var pakket med TenaxTA, mens genfokuseringen i injektoren skete med en Carbotrap pakket liner. Temperatur prøve: 40°C, Temperatur adsorptionsrør: 40°C. Gas skyllevolumen 250 mL.
Kolonne: Rested Rxi-624Sil, 30 m, 0,32 mm i.d., 1,8 µm. Kromatogrammet er vist i Scan, hvorimod kvantiseringerne er kørt i SIM-mode.
A: Kromatogram af den analyserede prøve, med de vigtigste analytter indskrevet over de respektive toppe. Ovenover kvantisering af tre udvalgte komponenter, alle med standardaddition: 3 prøver uden tilsætning, 1 prøve med tilsætning af 50 ppb og 1 prøve med tilsætning af 100 ppb: B: 1-penten-3-on, C: 1-penten-3-ol og D: 2,6-nonadienal.

Praktiske eksempler

Praktisk erfaring

Vores praktiske erfaring viser, at metoden er specielt velegnet til komponenter fra C_1 til C_{15}. Større komponenter har for lavt damptryk, og vil derfor være vanskelige at få overført med tilstrækkelig stor følsomhed. Her vil almindelig væske-ekstraktion, brug af SPME, Twister's eller direkte termisk desorption være at foretrække. Væske-, to-fase-systemer eller faste materialer giver alle gode resultater og god linearitet ved standardaddition.

Metoden er derfor specielt velegnet til aromakomponenter, oxidationsprodukter mv., og vi har i det følgende valgt et par eksempler fra fødevareindustrien.

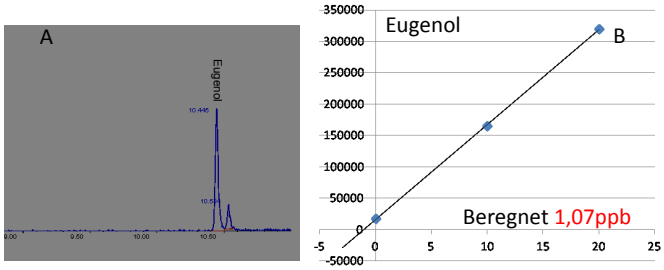
To-fase-system med 70% olie-vand-blanding.

Prøverne skulle undersøges for aromakomponenter, typisk alkoholer og enkelt- eller flerumættede oxo-forbindelser i det lave ppb-område. To-fase-systemer kan være analytisk krævende pga. muligheden for at såvel polære som ikke polære komponenter "helst" vil være i væskefasen. Det kan derfor også være vanskeligt at lave almindelige kalibreringskurver for denne type af analyse. I stedet er der anvendt standardaddition, hvor der er kørt tre analyser af prøven og herefter tilsat 50 ppb og 100 ppb til yderligere to prøver. Der skal altså køres 5 x 1 mL prøve/kvantisering, men også standardadditionen kan automatiseres via autosampleren.

Kromatogrammet af en analyse ses i figur 3A, og tre udvalgte kvantiseringer er taget med som 3B, 3C og 3D. I alle tre tilfælde er der god linearitet på de udvalgte komponenter. Kvantiseringsgrænsen for de analyserede komponenter i prøvematerialet ligger typisk på 0,1-1 ppb. Det skal bemærkes, at kvantiseringen af 2,4-nonadienal var den ringeste af alle kørte kvantiseringer.

Analyse af faste prøver for indhold af reststoffer

En anden type af analyse vi har udført er lave rest-koncentrationer af eugenol i et fast, men meget finkornet pulvermateriale. Udfordringen her var igen at undgå ophvirvling af matrix, så en forurening af adsorptionsrør blev undgået, og samtidig skulle der udføres en kvantisering af komponenten i den faste matrix. I figur 4A ses kromatogrammet af de ekstraherede komponenter samt den beregnede værdi (4B) ud fra standardaddition. Der blev igen anvendt 5 prøver/kvantisering.



Figur 4. Kromatogram af pulverprøve med indhold af eugenol. Prøven er kørt i scan mode, men kun *m/z* 168 er vist (A), og det er også denne ion, der er kvantiseret på ved standardaddition (B). Betingelser som ovenfor, men der er afvejet 0,5 g fast prøve til hver analyse. Standardaddition blev foretaget med 10 og 20 ppb

Konklusion

Hvad angår analysen af små komponenter i komplicerede matricer har DHS i næsten alle tilfælde levet op til vore ønsker om god følsomhed og muligheden for reproducérbar kvantisering. Pga. de komplicerede og forskelligartede matricer har det for det meste været nødvendigt at undgå almindelige kalibreringskurver og i stedet anvende standardaddition. Det betyder typisk 5 kørte prøver pr. analyse. Kvantiseringerne har vist god linearitet i næsten alle de typer af analyser, vi har udført. I alle de udførte analyser har det været muligt at undgå forurening med aerosoler/pulvere fra vial til adsorptionsrør. Det har derfor ikke været nødvendigt at skifte adsorptionsrør under analysen, idet det jo netop bliver udbagt mellem hver kørsel. Det er vores overbevisning, at en god del af grunden til den gode kvantisering såvel som den gode følsomhed ligger i den nænsomme og konstante mekaniske omrøring. Det er sandsynligt, at automatiseret DHS, specielt ved 2-fase systemer og mere eller mindre faste materialer, vil være "håndholdt" dynamisk headspace overlegent, idet den sikrer en mere ensartet prøveforberedelse, end det er muligt ved manuel håndtering.

E-mail
Jens Glastrup: jens@msconsult.dk

45 år med computersimuleringer

Computersimuleringernes "grand old man" i Danmark, professor Søren Toxværd, er still going strong.

Af Jeppe Dyre, grundforskningscentret
Glas og Tid, RUC

Søren Toxværd startede med computersimuleringer ved Københavns Universitet i 1970 med datidens primitive computer, og han har været med i branchen lige siden. Nu er han tilknyttet grundforskningscentret *Glas og Tid* på RUC.

JD: *Du har lavet computersimuleringer i en menneskealder og er en af fagets internationale pionerer – hvad er egentligt formålet med sådanne simuleringer?*

ST: Der er forskellige typer simuleringer – jeg arbejder med såkaldt "molecular dynamics", som løser Newtons bevægelsesligninger. Herved kan man opnå en grundlæggende indsigt, men også få udviklet bedre materialer. Eksempelvis laver man i dag computersimuleringer i medicinalindustrien for at designe ny medicin.

JD: *Er det ikke bedre at lave rigtige eksperimenter?*

ST: Metoderne supplerer hinanden. I eksperimenter ser man typisk den makroskopiske opførsel, og det er ofte vanskeligt at se, "hvad der foregår" på molekylniveau. Det er computersimuleringernes force, at her har man det fulde mikroskopiske billede.

JD: *Fortæl om hvordan du kom i gang – hvordan startede det hele for dit vedkommende?*

ST: Jeg blev interesseret i simuleringer allerede i 1966, men da var computerne simpelthen for langsomme. Min første simulering her i landet blev lavet på RECKU's store Univac mainframe-computer en gang i starten af 1970'erne.

JD: *Hvor store beregninger kunne man lave den gang?*

ST: Tunge simuleringer blev udført om natten. I løbet af en nat kunne man følge 1000 partikler i et nanosekund, hvis man var meget omhyggelig med at optimere sit program. Samtidig skulle man være yderst tålmodig, fordi den mindste fejl gjorde, at man måtte lave hele simuleringen forfra, dvs. så gik der yderligere en nat…

JD: *Hvad var holdningen til computersimuleringer i det brede videnskabelige samfund den gang?*

ST (griner): De fleste forskere mente, man legede med computerne, at det bare var at betragte som en slags computerspil. I stedet mente man, at computere skulle bruges til databehandling, dvs. til analyser af eksperimentelle data.

JD: *Udviklingen inden for computer-power har jo været*

Søren Toxværd.

helt fænomenal - hvad bringer fremtiden, tror du, inden for computersimuleringer?

ST: Hm – jeg har altid undervurderet udviklingen, så hvis det fortsætter, så kommer der meget. Rigtigt meget!

JD: *Hvor går fronten for tiden inden for computersimuleringer?*

ST: En af de senere års meget spændende udviklinger er, at man i stor stil benytter grafikkort med mange processorer (nu mere end 1000). Vi fik umiddelbart en speed up på en faktor 25, da vi ved Glas og Tid i 2008 gik i gang med at bruge GPU-processorer. To år senere lancerede vi den superhurtige GPU-kode til molecular dynamics (http://rumd.org), som frit kan benyttes af enhver. Et GPU-kort som kan lave et tusinde milliarder regnestykker i sekundet koster kun et par tusinde kr., det er da tankevækkende.

JD: *Vil man en dag helt kunne undvære eksperimenter?*

ST: Nej det kan man ikke. Også i fremtiden vil der være et samspil mellem computersimuleringer og eksperimenter, som man f.eks. ser det lige nu i opbygningen af den kæmpestore europæiske neutronspredningsressource i Lund, ESS, der indvies i 2019.

JD: *Til slut, hvad vil du anbefale et ungt menneske med interesse for kemi eller fysik – skal han eller hun gå computervejen eller blive ved traditionelle laboratorieeksperimenter?*

ST: Det helt afgørende er, at vælge det man er mest tiltrukket af. Når det er sagt, opfatter jeg den eksperimentelle vej som næsten en "livsbane", fordi man som forsker ofte får dyrt apparatur bevilget og derfor har en forpligtelse til at holde sit laboratorium kørende over mange år. Som den individualist jeg er, har det været sjovt at arbejde med computersimuleringer pga. den større fleksibilitet. Men som sagt: Det vigtigste er at følge sine interesser - ellers bliver det næppe god forskning, der kommer ud af det.

E-mail
Jeppe C. Dyre: dyre@ruc.dk

Tantal – et spændende metal

En donation fra Nordea-fonden medførte i 2012, at 3.xKe på Aabenraa Statsskole fik et spændende, naturvidenskabeligt projekt med fokus på at undersøge grundstoffet tantal.

Af lektor Karl P. Larsen, Aabenraa Statsskole

I forbindelse med Dansk Naturvidenskabsfestival 2012 var det, takket været en donation fra Nordea-fonden, muligt at søge om midler til gennemførelsen af utraditionelle naturvidenskabelige projektforløb. Forinden havde jeg haft fornøjelsen af at deltage i to finalerunder af det nu hedengangne DM for Naturfagslærere og var faktisk allerede gået i gang med næste ide.

Ifølge Stx-bekendtgørelsen for bl.a. kemi B-nivauet skal der undervejs behandles:

Stoffers anvendelse i hverdagen og i teknologisk sammenhæng

Og som kernestof også uorganisk kemi

med stofkendskab til udvalgte forbindelser af metaller.

En moderne mobiltelefon indeholder et antal kondensatorer, hvor det dielektriske materiale er tantal(V)oxid, men hvad er så tantal?

Ta-kondensatorer til XRF-undersøgelser; eget foto.

Yderligere inspireret af det meget smukke GEUS-kort over forekomster af metaller og mineraler på Grønland var det oplagt(!) at undersøge grundstoffet tantal, et metal, eleverne i 3.xKe næppe havde hørt om før.

Ansøgningen blev imødekommet, og det gav mulighed for at inkludere et antal spændende aktiviteter i projektet, herunder besøg af eksperter og ekskursioner "ud-af-huset". Ta-metal og Ta-forbindelser er i øvrigt heller ikke billige!

Tantal-projektet

Projektet var centreret i ugerne omkring Naturvidenskabsfestivalen (uge 39) og fremefter.

Program

Indledning: Om fasediagrammer, røntgendiffraktion og røntgenfluorescens.

Tantals geokemi: Forekomst, udvinding etc. Foredrag ved seniorrådgiver Per Kalvig, GEUS, København.

Tantals fysik og kemi: Eksperimenter i eget kemilaboratorium.

Syntese af uorganiske materialer: Foredrag ved adjunkt Mogens Christensen, KI/ÅU.

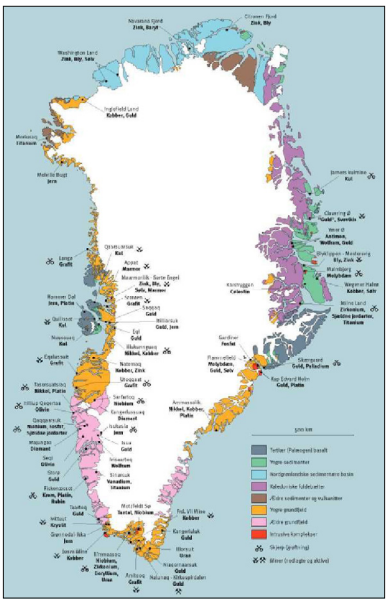
Analysemetoder: Røntgenfluorescens, røntgenkrystallografi. Besøg med eksperimenter på KI/ÅU, Lab. for uorganisk kemi og Lab. for analytisk Kemi.

Besøg på Dong Energy, Ensted, ICP-OES–analyser.

Anvendelser af tantal: Besøg på Tantaline, Danfoss, Nordborg.

Evaluering: Grupperapporter, udstilling på skolen.

Det overordentligt inspirerende foredrag ved seniorforsker Per Kalvig, der havde lavet et helt specielt foredrag til lejligheden, var stærkt medvirkende til, at forløbet blev en succes. For mange elever er grundstoffer og kemikalier noget, det står på hylder eller rulleborde i nydelige små beholdere, men med foredraget blev det klart, at vejen fra forekomsten i grundfjeldet til det færdige produkt ofte er lang og teknisk besværlig og oftest iblandet økonomiske og måske endda politiske overvejelser, jvf. coltan-problematikken i det centrale Afrika.



GeoViden, 2005, no. 1, p. 19.

Der var således en kærkommen lejlighed til at slå et slag for geokemien, som i lyset af udviklingen i grønlandsk minedrift måske vil komme til at indtage en mere synlig plads i gymnasiets kemiundervisning fremover.

Mogens Christensen, KI/ÅU holdt et spændende foredrag om moderne syntesemetoder. Indlægget gav eleverne et glimrende indblik i, hvordan der arbejdes med kemien på universitets-

Per Kalvig, GEUS. Skolens geolog var med; eget foto.

niveau. De var således godt rustede til besøgene på Kemisk Institut ved Århus Universitet, hvor de fik lejlighed til at prøve analyseteknikkerne PXRD og røntgenfluorescens på diverse tantal-prøver.

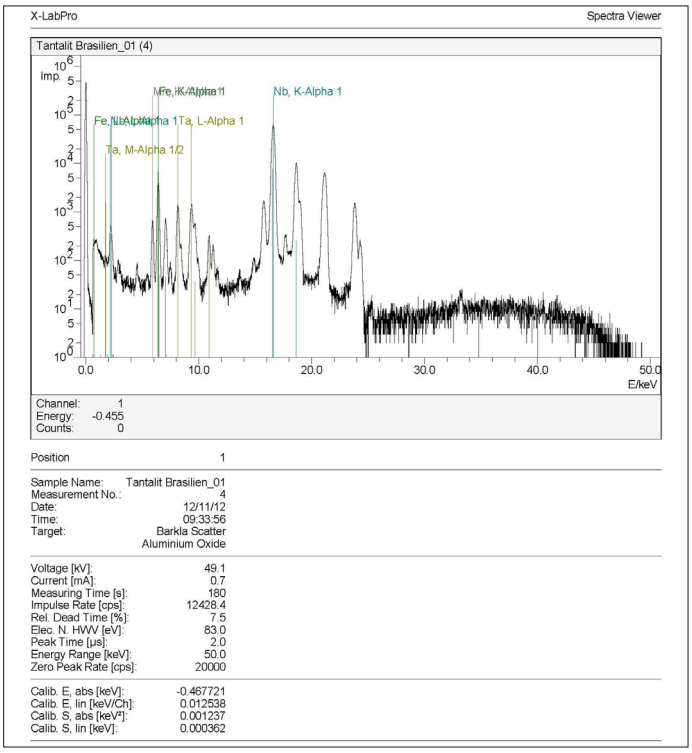
Moderne PXRD-udstyr er imponerende; eget foto.

Afprøvning af teknikker

Der blev bl.a. målt XRF på tantalit ($FeTa_2O_6$), som det viste sig at være ganske svært at fremskaffe.

Tantalit; www.mindat.org

Det viste sig, at der også var Nb i prøven, hvilket bekræftede udsagnet om, at Nb og Ta ofte erstatter hinanden i mineraler.



Tantalit, XRF; eget eksperiment.

3 års garanti på instrumenter

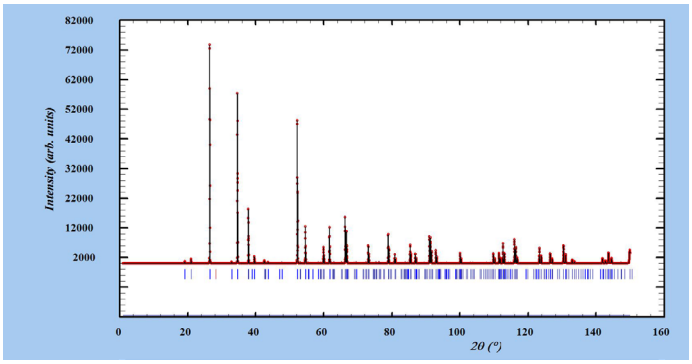
PCR
ELISA
Pipettering
Ekstraktion
HPLC

Robotter 4 tip fra 175.000,-
PCRcykler fra 32.500,-
ELISA vasker fra 19.500.-
ELISA reader fra 29.500,-
oma.

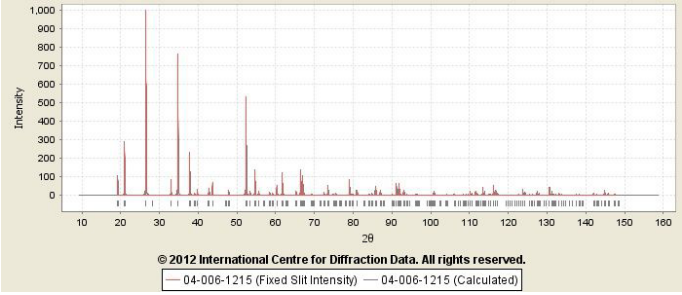
Laboratory, Automation & Technology
www.lat-int.com tlf 70237740
De opgivne priser er ex. moms, levering, kursus og installation, så længe lager haves.

På lignende vis blev det bekræftet, at der var Ta i de små gule kondensatorer.

Pulverdiffraktionsteknikken blev afprøvet under kyndig vejledning af Anders Blichfeld, og det var rart at se, at det dyrt indkøbte mineral faktisk var tantalit:



Tantalit, PXRD; eget eksperiment.



Tantalit, PXRD, PDF-card.

På Dong Energy, Enstedværket, blev der i deres særdeles veludstyrede analyselaboratorium (ikke mindre end tre ICP-opstillinger, herunder ét MS-koblet) lavet ICP-OES-målinger på Ta og Ta_2O_5. Kalibreringskurver med R^2-værdier på 1,000 overbeviste eleverne om værdien af omhyggeligt laboratoriearbejde og bekræftede prøvernes renhed.

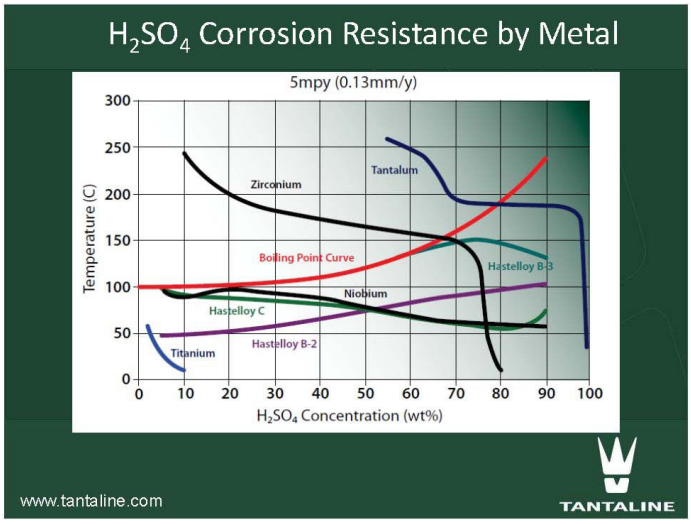
Princippet i ICP-OES gennemgås; eget foto.

Besøg hos Tantaline - anvendelser

Sidste led i projektet var et besøg hos firmaet Tantaline, der har til huse i lejede bygninger hos Danfoss i Nordborg.

Dette firma kan i en delikat proces, der involverer metallisk Ta, Cl_2 og H_2 og $TaCl_5$ i gasform og særdeles nøje kontrol af temperaturforløbet, belægge diverse metalemner med et lag af Ta, som har vist sig at være særdeles resistent overfor specielt stærke syrer.

Og hvem var så Tantalus? www.tantaline.com



Ta-resistens over for svovlsyre; Tantaline pp-show, dia 10.

Direktør Peter Lock berettede entusiastisk om firmaets start og fremtidsudsigter, der synes gode, og ganske aktuelt har der på det seneste været en artikel om firmaet i DTU´s Dynamo nr. 32, marts 2013. Så selv "nørdede" metaller er faktisk vigtige.

Det har naturligvis ikke været tanken at gøre eleverne til krystallografer eller analysekemikere, men bevillingen fra Nordea-fonden gjorde det muligt, med udgangspunkt i, hvad Per Kalvig kalde et "lidt nørdet metal", at vise teoretisk og anvendt kemi på højt niveau og give et lille indblik i, hvilke spændende muligheder kemien tilbyder på de videregående studier og i industrielle anvendelser.

Tre af eleverne valgte efterfølgende SRP-opgaver, der var direkte relaterede til indtryk, de fik i løbet af Ta-projektet (syntese og analyse af magnetiske materialer, diamanter og substitutter herfor og fluorescens; de to første med praktikophold på KI/ÅU).

Bevilgede midler i 2013

Der er også bevilget midler fra Nordea-fonden i forbindelse med Dansk Naturvidenskabsfestival i efteråret 2013, så jeg kan kun på det varmeste anbefale, at man udnytter denne glimrende mulighed for at tilføre kemiundervisningen spændende aspekter, der ellers kun meget vanskeligt ville være økonomisk mulighed for.

Til slut en stor tak til Nordea-fonden, seniorforsker Per Kalvig, GEUS, adjunkt Mogens Christensen, KI/ÅU, Anders Blichfeld, KI/ÅU, lektor Niels Pind, KI/ÅU, laboratoriechef Edith Thomsen, Dong Energy og direktør Peter Lock for deres store velvillighed og indsats i forbindelse med projektet.

E-mail
Karl P. Larsen: karl.peder.larsen@skolekom.dk

Dette er 2. artikel i en serie om dielektrisk spektroskopi. Første artikel blev bragt i Dansk Kemi nr. 3, side 26-28.

Dielektrisk spektroskopi i aktion som nyttigt polymeranalyseværktøj

Dielektrisk spektroskopi er blevet langt mere tilgængeligt som karakteriseringsværktøj både offline og direkte tilsluttet forskelligt produktionsudstyr. Her gives en række eksempler på anvendelser, hvor ellers svært tilgængelig information er blevet langt nemmere at opnå vha. dielektrisk spektroskopi.

Af Anders Egede Daugaard[1], Anne Ladegaard Skov[1], Jesper Poder Bøgelund[2]
[1]DTU, Institut for Kemiteknik, [2]Teknologisk Institut.

Ved fremstillingen af polymerkompositter indeholdende et fyldstof og en matrice er det vigtigt, at fyldstoffet fordeles effektivt. Kun på denne måde opnås den bedst mulige effekt af et givent fyldstof. Ofte vil dårlig fordeling af fyldstoffet resultere i en forringelse af de oprindelige egenskaber af polymeren. Dispergeringen af fyldstoffet afhænger af matricen såvel som fyldstoffet, og det er derfor interessant at kunne bestemme, hvorvidt en given opblandingsmetode er mere effektiv end en anden.

Dispergering af ekspanderet grafit i silikonegummi

I dette eksempel fremstilles en silikone-elastomerkomposit fyldt med ekspanderet grafit (EG) ved tre forskellige opblandingsmetoder. Dispergeringen af den ekspanderede grafit i elastomeren er yderst vigtig, da sammenklumpning af grafit forringer både silikonens elektrisk isolerende egenskaber og dens mekaniske egenskaber. Der blev benyttet tre forskellige opblandingsprocedurer:
1) Mekanisk opblanding.
2) Speed-mixing.
3) Ultralydsbehandling kombineret med speed-mixing.
De tre metoder forventes at give forskellig dispergering af fyldstofferne. Både speed-mixing og ultralydsbehandling er velkendte metoder til fordeling af nanopartikler i polymersystemer. Ultralyd er normalt mest effektivt, hvor matricen er en opløsning, der ikke er for viskøs, hvorimod speed-mixing er udviklet specifikt til fordeling af nanomaterialer i højviskøse materialer som silikone.

Efter opblanding er de fremstillede blandinger krydsbundet til faste film, der er undersøgt ved dielektrisk spektroskopi, som illustreret i figur 1, side 20.

Af figur 1 ses den dielektriske permittivitet for de forskellige blandinger ved 100 Hz. Det fremgår tydeligt, at den dielektriske permittivitet af film fra de tre blandingsprocedurer er identisk ved lave koncentrationer af EG. Ved mere end 2% EG i matricen er der klar forskel på de tre blandingsprocedurer, og det ses, at permittiviteten for den mekaniske blanding ikke stiger i samme takt med koncentrationen som for de to andre blandingsprocedurer. Stigningen i permittiviteten er relateret til ▶

Ampliqon
Bioreagents & PCR Enzymes

Danske enzymer til dansk bio-tek

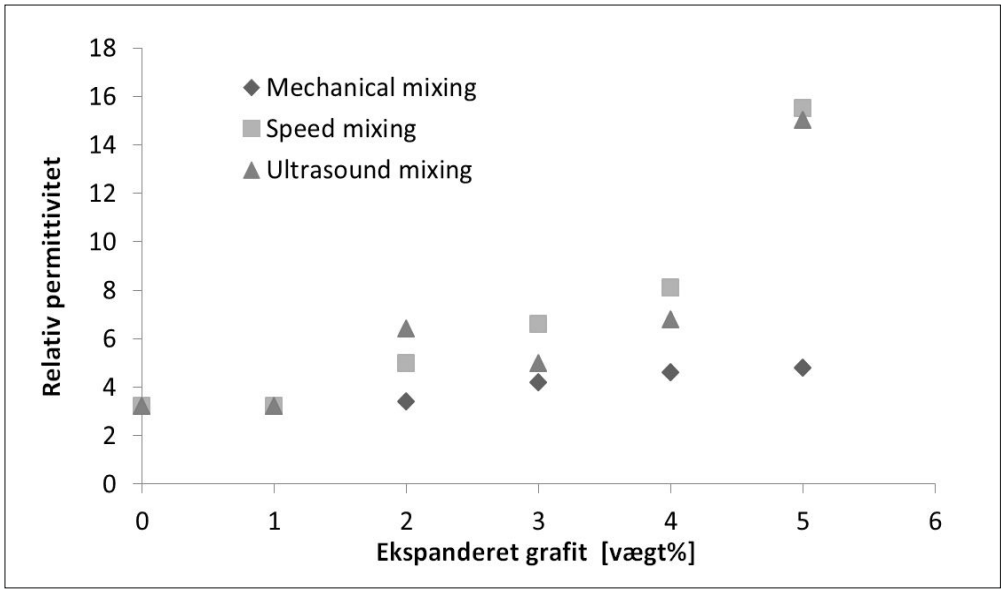
Ampliqon A/S er dansk producent af DNA polymeraser og reagenser.

Ampliqon tilbyder kvalitets enzymer og bufferløsninger til bl.a. PCR, qPCR og high fidelity PCR.

Kvalificerede og engagerede medarbejdere står klar til at yde hjælp med problemløsning og udarbejdelse af brugertilpassede enzym-mix.

Som dansk producent kan Ampliqon tilbyde danske kunder høj kvalitet og kort leveringstid til attraktive priser.

Ampliqon A/S • Stenhuggervej 22 • DK-5230 Odense M • Denmark
www.ampliqon.com • Mail: sra@ampliqon.com
Phone: +45 70201169 • Mobile: +45 61276075



Figur 1. Relativ permittivitet ved 100 Hz for prøver indeholdende en stigende mængde ekspanderet grafit (EG), der er fremstillet ved de tre forskellige opblandingsmetoder.

det realiserede overfladeareal af nanopartiklerne. Ved effektiv fordeling vil der opnås et større overfladeareal og dermed også en større grænseflade imellem elastomeren og fyldstoffet. Polariseringen af denne grænseflade er direkte sammenhængende med kapacitansen af materialet og dermed også til permittiviteten. Dermed kan man sige, at den mekaniske opblanding er dårligere end de to andre metoder, der anvender speed-mixeren.

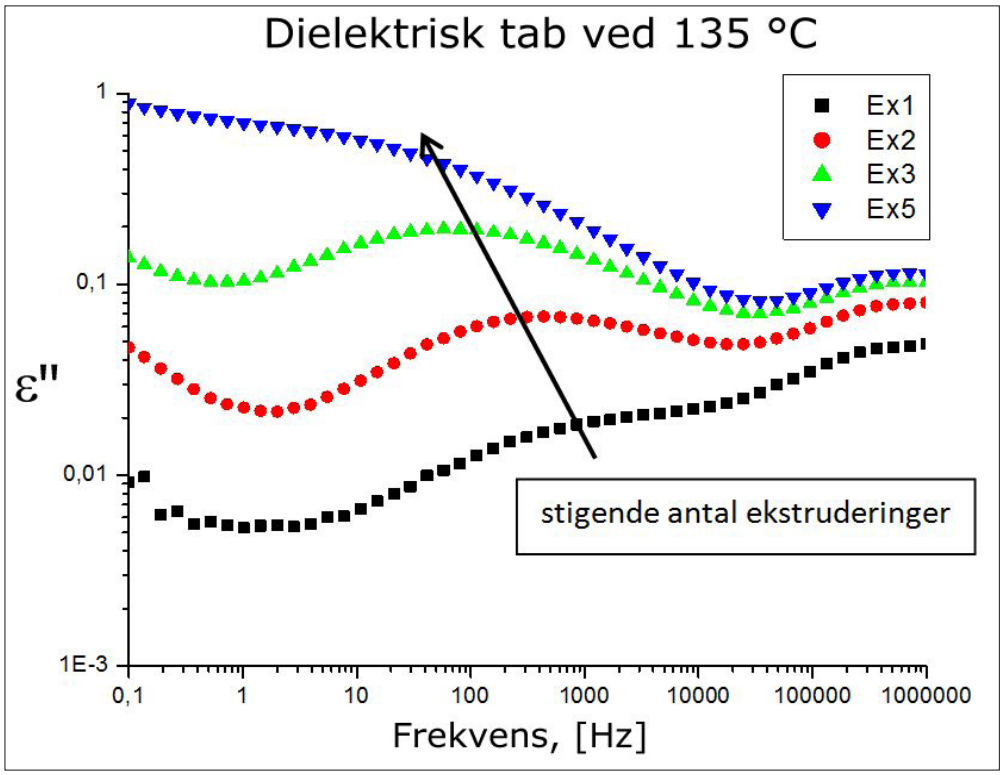
For at understøtte ovenstående målinger er de reologiske egenskaber af filmene også undersøgt, og de bekræfter tendensen [1].

Dispergering af nanopartikler i termoplast

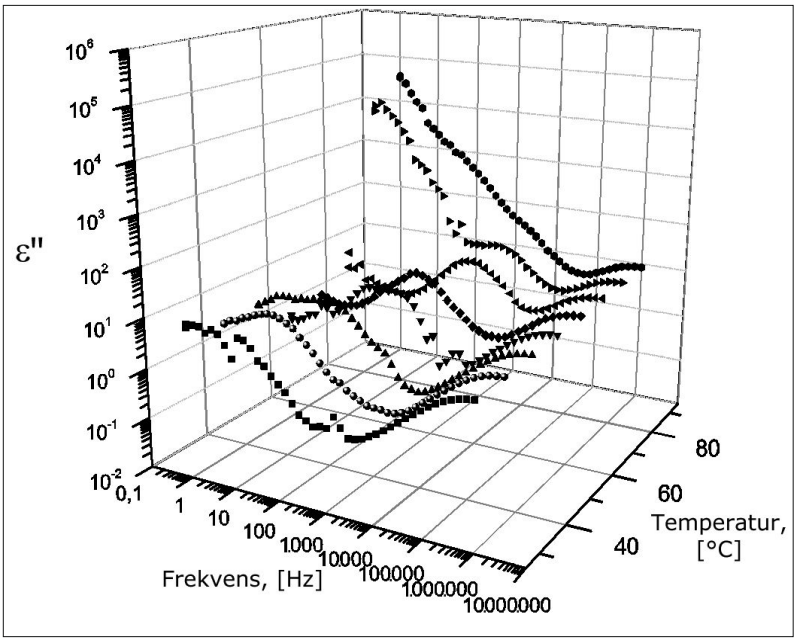
Dispergering af nanopartikler i termoplast er en meget udfordrende proces. Dels fordi nanopartikler er svære at dispergere grundet stærke vekselvirkninger mellem partiklerne, dels fordi det er vanskeligt at karakterisere, hvor god dispergering man har opnået, når partiklerne er for små til at kunne ses i optisk mikroskop. For termoplastmaterialer er kompoundering i en dobbeltsnekket ekstruder på nuværende tidspunkt den teknik, der giver den bedst mulige dispergering af partikler efter processering. For at illustrere effekten af ekstruderingsprocessen til dispergering af nanomaterialer er her fremstillet en polypropylen (PP) komposit med nanoler. Kompositmaterialet er ekstruderet 5 gange, og der er udtaget prøver til analyse efter hvert gennemløb. Materialeprøverne blev analyseret ved dielektrisk spektroskopi som vist i figur 2.

Ændringer i kompositten dielektriske egenskaber ses i flere af de målte materialeparametre i figur 2, herunder ved imaginærdelen af den komplekse permittivitet; det dielektriske tab ε", som er et mål for, hvor meget energi det elektriske felt afsætter i materialet. Det fremgår af figur 2, hvordan den lavfrekvente relaksationstop i spektret forskydes mod lavere frekvenser som følge af den forøgede opholdstid i ekstruderen. En anden relaksationstop, som lige netop er synlig i den højfrekvente del af spektret, viser ingen afhængighed af processeringen. Som det ses af figur 2, er der en klar ændring i det dielektriske spektrum ved øget opholdstid i ekstruderen. Da indholdet af ler i kompositionen er uændret mellem de forskellige prøver, er ændringerne udelukkende et resultat af forbedret dispergering af nanoleragglomeraterne i polypropylenmatricen. Grænsefladen mellem nanolerpartiklerne og plasten fungerer i princippet som en lille kapacitor, der op- og aflades af det elektriske felt. Jo større denne grænseflade er, jo større kapacitans vil materialet som helhed have, og jo større bliver tidskonstanten for op- og afladningsprocessen. En større tidskonstant svarer til en lavere frekvens, hvorved forøgelse af grænsefladen fører til en forskydning af resonanstoppen mod lavere frekvens. Da der ikke tilsættes yderligere nanoler mellem ekstruderingerne, kan den forøgede grænseflade kun skabes ved neddeling og dermed dispergering af nanoleren.

Gennem omfattende reologiske analyser af prøverne kunne det udledes, at polymeren først ved opholdstider over 90 sekunder begyndte at vise svage tegn på termomekanisk



Figur 2. Det dielektriske tab – ε" – som funktion af frekvensen for materialet indeholdende nanoler. Hver ekstrudering svarer til 30 sekunders opholdstid, og for hver forøgelse af opholdstiden ses en forskydning af den brede lavfrekvente top i spektret.



Figur 3. Dielektrisk tab – ε'' – som funktion af temperatur og frekvens for en polypropylenkomposit indeholdende poly(stearyl acrylat)modificerede multivæggede kulstof nanorør.

nedbrydning. Understøttet af optiske mikroskopianalyser og røntgenspredningsanalyser kunne det vises, at de successive ekstruderinger medførte en forbedret dispergering af nanolerpartiklerne i polymeren [2].

Analyser af polymerer – termiske effekter

Da mobiliteten i plastmaterialer som nævnt afhænger meget af temperaturen, er det også muligt at anvende dielektrisk spektroskopi til at undersøge glasovergange eller smeltepunkter for polymerer. I dette eksempel undersøges en polypropylenkomposit, der indeholder multivæggede kulstof-nanorør (MWCNT), med en overflademodificering bestående af poly(stearyl acrylat). Overflademodificering har til formål at fremme kompatibilitet mellem fyldstoffet og PP-matricen. Poly(stearyl acrylat) på overfladen af kulstof-nanorørene er en semikrystallinsk polymer, der forventes at have et smeltepunkt omkring 35°C. Dielektrisk spektroskopi er derfor anvendt til undersøgelse af tilstedeværelsen af polymeren, som vist i figur 3.

Som det fremgår af figur 3, er der er en tydelig temperaturafhængig relaksation i systemet. Relaksationen skyldes dipolerne i den poly(stearyl acrylat) modificering, der sidder på nanorørenes overflade. PP-matricen er apolær og vil derfor ikke give nogle signaler i det dielektriske spektrum. Metodens sensitivitet er imponerende stor, da den polymer, der detekteres her, udelukkende udgør 0,15 vægtprocent af kompositten totale masse. Til sammenligning vil man normalt anvende differentiel skanningskalorimetri til bestemmelse af polymerers termiske egenskaber og ved denne teknik var det end ikke muligt at detektere antydningen af et smeltepunkt for systemet [3].

Perspektiv

Måling af et produkts elektriske egenskaber er forholdsvis enkel. Det nødvendige udstyr er relativt simpelt og består primært af elektronik, hvorfor det kan tilvirkes relativt billigt til dedikerede applikationer. Selve målingen er hurtig nok til, at teknikken er egnet til onlinemålinger på processer i bl.a. komposit-/plastindustrien, men i den videnskabelige litteratur findes mange eksempler på anvendelse af teknikken i andre industrier, bl.a. til fødevare- og lægemiddelproduktion.

Som eksempel kan nævnes en metode publiceret af forskere fra Barcelonas Autonome Universitet (UAB) baseret på dielektrisk spektroskopi til måling af koncentrationen af immobiliserede dyrecellekulturer. Forskerholdet har udviklet en fire-elektrodeteknik, som sikrer korrekt måling af cellekoncentrationen uden påvirkning af fejlkilder, der typisk giver anledning til fejlmålinger i traditionelle to-elektrode-set-ups. Ud fra onlinemålinger af cellekulturernes koncentration sammenholdt med traditionelle metabolitmålinger kan forskerne opnå vigtig viden om cellernes optimale vækst i alle vækstfaser. Teknikken repræsenterer et vigtigt nyt værktøj i arbejdet med fastsiddende cellekulturer såsom stamceller, hvor traditionelle teknikker fra cellekulturer i suspension ikke kan anvendes [4].

Det Polytekniske Universitet i Valencia (UPV) giver endnu et eksempel på anvendelse. Her har forskere demonstreret, hvordan dielektrisk spektroskopi kan anvendes til at overvåge og måle kvaliteten af svinekød under modningen. Ved forholdsvis enkle målinger af kødets permittivitet ved to udvalgte frekvenser på tværs af kødets fiberretning kan et indeks opstilles, som ændrer sig under modningen alt efter kødets kvalitet. Med det samme udstyr demonstrerer forskerne, at man ud fra en måling af ledningsevnen gennem kødet ligeledes kan få en online monitorering af nedbrydningen af cellemembranerne i kødet, hvilket også er en del af modningsprocessen [5].

Opsummering

Dielektrisk spektroskopi kan altså anvendes til
- at kaste lys over dynamiske fysiske og kemiske processer i materialer, herunder hærdereaktioner i polymerer og kompositmaterialer.
- at give informationer om mikrostrukturen i f.eks. materialer og fødevarer og dermed korreleres til bl.a. fødevarers sundhedsegenskaber, materialers mekaniske egenskaber etc.
- procesovervågning og -kontrol i cellekulturer, som er en voksende produktionsform indenfor f.eks. fødevarer, lægemidler og stamceller.

E-mail
Anders Egede Daugaard: adt@kt.dtu.dk
Jesper Poder Bøgelund: jpb@teknologisk.dk

Referenceliste

1. A.E. Daugaard, S.S. Hassouneh, M. Kostrzewska, A.G. Bejenariu, A.L. Skov; High dielectric permittivity elastomers from well-dispersed expanded graphite in low concentrations; Proceedings of Spie 2013.
2. J.Bøgelund, R.Klitkou, J.de C.Christiansen Effect of Multiple Extrusions of Polypropylene/Clay Nanocomposites Investigated by Dielectric Relaxation Spectroscopy, under forberedelse
3. A.E. Daugaard, K. Jankova, S. Hvilsted; Lauryl and Stearyl Acrylate Functional Multi Walled Carbon Nanotubes for Polypropylene Composites, under forberedelse.
4. E. Sarró, M. Lecina, A. Fontova, C. Solà, F. Gòdia, J.J. Cairó, R. Bragós, Biosensors and Bioelectronics 31 (2012) 257–263.
5. M. Castro-Giráldez, P. Botella, F. Toldrá, P. Fito, Innovative Food Science and Emerging Technologies 11 (2010) 376–386

Maillardreaktionen på godt og ondt – en 100 års fødselsdag

Navnereaktioner er normalt noget for kemiske feinschmeckere. En af de mest udbredte af slagsen er Maillardreaktionen. Dens udøvere er bagere, bryggere, kokke, kafferistere og husmødre. Maillardreaktionen er en af levnedsmiddelkemiens vigtigste, men den byder også på mange udfordringer.

Af Carl Th. Pedersen, Institut for Fysik, Kemi og Farmaci, SDU, Odense

Maillardreaktionen så dagens lys i 1912 i Frankrig, den havde altså 100 års fødselsdag sidste år. Den er opkaldt efter den franske kemiker og fysiolog Louis-Camille Maillard, som levede i 1878–1936. Han blev født i Pont à Mousson i det nordøstlige Frankrig og studerede kemi ved det nærliggende universitet i Nancy. Efter studiet blev han ansat ved det medicinske fakultet ved universitetet i Paris. Her arbejdede han indenfor fysiologien og beskæftigede sig specielt med urinstof og nyresygdomme.

Figur 1. Friskbagte boller, der skylder Maillardreaktionen deres gyldne farve.
Foto: Jonas Dahl Grue.

Hans mest betydningsfulde arbejder fra 1912 handler om reaktionen mellem aminosyrer og kulhydrater ved højere temperaturer, og i denne forbindelse så den reaktion, der senere skulle bære hans navn, dagens lys [1].

Når Maillardreaktionen er den kemiske reaktion, der udføres oftest, skyldes det, at den er årsagen til:

- at det friskbagte brød dufter så godt og har en flot gylden farve (figur 1),
- at flæskestegen har sin brune skorpe (figur 2),
- at kaffen lugter af kaffe og smager som kaffe (figur 3) og
- at mørkt øl ser ud og smager, som det gør etc.

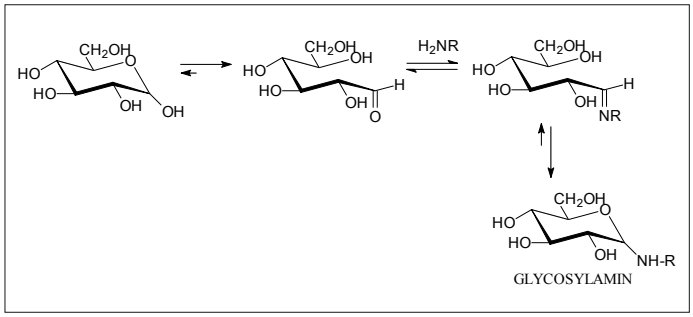
Figur 2. Brunede flæskesvær.

Maillards beskrivelse af reaktionen

I en publikation fra 1912 [1] beskriver Maillard omsætningen af glycin (*glycocolle)* med glucose i vand. Han konstaterer, at opløsningen bliver gul, da han opvarmer den for at få stofferne i opløsning. Ved fortsat opvarmning bliver den hurtigt brun og begynder at blive uklar, og der frigives CO_2. Ved inddampning af resten konstaterer han, at der er forsvundet, hvad der svarer til $CO^2 + 12\ H^2O$, som han skriver det. Han foreslår, at det mørkt brune stof, der dannes, er en polycyclisk forbindelse med et nitrogen. Ved 37°C går der nogle dage, inden man kan

Figur 3. Ristede kaffebønner, de ikke ristede er gulgrønne.

iagttage reaktionen. Ved 150°C går reaktionen meget hurtigt. Han prøver en række aminosyrer med andre kulhydrater og konstaterer, at det er en generel reaktion med reducerende kulhydrater; men at reaktionerne foregår med forskellig hastighed afhængig af reaktanterne. Han giver dog ikke en nærmere forklaring på, hvad der sker.



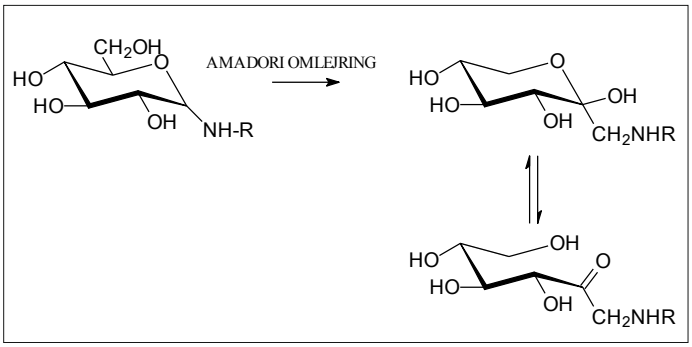
Figur 4. Første trin i Maillardreaktionen, dannelse af glycosylamin.

Maillardreaktionens trin

Maillardreaktionen viste sig at være uhyre kompliceret og bestå af en lang række delreaktioner, som stadig ikke alle er kendte. John E. Hodge gav i 1953 en sammenfatning af, hvad man på det tidspunkt kendte [2], en nyere oversigt er givet i 1980 [3].

Hodge inddelte Maillardreaktionen i tre trin. De to indledende trin i reaktionen er rimelig simple og overskuelige. Reaktionen indledes ved, at det reducerende sukker reagerer med aminen under dannelse af en glycosylamin (figur 4).

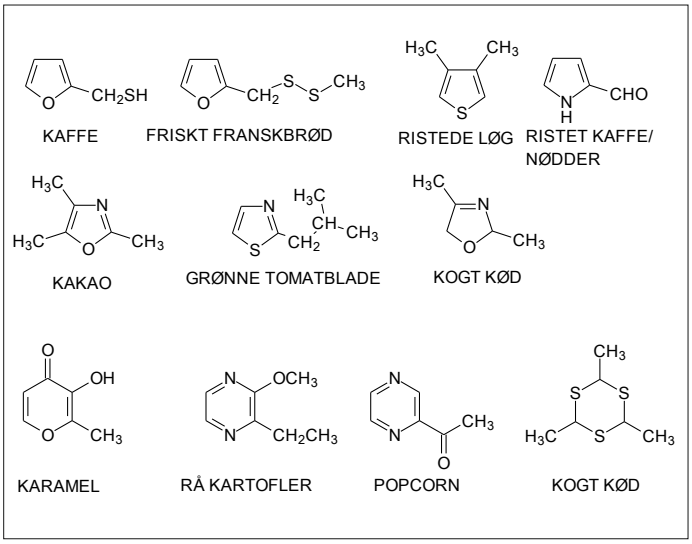
Det næste trin er en Amadoriomlejring (figur 5), og herfra hører overskueligheden op. Der kan nu ske en lang række af



Figur 5. Andet trin i Maillardreaktionen Amadoriomlejringen.

reaktioner, der kan føre til simple heterocykler, der giver fødevarerne deres karakteristiske smag og lugt.

I figur 6 er der vist en række af disse aromagivende små heterocykler. Under visse omstændigheder er disse aromastoffer dog uønskede. 2-Acetyl-1-pyrrolin er f.eks. med til at give brød, popcorn og basmatiris deres aroma; men det kan også dannes ved højtemperaturpasteurisering af mælk, hvor det giver mælken en uønsket smag og lugt.



Figur 6. Aromaforbindelser dannet ved Maillardreaktionen.

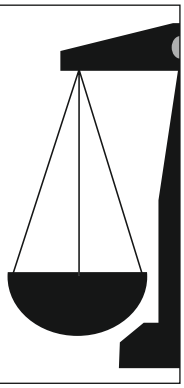
Der foregår derfor en intensiv forskning blandt levnedsmiddelkemikere om, hvordan man kan modificere Maillardreaktionen. Aromaen styres af aminosyren, hvorimod kulhydratdelen har mindre betydning. Således giver glycin øllignende dufte, hvorimod lysin giver en rugbrødsagtig lugt, og valin er ansvarlig for stegt køds duft. ▶

Pipettecenteret

Kalibrering og service af alle fabrikater pipetter.

Vi kalibrerer både ved indsendelse eller på kundens adresse.

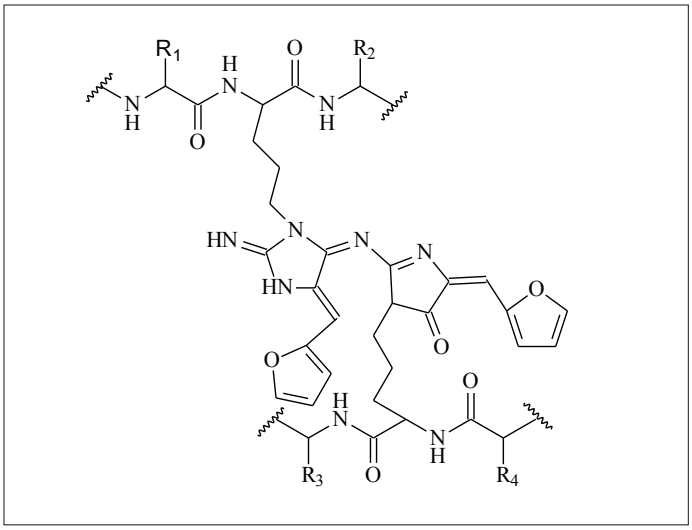
Salg af pipetter og laboratorie varer.



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

Melanoidiner

Nogle af de senere reaktioner fører også til komplicerede farvede forbindelser såkaldte melanoidiner, der giver brødets skorpe og flæskestegen deres farve, og som farver malten og kaffen brun [4,5]. De inddeles i lavmolekylære stoffer som den viste figur 7. Disse lavmolekylære melanoidiner har man en del viden om strukturen af. De højmolekylære med molekylvægte over 10.000 kender man ikke meget til strukturen af [4,5]. De er som de lavmolekylære nitrogenholdige. De lavmolekylære er ofte opløselige i vand.

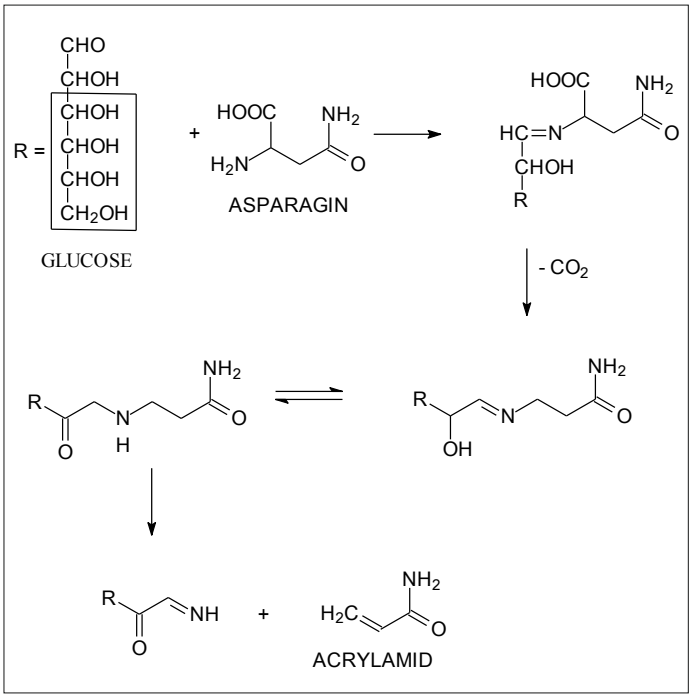


Figur 7. Fragment af lavmolekylær melanoidin.

Maillardreaktionens uheldige sider

Maillardreaktionen har desværre også "en mørk side" samtidig med de positive sider, der giver den gode smag og duft. Den frembringer også en række uønskede cancerogene forbindelser

Ved højere temperaturer giver Maillardreaktionen som sagt anledning til dannelse af farvede forbindelser, men også til dannelsen af polycycliske heteroaromatiske forbindelser, der som deres carbocycliske analoge er cancerogene.



Figur 8. Dannelse af acrylamid ud fra asparagin.

Der kan dog også ved lavere temperatur dannes lavmolekylære cancerogene forbindelser som 5-(hydroxymethyl)furfural og acrylamid. Her har især acrylamid (propenamid) [6,7] tiltrukket sig opmærksomhed i pressen. Acrylamid dannes ud fra kulhydratholdige fødevarer, der indeholder aminosyren asparagin (figur 8), når disse udsættes for opvarmning. Noget sådant er tilfældet med brød og kartofler (figur 9), der har et indhold af asparagin op til 0,1%. De største bidragsydere til acrylamid i vore fødevarer er kaffe, pommes frites og kartoffelchips.

Figur 9. Pommes frites, hvoraf nogle har været rigeligt opvarmet. Foto: Jonas Dahl Grue.

Acrylamiddannelsen er forsvindende under 100°C, så man kan mindske mængden ved en blid opvarmning. Et højt vandindhold begrænser acrylamiddannelsen, idet det holder temperaturen nede. Hvis det er muligt, kan man også behandle udgangsprodukterne med enzymet asparaginase, der spalter asparaginen, som er nødvendig for acrylamiddannelsen.

E-mail
Carl Th. Pedersen: cthp@sdu.dk

Referencer
1. L.-C. Maillard, Comptes rendus hebdomadaires de séances de l'Academie des sciences, 154, (1912) 66.
2. J.E. Hodge, Agricultural and Food Chemistry 1, (1953), 928.
3. M. Angrich og D. Rewicki, Chemie in unserer Zeit, 14, (1980), 149.
4. H.-Y. Wang, H. Qian og W.-R. Yao, Food Chemistry, 128, (2011), 573.
5. A.P. Echavarría, J. Pagán og A. Ibarz, Food Engineering Reviews, 4, (2012), 2203.
6. K. Granby og Th. Pedersen, Dansk Kemi, 84(4), (2003), 14.
7. N.J. Nielsen, K. Granby, L. Skibsted og R. V. Hedegaard, Dansk Kemi, 86(5), (2005), 32.

Århundredets kemiingeniør er død

Haldor Topsøe døde den 20. maj fire dage før sin 100 års fødselsdag. Han var aktiv til det sidste, var kontant og direkte og gik hele livet sine egne veje. Han havde stort fremsyn, var innovativ, havde en god forretningssans, og så var han en ægte humanist.

Haldor Frederik Axel Topsøe blev opkaldt efter sin farfar, der var dr. phil. med ekspertise i krystallografi. Han tog studentereksamen i 1931, hvorefter han studerede til ingeniør på Polyteknisk Læreanstalt. Han blev færdig i 1936, hvor han bestod med udmærkelse.

Den 10. april 1940 etablerede han virksomheden Haldor Topsøe. Virksomheden er i dag en af verdens førende katalysatorproducenter. Der er altid blevet satset på og investeret massivt i forskning. Og meget usædvanligt har det været OK, at forskning tager tid. Haldor Topsøe vidste, at det er nødvendigt med langsigtede satsninger for at få de store forskningsgennembrud. I dag er rensning af røg fra kraftværker og mineraludvinding, omdannelse af kul til naturgas, katalysatorer til udstødningsgasser og brændselsceller altsammen områder, hvor virksomheden står stærkt.

I 1972 fik virksomheden store problemer, og Haldor Topsøe blevet omdannet til aktieselskab, hvor halvdelen af aktiekapitalen blev solgt til det italienske firma Snamprogetti. Og først i 2007 lykkedes det endelig Topsøe-familien at købe den italienske partner ud.

Haldor Topsøe havde hele livet et fantastisk fagligt overblik, der betød, at han både kunne se de overordnede linjer, og at han også hurtigt kunne gå ned i komplicerede tekniske detaljer. Haldor Topsøe har altid haft et stort internationalt udsyn og et mangeårigt engagement i at hjælpe, hvor der er behov. I 2009 modtog han Den Berlingske Fonds Hæderspris på 100.000 kr. Den tidoblede han og sendt videre til fattige børn i Danmark.

Han blev ved årtusindeskiftet udpeget som århundredets ingeniør.

Han var bl.a. æresdoktor ved Aarhus Universitet, Göteborgs Universitet, æresmedlem af Dansk Ingeniørforening og fik tildelt Tietgenprisen, Dronningens fortjenstmedalje og guldmedalje fra Det kgl. Danske Videnskabernes Selskab.

I dag har virksomheden Haldor Topsøe A/S 2394 ansatte og afdelinger i 10 lande i fem verdensdele.

Redaktionen

"En erindring i hygiejnisk retning"

Vi har fra en læser modtaget denne erindring om, hvordan Niels Skovgaards oplysning gav anledning til et sidespor i hygiejnisk retning.

Kære Carsten!

Tak for godt nyt om antibiotika i Dansk Kemi nr. 5.

Du skal have en lille historie om måske en parallelsituation?

For mange år siden berettede Niels Skovgaard, mangeårig professor i mikrobiologi på KVL, en historie om at spore en staphylokokforgiftning fra bacon tilbage til oprindelsesstedet. Sagen var klar. Da man gennem autorisationsnummeret havde sporet virksomheden, der havde slicet og pakket baconet, fandt man, at operatører på opskæringsvirksomheden havde infektioner på hænderne.

So far so good.

Men nu havde man fået muligheden for at typebestemme staphylokokkerne, så den vej skulle jo prøves.

Så viste det sig så, at den type, som fandtes hos operatørerne ikke var den samme, som man havde fundet på det bacon, der havde gjort folk syge.

Den type var imidlertid typisk for, hvad der fandtes på svinene.

Hans analyse gik så på, at man ved slagteriprocessen gennem skoldning og svidning af svinene fjernede konkurrencefloraen fra svinenes overflade, så valpladsen blev overladt til de mere sky staphylokokker, der kunne skjule sig i hårsækkene.

Da de tillige var salttolerante, kunne de overleve og starte en solotilværelse.

Så var det jeg fik den tanke, at hvis man tænkte på nogle af de hygiejniske problemer, som kunne henføres til vore hospitaler med netop staphylokokker og pseudomonasarter, kunne det måske være, at man skulle gribe rengøringen anderledes an?

I stedet for at tilstræbe en aseptisk løsning skulle man i stedet sørge for, at der var gjort synligt rent, og så svabre gulvet med kærnemælk? Et ordentligt boost med mælkesyrebakterier.

Det skulle nok kunne knække nakken på de uønskede mikroorganismer, og lugten kunne man måske vænne sig til?

Så var det at en af mine hygiejnevenner fra hospitalsverdenen fortalte mig, at ideen kunne lyde godt i teorien. Problemet var imidlertid, at de patienter, som blev angrebet af netop staphylokokker og pseudomonas faktisk på grund af deres svækkede tilstand blev angrebet af den flora, som de selv bragte med ind på hospitalet. Nå – så kom vi ikke videre ad den vej.

Synes imidlertid at det er spændende, at metoden synes at have en vis succes i svineavlen i form af en probiotisk behandling af svinestaldene, bl.a. som bekæmpelsesmiddel mod staphylokokker.

Venlig hilsen
Lars Herborg
Tidligere Fiskeriministeriets Forsøgslaboratorium eller Industritilsyn eller Fødevarestyrelsen

Anden-ordens kalibrering i praksis

I sidste klumme så vi, at anden-ordens kalibrering kan foretages vha. Rank Annihilation Factor Analysis. Sådan startede det, men i dag anvendes andre metoder og især PARAFAC.

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

Som beskrevet i sidste klumme (Dansk Kemi, 94(4), 2013), så kan Rank Annihilation Factor Analysis (RAFA) anvendes til at kvantificere, hvor meget analyt, der er i en ukendt prøve. Det gøres ved at se, hvor meget af en ren prøves signal man skal trække fra den målte prøve, før rangen går ned med én. På den måde kan man kvantificere kendte stoffer i ukendte prøver, selv hvis de har ukendte interferenser. Det er ikke muligt med traditionel eller kemometrisk kalibrering. I denne klumme ser vi på en lidt mere automatiseret og praktisk måde at lave anden-ordens kalibrering på.

Automatiseret rank annihilation

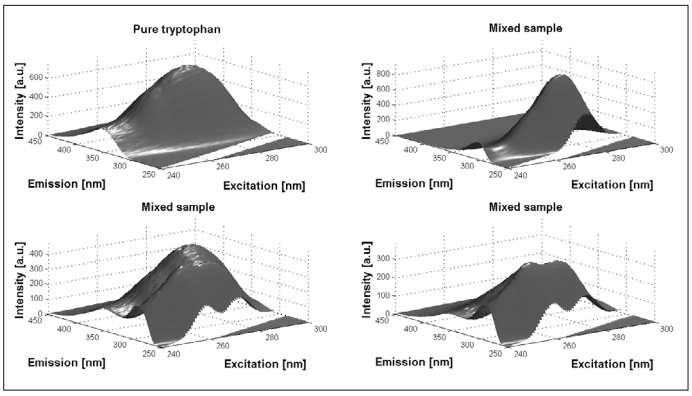
Bruce Kowalski var en af pionererne indenfor kemometrien og hans gruppe i Seattle var i høj grad førende indenfor anden-ordens kalibrering. Omkring 1985 udvikledes en automatiseret RAFA, som blev kaldt Generalized Rank Annihilation Method (GRAM) [1]. Den var baseret på, at man kunne tage målingen af en referenceprøve; en matrix og målingen af en ukendt prøve; en anden matrix. Disse to matricer kunne opstilles i et såkaldt generaliseret egenværdi-problem [2]. Det kan vises at løse samme problem som RAFA, men uden at man behøver at iterere for at finde ud af, hvornår rangen af ens prøvematrix falder med én. Man må dog beslutte, hvad det totale antal komponenter i prøvematricen er, og det er langt fra ukompliceret.

GRAM var et meget stort fremskridt, der var baseret på blot to målinger; en prøve med kendt koncentration af analyt og den ukendte prøve. GRAM blev sidenhen udviklet til at kunne håndtere mange prøver [3], og på det tidspunkt (omkring 1990) blev det klart, at man i virkeligheden havde udviklet en metode, der var stort set identisk med den psykometriske metode PARAFAC [4] fra 1970 (Dansk Kemi, 92(11), 2011).

PARAFAC til anden-ordens kalibrering

Hvordan fungerer anden-ordens kalibrering vha. PARAFAC? Det er faktisk relativt simpelt, og de fleste ingredienser har vi allerede beskrevet. I de tidligere klummer (Dansk Kemi, 92(12) 2011 og Dansk Kemi, 93(1-2) 2012) forklarede vi, hvordan en PARAFAC-model af et fluorescens-datasæt giver estimater af de underliggende emissions- og eksitationsspektre. Dvs. at PARAFAC-modellen adskiller målinger af blandinger og giver de rene spektre. Vha. disse spektre kan vi identificere analytterne.

I figur 1 er vist et komplet kalibreringssæt (prøven øverst til venstre) og tre prøver, hvor vi ønsker at bestemme tryptofans koncentration.



Figur 1. Eksempel på kalibreringssæt og prædiktionssæt. Prøven øverst til venstre er kalibreringsprøven. Vi ved at denne er ren tryptofan, og vi ved at koncentrationen er 2.67 µM.

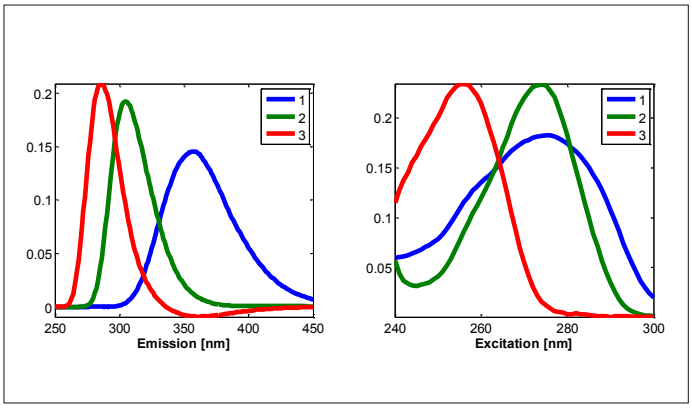
Ud over de fire eksitations-emissions-landskaber, så er det eneste vi ved, at koncentrationen af tryptofan er 2.67 µM i den kendte prøve.

Trin 1: Beregn PARAFAC-model

Første trin i at bestemme koncentrationen er at beregne en passende PARAFAC-model. Vha. de værktøjer vi tidligere har diskuteret (Dansk Kemi, 93(1-2), 2012) finder vi, at tre PARAFAC-komponenter er passende. Det antyder, at prøverne i alt indeholder tre fluoroforer, som vi kan måle. Hver komponent er beskrevet ved en PARAFAC-emissionsloading og en PARAFAC-eksitationsloading. Dvs. et estimeret emissions- og eksitationsspektrum (figur 2).

Trin 2: Identificer tryptofan-komponent

Som udgangspunkt er nummereringen af komponenterne arbitrær, men hvis man er bekendt med analytternes fluorescensegenskaber, kan man benytte disse estimerede spektre til at identificere hver af de tre PARAFAC-komponenter. Dvs. at i stedet for blot at have komponent 1, 2 og 3, kan vi navngive



Figur 2. Estimerede loadings fra en PARAFAC-model.

disse. Det undlader vi i dette tilfælde og i stedet identificeres tryptofan på anden vis. Ud over estimerede spektre får vi også en score-matrix, som er vist nedenfor.

	Analyt 1	Analyt 2	Analyt 3
Prøve 1	27834	5	-8
Prøve 2	356	20748	-25
Prøve 3	16481	8593	7971
Prøve 4	9483	7082	6892

Figur 3. Score-matrix fra en tre-komponent PARAFAC-model af fire prøver.

Der er et sæt score-værdier for hver prøve og én sådan for hver komponent. F.eks. kan vi se, at hvis vi tager emissionsloading nummer et og eksitationsloading nummer et og ganger dem sammen til et fluorescenslandskab, så skal dette landskab ganges med 27834 for at vise komponent ets bidrag til modellen af den første prøve. Score-værdien er altså "koncentrationen" af denne komponent, men i en form for arbitrær skala.

Prøve nummer et er den kendte kalibreringsprøve, der kun indeholder tryptofan. Række et i scorematricen viser, at komponent to og tre er omtrent nul (5 og -8) sammenlignet med komponent et. Dette kan vi bruge til at identificere at komponent et må svare til tryptofan (figur 4).

Trin 3: Kvantifikation

Med tryptofan identificeret og med viden om at koncentrationen af tryptofan er 2.67 µM i kalibreringsprøven, prøve et, kan vi nu simpelthen skalere score et, således at prøve nummer et har den rette værdi (figur 5)

Hermed har vi prædikteret koncentrationen af tryptofan i de tre ukendte prøver uden at have kendskab til hvilke øvrige kemiske analytter, der bidrager med overlappende signaler. Vi kan sammenligne prædiktionerne i figur 5 med de konkrete koncentrationer, der blev brugt til at lave prøverne: [0.00 µM, 1.58 µM, 0.88 µM]. Som man kan se, er prædiktionerne ganske tæt på de korrekte værdier.

	Tryptofan	Analyt 2	Analyt 3
Prøve 1	27834	5	-8
Prøve 2	356	20748	-25
Prøve 3	16481	8593	7971
Prøve 4	9483	7082	6892

Figur 4. Score-matrix fra en PARAFAC-model med tryptofan identificeret.

	Tryptofan [µM]	Analyt 2	Analyt 3
Prøve 1	2.67	5	-8
Prøve 2	0.03	20748	-25
Prøve 3	1.58	8593	7971
Prøve 4	0.91	7082	6892

Figur 5. Score-matrix fra en PARAFAC-model skaleret til korrekt tryptofan-koncentration i kalibreringsprøve.

Outro

Anden-ordens kalibrering foretages oftest vha. PARAFAC og vi har i denne klumme vist, hvordan dette kan gøres samt hvilke elementer, der indgår i kalibreringen. Flere detaljer kan findes i litteraturen [5].

E-mail-adresser
Rasmus Bro: rb@life.dk.
Søren Balling Engelsen: se@life.ku.dk
Lars Nørgaard: lno@foss.dk

Referencer

1. E. Sanchez, B. R. Kowalski. Generalized rank annihilation factor analysis. Analytical Chemistry. 58:496-499, 1986.
2. G. H. Golub, C. F. van Loan. Matrix computations, Baltimore:The John Hopkins University Press, 1989.
3. E. Sanchez, B. R. Kowalski. Tensorial resolution: a direct trilinear decomposition. Journal of Chemometrics. 4:29-45, 1990.
4. R. A. Harshman. Foundations of the PARAFAC procedure: Models and conditions for an 'explanatory' multi-modal factor analysis. UCLA working papers in phonetics 16:1-84, 1970.
5. Å Rinnan, J. Riu, R. Bro. Multi-way prediction in the presence of uncalibrated interferents. Journal of Chemometrics. 21:76-86, 2007.

En alsidig datalogger

I de fleste laboratorier bruges der dataloggere til opsamling af data i større eller mindre omfang. Til dette formål tilbyder vi vores Ecolog Dataloggere, en serie af batteridrevne loggere, der fås med 2 eller 4 indgange til måling af temperatur og relativ fugtighed.

Til måling af temperatur anvendes Thermistor eller PT-100. Herved opnås en stor nøjagtighed, typisk ± 0,2ºC, fugt måles med en nøjagtighed på ±1,5% rh. Til måling af luftfugtighed fås en speciel fugtprobe, der kan tåle omgivelsestemperatur op til 110ºC.

Alle modeller har et stort display, som viser aktuel værdi samt alarmudgang, som kan tilsluttes en sirene eller flash.

Til loggerne leveres et yderst professionelt og brugervenligt analysesoftware, som fås i en standardversion eller som lever op til FDA21 CFR Part 11, GMP, GAMP5 og GLP.

Dataloggeren har mange anvendelsesmuligheder, f.eks. overvågning af laboratorier, køle-/fryseskabe, lagerrum eller transporter.

Yderligere information:
Elpro Nordic ApS
Tlf. 45 1741 60
www.elpro.com

Luftfiltre

Ultramare har siden 1934 specialiseret sig i energi-effektive filtre, der optager støv, renser luften og sikrer et sundt og rent indeklima, der kan være med til at forhindre luftvejsinfektioner og andre følgesygdomme. Filtrene er udviklet til at give lave driftsomkostninger.

Virksomhedens filtre testes af en uafhængig part. Hvert enkelt filter er miljørigtigt produceret, fremstillet i let nedbrydeligt materiale samt certificeret af Eurovent, der sikrer, at alle filtre opfylder de lovede præstationer. Generelt er miljørigtig udvikling af filtermarkedet en udtalt mærkesag for Ultramare, som er medlem af Dansk Ventilation og Svensk Ventilation for aktivt at kunne tage del i udviklingen af filtermarkedet.

Yderligere information:
Ultramare
Trine Rozetzsky Lassen
Tlf. 22 33 37 44
E-mail: trine@ultramare.dk
www.ultramare.dk

DNA-polymeraser og reagenser i Odense

Ampliqon A/S er en dansk producent af DNA-polymeraser og reagenser. Virksomheden producerer desuden mere end 1000 forskellige kundetilpassede kemiske reagenser, i batchstørrelser fra 1 ml til 800 l. Reagenserne sælges i Danmark via VWR – Bie & Berntsen, mens DNA-polymeraserne kan bestilles direkte hos Ampliqon.

Ampliqon blev i 2011 overtaget af DB Lab og er siden flyttet til nyrenoverede lokaler i Odense. Kun en lille del af firmaets enzymproduktion går til det danske marked, mens ca. 90% eksporteres. Kontakten til det danske marked er et fokusområde for Ampliqon, der aktivt ønsker at finde nye udviklings- og samarbejdspartnere.

Taq Polymerase Master Mix Red med rød farve eksporteres især til det asiatiske marked. Enzymblandingen indeholder bl.a. et rødt farvestof, så PCR mix efter endt PCR kan loades direkte på en agarose-gel. Herved spares en masse præpareringstid.

Et andet nyt produkt er Taq DNA Polymerase glycerol free, der bl.a. er velegnet til automatiseret pipettering, idet bufferens lave viskositet sikrer et mere præcist afpipetteret volumen. Taq DNA Polymerase glycerol free kan desuden frysetørres og genopløses uden nævneværdigt tab af aktivitet, hvilket har en stigende udbredelse til forskellige applikationer.

Tempase, et hot-start enzym, er 100% inaktivt ved stuetemperatur og aktiveres først ved opvarmning til 95°C i starten af en PCR-reaktion. Enzymet bruges også i realtime PCR og Ampliqons RealQ PCR mix er populært pga. god kvalitet, gode priser og stabile leverancer.

Yderligere information:
Ampliqon A/S
Søren Risum Andersen
Tlf. 70 20 11 69
Mobil: 61 27 60 75
E-mail: sra@ampliqon.com

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
Ved Fyret 6
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

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
Ved Fyret 6
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 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

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

Leverandørregister

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, tabletproduktion 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

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

K

Kemikalier

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

V

Vægte

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

Å

Åndedrætsværn

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

Service & miljø

P

Patenter

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

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

R

Rådgivning

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

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

Priser på optagelse:

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

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

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

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

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

KEMISK FORENING
Universitetsparken 5
DK-2100 København Ø
www.chemsoc.dk
The Danish Chemical Society
Founded 1879

Skovturen 2013

Dansk Selskab for Historisk Kemi Tycho Brahe og kviksølv

Årets skovtur finder sted lørdag den 21. september 2013

I november 2010 blev Tycho Brahes grav i Prag åbnet, og der blev udtaget prøver for at fastslå, om han var blevet kviksølvforgiftet. En af hovedmændene bag analyserne var lektor, dr. scient. Kaare Lund Rasmussen fra Institut for fysik, kemi og farmaci ved Syddansk Universitet i Odense.

På årets skovtur besøger vi hans laboratorium. Vi mødes på hans laboratorium kl. 10:00 og ser på det apparatur, der har været anvendt og ser på prøverne af Tycho Brahes skæg, øjenbryn, knogler, tænder mm. (Her er laboratoriet: http://vejviser.sdu.dk/opslag?lid=2265&pid=klr-2234. Er du faret vild, så ring på 28 71 37 09, så vil du blive guidet til det korrekte mødested i det store bygningskompleks).

Herefter, ca. kl. 11, kører vi 6 minutter til ADBOU på Lucernemarken 20. Her ligger Syddansk Universitets store knoglesamling. Det er en lagerhal, hvor der opbevares ca. 15.000 individer – alle middelalderlige knogler udgravet gennem tiden på Fyn og i Jylland. Cirka kl. 12.00 kører vi til Hotel Troense i den gamle skipperby Troense på Tåsinge, hvor vi spiser frokost med udsigt over sundet. Frokost 12:45-14:00. Herefter går vi en lille tur og ser på de utroligt velbevarede skipperhuse. Arrangementet slutter kl. 15:00.

Deltagelse i arrangementet er gratis, men deltagerne sørger selv for transport og betaling for frokost.

Tilmelding senest den 7. september på christian@historisk-kemi.dk

Med venlig hilsen

Børge Riis Larsen og Christian B. Knudsen

The Copenhagen Conference on Femtochemistry (FEMTO11)

Dear Colleagues,

On behalf of the Organizing Committee of The Copenhagen Conference on Femtochemistry (FEMTO11), we are pleased to invite you to the 11th edition of the femtochemistry conferences.

FEMTO11 will take place in Copenhagen, Denmark, from 7th to 12th of July 2013. The venue will be The Technical University of Denmark, about 10 km north of downtown Copenhagen. Further information can be found in the conference web site **www.femto11.com**, which will be kept updated with the most recent news.

FEMTO11 will bring together scientists from all over the world to present and discuss the most recent advances in Femtosciences, including reaction dynamics, coherent control, structural dynamics, solvation phenomena, liquids and interfaces, fast processes in biological systems, strong field processes, attosecond electron dynamics and aggregates, surfaces and solids with contributions from both theory and experiment.

Registration and Abstract Submission are open. To register for FEMTO11 and submit your abstract, please visit: **www.femto11.com**

With best regards,

Niels Engholm Henriksen
Chair, FEMTO11
The Copenhagen Conference on Femtochemistry
Frontiers in ultrafast phenomena in Chemistry, Physics and Biology

Mødekalender (6-7) 2013

7.7.-10.7. 2013 The Copenhagen Conference on Femtochemistry (FEMTO11), DTU. Se dk 2013 (5, 6-7)
21.9. 2013 Kemisk Forening, Dansk Selskab for Historisk Kemi, Sommerekskursion til SDU, Odense. Åbningen af Tycho Brahes grav. Se dk 2013 (6-7).

KOMPLET PRODUKTOMRÅDE:

MARKEDETS BEDSTE SIKKERHEDSBÆNKE

- 1-2 og 3-filter steril og sikkerhedskabinetter
- Certifikat på EN12469 og DIN12980
- TÜV godkendelser på alle kabinetter
- Kabinetter til GMO-LAB
- Højeste sikkerhed ud over gældende standard
- Det mest støjsvage kabinet på markedet
- Optimal vejeløsning i sikkerhedskabinet
- GMP løsninger
- Danmarks største og mest erfarne leverandør på LAF området
- Ergonomi
- Stor tilbehørspakke
  Løsninger tilpasset til jeres opgave

Læsmere om sikkerheds-bænke her

Vallensbækvej 35
Telefon: (+45) 4326 9400
Telefax: (+45) 4326 9410

DK-2605 Brøndby
www.holm-halby.dk
info@holm-halby.dk

Holm & Halby
TIL LABORATORIER I UDVIKLING

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