

dansk kemi

Nummer 12 - December 2014 / 95. årgang



Materialleforskning i Lund

Sådan gik CPH LabMed
PTR-TOF-målinger på Villum
Research Station

Ekspllosion i rådnetank med biogas

INDHOLD



1 Forside: CPH LabMed var præget af fantasifulde stande og god atmosfære. Her Biolabs stand. Foto: Biolab.

6 **Truslen fra marint plast**
Havets plastforurening tegner uhyggelige perspektiver på en udvikling, der kædes sammen med så alvorlige problemer som nedsat fertilitet, arvelig fedme og mutationer i sædceller.

8 **Flot start på CPH LabMed**
Den 7.-9. oktober løb CPH LabMed af stablen. Messen blev afholdt i det rå og uortodokse udstillingssted, Lokomotivværkstedet og havde 5.483 besøgende.

10 **PTR-TOF-målinger på Villum Research Station**
PTR-Time-of-flight MS til målinger af afsætning og emission af organiske forbindelser fra og til atmosfæren.

12 **Ekspllosion i rådnetank med biogas**
En rådnetank på Vejle Centralrenseanlæg eksploderede i 1990, mens håndværkere arbejdede på taget. Nu, 24 år senere, hvor biogas er populær som aldrig før, er hændelsen fuldstændig forsvundet fra tilgængelige åbne kilder.

16 **Kemi ved European Spallation Source (ESS)**
I Lund er byggeriet af den europæiske neutronforskningsfacilitet ESS netop gået i gang. Af den samlede anlægspris på 13,8 mia. kr. bidrager Danmark som medvært med 1,7 mia. kr. Det gør ESS til den største enkeltstående danske forskningssatsning i moderne tid.

20 **Hvad der var brandvarmt i analytisk kemi denne sommer**
Analytisk kemi er i rivende udvikling disse år. En effektiv måde at holde sig orienteret om de nyeste udviklinger og skabe kontakter er at deltage i internationale møder, hvor de bedste forskere beskriver deres arbejde.

24 **Kvantekemisk mikroskop afslører molekyllære mekanismer**
Fluorescerende proteiner spiller en central rolle som markører i fluorescensmikroskopi. Vha. kvantekemiske beregninger har vi afdækket de mikroskopiske tuningsmekanismer bag absorptionsegenskaberne af proteinet DsRed.

27 **Køkkenkemisten**
Om hjemmerøgning.

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 Kil
sk@kt.dtu.dk
Ph.d. Kristian B. Krogh
kbk@novozymes.com
Professor Henrik Skov
hsk@dmu.dk

Redaktionskomité:

Professor Anne S. Meyer (formand)
Professor, dr. scient. Mikael Bols
Professor Morten J. Bjerrum
(Kemisk Forening)
Professor Elo Harald Hansen
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
Adjunkt, civilingeniør, ph.d. Merete
Norsker Bergsøe
Vibeke Richter Foersom
(Næstformand, Kemilærerforeningen)
Konsulent Nikolai Stubkjær Nilsen
Procesindustrien
Seniorforsker, PhD.
Peter Have Rasmussen

Redaktionssekretær:

Heidi Thode
ht@techmedia.dk

Annoncer:

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

Annonceproduktion:

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

Hjemmeside:

www.dansk kemi.dk

Abonnement:

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

Layout:

Morten Malmgren

Tryk:

PE offset A/S

Trykt på miljøvenligt
papir med vegetabiliske
miljøfarver.

Oplag: 5.245
Ekspl. heraf 4.803
i betalt abonnement.
Online læsere: 3.792

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

ISSN 0011- 6335

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



Scan og hent Dansk Kemi's
medieinformation 2015 hér!

Brug for scanner? Send en
sms til 1919 med ordet "scan"
og få scanlife som app.



Intelligent Chemistry Biolab A/S Automation Specialist

Andrew™

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

PipetMax™

The latest Multichannel Automation Robot from Gilson

Microman Auto

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



The only limitation is your imagination



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



Man får, hvad man betaler for

” Fokus på socialt ansvar ved studieoptag er urealiserbart og det forkerte sted at sætte ind

Som bekendt er en af de deltagende regeringspartnere (den mindste) kendt/berygget for gennem årene at brillere med alskens vidtløftige og kuriøse forslag og tiltag. Som oftest i form af på- eller (især) forbud. Et af de mere bizarre af slagsen fremkom Forsknings- og Undervisningsministeren med her i forsommeren, hvor hun på sin karakteristiske jeg-jeg facon foreslog, at man på universiteterne skulle udvise socialt ansvar med henblik på optaget af studerende – eller som det mere malerisk stod på ministeriets hjemmeside: ”Der skulle også være plads til dem, som kom fra et hjem uden klaver”.

Rent bortset fra, at forslaget er en generel hån mod de studerende – ikke mindst dem, som faktisk kommer fra et hjem uden klaver, men dog via deres personlige evner og dynamik har demonstreret, at det er muligt at klare sig godt – og dertil forekommer totalt urealistisk at administrere i praksis, er det (som ivrigt diskuteres i pressen i de seneste måneder) det helt forkerte sted at sætte ind med ”sociale tiltag”.

Der burde fokuseres langt tidligere i de unges skoleuddannelse på vejen til at modne dem til deres senere uddannelser, hvad enten dette sker på erhvervsskoler eller i gymnasiet. Ønsker man at ende med at tage en universitetsuddannelse, er det tillige vigtigt, at man i gymnasiet tilegner sig kompetencer til at *studere*, så man ikke tror, at universitetet blot er en forlængelse af gymnasiet, hvor man får lektier for.

Hvis man skulle være maliciøs, kunne man imidlertid også tolke ministerens tiltag som (endnu) et forsøg på at degradere universitetsuddannelserne kvalitetsmæssigt. Det er det, som visse politiske observanser kalder demokratisering gennem stræben mod laveste fællesnævner. Det spillede allerede fallit for flere årtier siden, så det er vi slet ikke tjent med og har ej heller råd til.

På trods af hvad vore politikere ynder at sige, så ved de fleste alligevel godt, at vi langt fra har verdens bedste undervisningssystemer. Men lidt mindre kan også gøre det. Imidlertid skylder vi generationerne efter os at yde dem vores bedste og fortsat give dem muligheder for at dygtiggøre sig, hvis de selv vil, så de kan få en uddannelse, som er konkurrencedygtig, som der behov for, og som de selv er tilfreds med. Sådanne tiltag burde en dedikeret minister koncentrere og kere sig om.

De kunne måske ovenikøbet skabe et værdigt eftermæle for vedkommende.

Men som en af figurerne i Cirkusrevyen lakonisk udtrykker det: ”Man får, hvad man betaler for!”

Elo Harald Hansen, elohh@hansen.mail.dk

Efter opfordring fra Lars Herborg og som kommentar til hans artikel "Balladen om kattelugt i kødkonserves" i Dansk Kemi nr. 8, s. 28-29:

"Mere kattelugt"

"Grindstedværket i Grindsted havde i en årrække fra sidst i 1950'erne og frem til 1973 tilladelse til at bortskaffe kemikalieaffald ved udledning i klitgryder i Kærgård Klitplantage syd for Henne Strand. Gruberne, som klitgryderne kaldtes, var beliggende ca. 1.000 m fra havstokken. I midten af 1960'erne drejede det sig om adskillige 1.000 tons om året fordelt på i alt fem gruber i området.

Efter at gruberne - som i begyndelsen ikke var overdækket - havde været i brug nogle år, indløb der massive klager fra sommerhusområderne både nord og syd for grubeområdet. Der blev klaget over kemikalielugt, og fra tid til anden lød klagerne på en meget ubehagelig lugt af kattepis.

I første omgang troede vi på Værket, at lugten kom fra selve gruberne, hvorfor disse blev overdækket med en tæt tagkonstruktion. Kemikalieaffaldet bestod udelukkende af flydende produktionsaffald fra fremstilling af medicinalvarer, som fra gruberne sivede ned i det underliggende grundvand og derfra ført videre ca. 1 km ud til havet. Det skete fra tid til anden, at det udsivende forurenede grundvand brød op på forstranden. I de situationer var klagerne særlig intensiv - klagerne lød især på lugt af kattepis.



Årsagen til kattelugten blev derfor gjort til genstand for en nærmere undersøgelse på Grindstedværkets udviklingslaboratorie i Århus. I kemikalieaffaldet var en lang række affaldsstoffer - både organiske og uorganiske forbindelser. Ved siden af resterne af organisk stof var der bl.a. store mængder sulfationer og små mængder af et kondensationsprodukt af acetone - diacetone. Årsagen til den ubehagelige kattelugt blev afdækket som følger:

I de underliggende sandlag mellem selve gruberne og havstokken, havde der udviklet sig en anaerob bakterieflora, som ernærede sig af det organiske stof, der var i det udsivende

forurenede grundvand. Ilten til biologien fik organismernes fra sulfationen, som derved blev reduceret til sulfidioner. Den dannede sulfid reagerede derpå med diacetone og dannede et stof med en umiskendelig kattelugt. Når det udsivende forurenede grundvand indeholdende "kattestoffet" fra tid til anden brød op på forstranden ud for gruberne, og lugten med vind og vejr blev ført op eller ned af kysten, var telefonerne rødgældende.

Grindstedværket stod derfor overfor et lugtproblem, som ikke umiddelbart lod sig løse. Værket kæmpede i en årrække med skiftende klager over lugten af kattepis og måtte til sidst erkende, at situationen på sigt var uholdbar. Tilladelserne til at bortskaffe kemikalieaffaldet i gruberne ved Kærgård Klitplantage blev inddraget af Overlandvæsenskommissionen i 1973. Hvad der derefter skete med kemikalieaffaldet er en helt anden historie.

Med venlig hilsen

K-63

John Tøffner-Clausen

Nyt om ...

... Øl med mere

Når du skåler i øl, skåler du samtidig i en vis mængde mikroplast (< 5 mm). Forureningen er til stede som plastfibre, fragmenter og granulært materiale. Det syntetiske materiale kendetegnes ved ikke at blive farvet med Rose Bengal og kan således skelnes fra biologiske fragmenter.

Blandt 24 tyske øl indkøbt i butikker fandtes meget varierende indhold af fibre (2-79 L⁻¹), fragmenter (12-109 L⁻¹) og granula (2-66 L⁻¹). Men alle prøver indeholder mikroplast. Der kan også være små (op til 600 µm) glasstykker i, og er du rigtig uheldig måske små gnavpander, der er insekter i størrelsesordenen 1-2 mm. Plastindholdet menes hovedsageligt at stamme fra luftbårne partikler.

Når vasketøj tørres, frigøres store mængder fibre til atmosfæren. Også marker gødet med slam fra rensningsanlæg frigiver mængder af plastpartikler, men også det anvendte vand indeholder ofte mikroplast.



Carsten Christophersen

Synthetic particles as contaminants in German beers. G. Liebezeit og E. Liebezeit. *Food Additives & Contaminants: Part A* 2014, Bind 31:9, Side 1574-1578.



Truslen fra marint plast

Havets plastforurening tegner uhyggelige perspektiver på en udvikling, der kædes sammen med så alvorlige problemer som nedsat fertilitet, arvelig fedme og mutationer i sædceller.

Af Carsten Christophersen, carsten@techmedia.dk

Virkninger af marint plast er et kontroversielt emne, bl.a. fordi der mangler valide undersøgelser af både de fysiske karakteristika som partikelstørrelse og de kemiske som indhold af lavmolekylære stoffer. Efterhånden er så mange data på dele af det komplicerede emne dukket op i den videnskabelige litteratur, at visse foreløbige konklusioner og arbejdshypoteser kan opstilles.

Marint plast i fødekæder

Bortset fra direkte fysisk overlast som kvælning, fastholdelse og lignende har de store plaststykker formentlig ringe effekt

på havets liv. Mikroplast (<5 mm) derimod kan afstedkomme forstoppelse, der hindrer næringsoptagelse og kan resultere i døden for organismer fra plankton til filterfødere og større organismer. De mest alvorlige virkninger skyldes dog sandsynligvis cellens ekstraktion af skadelige lavmolekylære forbindelser fra den lipofile plast. Nanopartikler (<300 nm), der desværre er meget lidt undersøgt, har den uhyggelige egenskab, at de kan gennemtrænge cellevæggen og levere deres virkning direkte inde i cellen. Hvad end virkningen er, så er den mest alvorlige trussel måske, at partiklerne kan transporteres op gennem fødekæden. Føde fra havet ender på menuen. Hele processen er meget fragmentarisk undersøgt.

■ Lipofile trusler

Udover blodgørere og andre tilsætningsstoffer indeholder mikroplast forbindelser, der er ekstraheret fra omgivelserne. Nogle forbindelser opkoncentreres én mio. gange i mikroplast. Plast selv nedbrydes ekstremt langsomt i havet, men når molekyelvægten når helt ned på omkring 500 g/mol sker en hurtigere biodegradering. Den enormt komplicerede blanding indeholder desuden mængder af kosmetikstoffer, syntetiske tekstilfibre og bromerede flammehæmmere. Mange af dem er enten kendt for, eller under mistanke om, at have stærke fysiologiske virkninger, men utallige af disse komponenters virkning er ukendt.

Hormonforstyrrende virkninger

Hormonforstyrrende kemikaliers indvirkning på folkesundheden har været et omdiskuteret emne de seneste år. Mens miljøorganisationer har råbt vagt i gevær, har producentorganisationer bagatelliseret problemets omfang og efterspurgt valide videnskabelige undersøgelser over virkningerne. De har været svære at skaffe, fordi undersøgelser på mennesker kun lader sig gøre ved studier over bivirkninger ved eksponering. Hverken niveauet af eksponering eller bivirkninger registreres officielt. Det har derfor været nødvendigt at ty til dyreforsøg, som altid kan betvivles at gælde for mennesker.

Indvirkning på sædceller

Ny forskning konkluderer, at mange almindeligt forekommende hormonforstyrrende stoffer har en negativ virkning på humane sædceller. Af de omkring 800 almindeligt forekommende syntetiske forbindelser bliver 96 undersøgt, og omkring 1/3 forårsager skadevirkninger på sædcellerne. Eksponeringen korrelerer med forekomsten af testikelkræft, faldende frugtbarhed og nedsat fertilitet.

Arvelige skader

Rotteforsøg med en blanding af tre hormonforstyrrende forbindelser (BPA, DEHP og DBP) resulterer i en arvelig disposition for fedme, reproduktive sygdomme og mutationer i sædceller. Arvegangen er epigenetisk, hvilket vil sige, at DNA-sekvensen er uændret, men transskriptionen af arveanlægget er påvirket af f.eks. histonmodifikationer og DNA-methylering. Bisphenol A (BPA) har en lang historie karakteriseret ved budskaber dels om skadelige virkninger og dels om, at stoffet er uskadeligt i de mængder, forbrugere udsættes for. Bis-(2-ethylhexyl)phthalat (DEHP) og dibutylphthalat (DBP) har været gennem sammenlignelige forløb.

Kilder

Direct action of endocrine disrupting chemicals on human sperm. C. Schiffer *et al.* *EMBOreports* 2014. DOI 1015252/embr.2014438869

Plastics Derived Endocrine Disruptors (BPA, DEHP and DBP) Induce Epigenetic Transgenerational Inheritance of Obesity, Reproductive Disease and Sperm Epimutations. M. Mannikkam, R. Tracey, C. Guerrero-Bosagna og M. K. Skinner. *PLOS ONE* Januar 2013, Bind 8, nr. 1, e55387, 1-18.

Plastichavet. C. Christophersen *Dansk Kemi* 2014 Bind 95, nr. 10, side 8-9.

VI SIKRER MILJØET

- Risikovurdering af kemiske stoffer
- Fastsættelse af grænseværdier
- Vurdering og test af vandteknologier
- Økotoksikologiske og mikrobiologiske laboratorietest

www.tox.dhi.dk

DHI
Agern Allé 5, DK-2970 Hørsholm
Tel: 4516 9200 – Fax: 4516 9292
dhi@dhi.dk

The expert in **WATER ENVIRONMENTS**



Flot start på CPH LabMed

Den 7.-9. oktober løb CPH LabMed af stablen. Messen blev afholdt i det rå og uortodokse udstillingssted, Lokomotivværkstedet og havde 5.483 besøgende.



Da CPH LabMed lukkede torsdag den 9. oktober kl. 16.00, havde 5.483 besø-

gende passeret forbi scannerne i entreen. Det svarer til en vækst på 30% sammenlignet med den sidst afholdte Scanlab-messe. CPH LabMed havde 134 udstillere, hvoraf de fleste var tilfredse med arrangementet, udstillingslokaler og antallet af besøgende. Lidt malurt i bageret var dog for mange de noget kaotiske parkeringsforhold, der ikke gjorde det lige let at komme til og fra messen.



Helle Vejrup fra Statens Serum Institut Diagnostics præsenterede en bærbar ATP-måler.

Allerede nogle dage efter messen, udsendte messearrangørerne det foreløbige resultat af det uddelte udstillerspørgeskema. Her gengives nogle af højdepunkterne. Ud af 63 besvarelser var: 82,26% tilfredse eller meget tilfredse med antallet af besøgende.

90,3% tilfredse eller meget tilfredse med kvaliteten af de besøgende.

91,9% tilfredse eller meget tilfredse med indretningen og miljøet i Lokomotivværkstedet.

84,3% svarer NEJ til, at der er produktkategorier, de savner på messen.

52,7% kommer for at besøge eksisterende leverandører.

29,3% kommer for at finde nye leverandører.

89,6% kommer for at hente inspiration til fremtidige indkøb.

50,7% kommer for at få overblik over markedet.

Her er et lille udpluk af, hvad man ellers kunne opleve på messen.



Fantasiaen var sluppet løs på Biolabs stand. Foto: Biolab.

Kreativ stand

På Biolabs stand var fantasiaen sluppet løs og man følte, at man trådte ind i en besat zone bevogtet af professionelle soldater. Men der var også meget forskelligt udstyr at passe på. Kim Stjerne præsenterede bl.a. en Reaction Monitor Station Gx-271 – en kompakt arbejdsstation til at kontrollere reaktioner i lille skala, en række spektrofotometre fra JASCO og fra Andrew en ny væskehåndteringsrobot – den første bærbare i verden. Den er lille og kompakt og vejer kun 10 kg, hvorfor den er let at integrere i laboratoriet.

- Vi udstiller meget forskelligt udstyr på vores stand. Og vores stand skulle meget gerne afspejle, at vi er en virksomhed, der elsker særlige udfordringer.

- Vi har bl.a. specialiseret os i udstyr til enzym/peptidop-

rensning. Vi har dedikeret os til de oprensninger, der er særligt svære, hvorfor vi arbejder tæt sammen med en række universiteter, fortæller Kim Stjerne.

En travl oase

En travl oase kunne man finde hos Holm & Halby, der lå godt og centralt placeret. På standen mødte vi Inger Bro, der var godt tilfreds med de besøgende. Førstedagen betegnede hun som lidt stille, mens andendagen var supergod. Hun præsenterede triple quadropol LCMS-8050 fra Shimadzu, hvor vægten er lagt på tre parametre: Hastighed, følsomhed og robusthed. Vedligeholdelsen er simpel, hvilket giver optimal mængde opetid. Instrumentet har en scanningshastighed



På Holm & Halbys stand kunne man se LCMS-8050 fra Shimadzu.

på 30.000 μ /sek. (0,1 μ scan/step), hvilket gør det muligt at opsamle kvalitative og kvantitative data på samme tid. Dataopsamlingen foregår så stærkt, at der både kan foretages MS/MS-scanning og MRM-analyser på samme tid uden tab af præcision og nøjagtighed.

- Generelt kan man sige, at det er relevant for dem, der har brug for mange informationer på én gang, fortæller Inger Bro og fortsætter:

- Markedet for MS er voksende i Danmark. Danmark er et højteknologisk land, og der stilles store krav til softwaren, idet brugerne er meget dygtige. Vi får udviklet softwaren efter brugernes behov, men det tager naturligvis tid.

ATP-måler til hygiejnekontrol

Helle Vejrup fra Statens Serum Institut Diagnostics præsenterede en lille bærbar ATP-måler udviklet til hygiejnekontrol i fødevarerindustrien.

- Instrumentet måler de nødvendige parametre i HACCP-programmet: ATP, konduktivitet, koncentration, pH samt temperatur. Ved hjælp af den udviklede software er det overflødigt at registrere og overføre data fra forskellige papirkilder, fortæller Helle Vejrup og fortsætter:

- Instrumentet er udført med touch screen, der er så følsomt, at det også registrerer ens valg, når man har handsker på. Det er nemt at vælge testpoints, og resultaterne præsenteres med både tekst og farvekoder.

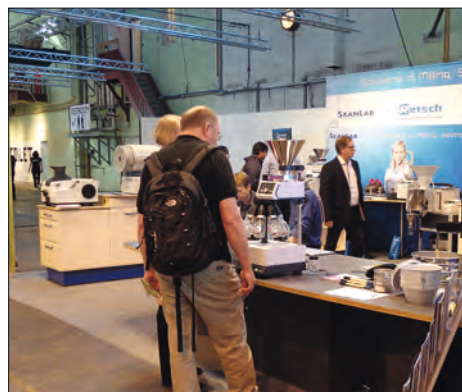
Systemet giver et klart og visuelt indblik i mængden og anvendelsen af ATP-swabs i forhold til de fastlagte mål. Det er muligt at se, hvorvidt områder, der ikke bestod kontrol ved ATP-målingen, er blevet rengjort og testet igen.

Rapportfunktionen gør det hurtigt og nemt at udskrive en komplet HACCP-rapport, der er klar til præsentation - også når auditøren kommer på uventet besøg.

Det kan anvendes ved både stuetemperatur samt i kølerum, uden at resultaterne påvirkes.

Interesse for faste stoffer

På Skanlabs stand var der mange besøgende, og det var en travl Birte Asmussen, vi lige fik en hurtig snak med. Såvidt



Der var stor interesse for Skanlabs stand, hvor man kunne se alt fra formaling af vævsprøver til formaling af beton.

hun kunne vurdere, havde der været en del kvalitetsbesøgende, selvom man først rigtig finder ud af det, når man kommer hjem.

- På standen viser vi alt fra formaling af vævsprøver til formaling af beton. Vi leverer løsninger og produkter til tilberedning og homogenisering af laboratorieprøver samt udstyr til optisk, laser og fysisk kornstørrelsesanalyse, fortalte hun. På standen vises bl.a. Camsizer IIP4 fra Retsch Technology med nye features og nye kameraer. Det er et patenteret 2 kamera optisk målesystem, der kan måle både kornstørrelse, fysisk form og antal i én og samme analyse. Carbolite har siden 2012 været en del af Verder Scientific Gruppen. Og virksomheden har et meget bredt program af ovne med temperaturer op til 2.000°C.

Birte Asmussen er selv produktspecialist, og hun fortalte, at hun har mere end 25 års erfaring inden for prøvetagning og prøvetilberedning af faste stoffer.



Anton Paar

**Future-proof
Rheometers**

MCR 302
Ready for everything



info.dk@anton-paar.com | www.anton-paar.com

PTR-TOF-målinger på Villum Research Station

PTR-Time-of-flight MS til målinger af afsætning og emission af organiske forbindelser fra og til atmosfæren.

Af Rossana Bossi og Henrik Skov, Aarhus Universitet, Institut for Miljøvidenskab

De nye PTR-MS med TOF-massespektrometre gør det muligt at måle overfladeudvekslingen af flygtige organiske forbindelser med høj tidsopløsning. Luftkoncentrationer af VOC og deres overfladeudveksling skal måles på den nye forskningsstation station Villum Research Station på Nordgrønland.

Proton-Transfer-Reaction Mass Spectrometry (PTR-MS) er en måleteknik, som har været brugt i de sidste 10 år til online-målinger af flygtige organiske forbindelser (VOC'er). Sidst i 1990 havde en gruppe fra Innsbruck Universitet i Østrig udviklet et instrument baseret på en kombination af en "drift tube" og et kvadrupol massespektrometer [1]. Følsomhed, detektionsgrænser og tidsopløsning af PTR-MS-instrumenter er forbedret væsentligt de sidste 3-4 år. PTR-MS-instrumenter kan nu typisk måle ned til 10 pptv VOC'er i luften (Engelsk: pptv = part per trillion volume). PTR-MS er egnet til målinger af de fleste hydrocarboner og deres oxiderede produkter.

PTR-Time-of-Flight Mass Spectrometry (PTR-TOF-MS)

Der findes tusindvis forskellige VOC'er i luften, og mange stoffer har den samme molekylære vægt. I MS spektre genereret med et kvadrupol er det umuligt at skelne mellem to stoffer med den samme molekylære vægt (såkaldt "isobaric compounds"). PTR med Time-of-flight (TOF) massespektrometer gør det muligt at skelne mellem stoffer med samme masse,

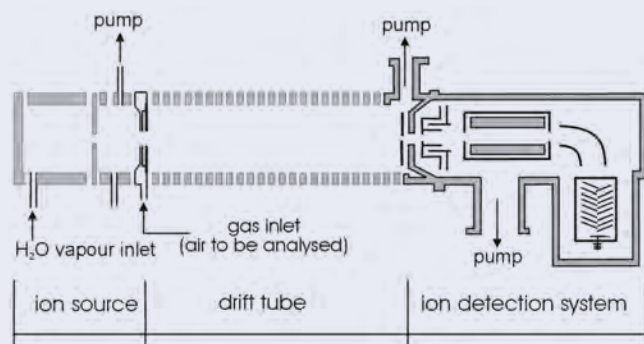
men forskellig grundstofsammensætning. Det er muligt, da et TOF-massespektrometer har en højere masseopløsning end et kvadrupol massespektrometer. TOF-MS koblet til PTR har typisk en opløsningsevne på 5000.

Målinger af VOC overfladeudveksling med PTR-TOF

Målenøjagtighed og høj scanningshastighed er to vigtige funktioner, når man skal måle overfladeudveksling af organiske forbindelser, f.eks. mellem havoverfladen og luften. Når PTR-MS anvendes til disse målinger, bruger man typisk en teknik kaldet "eddy covariance" (EC), som giver en høj tidsopløsning. Relaxed eddy accumulation (REA) er en anden teknik, som bruges sammen med PTR-MS. Der er flere udfordringer ved at måle VOC-overfladeudvekslinger med PTR-MS. For eksempel kan flere stoffer med den samme molvægt interferere med hinanden, således at det er umuligt at beregne netto-overfladeudvekslingen af forskellige stoffer. Den høje masseopløsning man kan opnå med de nye PTR-TOF'er kombineret med deres høje scanningshastighed (op til 10 Hz) er nødvendige forudsætninger for at kunne måle overfladeudvekslinger med EC og PTR-TOF-MS [2]. I modsætning til en kvadrupol MS, hvis transmission af ioner falder over m/z 100, stiger TOF-MS-følsomheden med stigende masse, hvilket giver en bedre detektion af semi-volatile organiske stoffer (typisk de oxygenerede VOC'er som afsættes til overflader). Simultane målinger af overfladeudvekslinger af forskellige organiske forbindelser vil give nye muligheder

■ Princippet i PTR-MS

Princip: Luften suges direkte ind i driftskammer, hvor VOC ioniseres af protoneret vand (H_3O^+), således at der dannes en protoneret VOC. Da ioniseringsformen er mild, sker der næsten ingen fragmentering af molekylet. Der er andre ioniseringsmuligheder som f.eks. med ilt (primært O_2^+) eller NO^+ for at kunne ionisere de stoffer, der har lavere protonaffinitet end vand.



Kilde: Ionicon Analytik GmbH

for at kunne forstå de processer i luften, der bestemmer f.eks. VOC'ers skæbne. Dermed kan man også komme med et bud på, om de kan danne partikler, eller om de fjernes inden da.

PTR-TOF-målinger ved Villum Research Station (VRS)

Biologisk dannede VOC'er udgør 90% af den totale emission af VOC'er til atmosfæren [3]. Derfor har de stor indflydelse på atmosfærens kemi, og dermed hvor hurtigt stoffer kan omsættes i luften og dermed indirekte på klimaændringer. Disse processer er ikke særlig godt kendte i Arktis, selvom klimaforandringerne her er størst.

En enestående mulighed for at studere disse processer er givet vha. en bevilling på 70,5 mio. kr. fra Villum Fonden til etablering af en ny forskningsstation ved Station Nord, Grønland [4]. Stationen er udstyret med state-of-the-art-instrumenter



PTR-TOF 8000 fra Ionicon Analytik.

til luftmålinger, bl.a. to PTR-TOF-MS fra Ionicon Analytik (Innsbruck, Østrig). Et af instrumenterne er udstyret med en TOF, som har en masseopløsning på 8000. Det andet, et mere kompakt instrument, har en masseopløsning på op til 1000 og kan anvendes f.eks. til feltkampagner på is. Herudover skal de anvendes til at måle koncentrationer af lang-transporterede VOC'er. Det kan f.eks. være indikatorer for biomas-

seafbrænding (acetonitril), hvilket vil give en bedre forståelse af dynamikken af sod og andre forbindelser, der har effekt på klimaet i Arktis. Målinger af forbindelser i gasfasen skal suppleres målinger af organiske stoffer i partikler, som udføres med aerosol massespektrometre (AMS) [5].

E-mail:

Rossana Bossi: rbo@envs.au.dk

Henrik Skov: hsk@envs.au.dk

Referencer

1. Lindinger, W.; Hansel, A.; Jordan, A. Proton-Transfer-Reaction Mass Spectrometry (PTR-MS): on-line monitoring of volatile organic compounds at ppt levels. *Chem. Soc. Rev.* 1998, 27, 347-375.
2. Müller M.; Graus, M.; Ruuskanen, T.M.; Schnitzhofer, R.; Bamberg, I.; Kaser, L.; Titzman, T.; Hörtnagl, L.; Wohlfart, G.; Karl, T.; Hansel, A. First eddy covariance flux measurements by PTR-TOF. *Atmos. Meas. Tech.* 2010, 3, 387-395.
3. Seinfeld, J. H., and S. N. Pandis (2006), *Atmospheric chemistry and physics: from Air Pollution to climate change*, Second ed., Wiley-Interscience.
4. Skov, H.; Rasch, M.; Hansen, J.M.; Lorenzen, B. Ny forskningsstation på Station Nord i Nordgrønland. *Dansk Kemi* 2014, 9, 28-31.
5. Nøjgaard, J.K. Aerosolmassespektrometri. *Dansk Kemi* 2013, 9, 22-23.



Ekspllosion i rådnetank med biogas

En rådnetank på Vejle Centralrenseanlæg eksploderede i 1990, mens håndværkere arbejdede på taget. Nu, 24 år senere, hvor biogas er populær som aldrig før, er hændelsen fuldstændig forsvundet fra tilgængelige åbne kilder.

Af Frank Huess Hedlund, Risikoekspert COWI, ekstern lektor, risikomanagement, DTU

Naturligt forekommende bakterier danner metan ved anaerob forrådnings af organisk materiale. Gassen kendes under flere navne: Sumpgas, lossepladsgas eller biogas. I mange år har det været almindeligt på renseanlæg at føre det producerede spildevandsslam til en rådnetank. Derved omsættes noget af det organiske materiale i spildevandsslammet til biogas, som typisk driver en gasmotor og generator. Den producerede elektricitet



Det kollapsede betondæk lagde sig på rådnetankens topkegle. Under ringbjælken ses revne i tankvæggen.
Foto: Vejle Amts Folkeblad.

kan sælges, og overskudsvarmen fra gasmotoren kan udnyttes til at opvarme rådnetanken. Endvidere nedbrydes nogle af de patogene organismer under forrådnings, hvorved der sker en delvis hygiejnisering af spildevandsslammet.

Rådnetankene drives typisk ved en temperatur på enten ca. 37°C (mesofil drift) eller ca. 55°C (termofil drift). Driftstrykket er beskedent, i størrelsesordenen 50 mbar overtryk. Ved forrådnelsen dannes også kuldioxid. En typisk gasanalyse (molprocent tør gas) kan lyde på 59% metan, 39% kuldioxid, noget nitrogen, ilt og en smule svovlbrinte. Af sporgasser har særlig siloxaner teknisk interesse, idet de forbrænder til siliciumdioxid (kvarts), hvilket giver belægnings og andre driftsproblemer i blandt andet gasmotorer. Siloxanerne kommer til med spildevandet, idet de anvendes som skumdæmpende midler i bl.a. kosmetik og imprægneringsmidler.

Kombinationen af temperatur, vanddamp og kuldioxid skaber et udfordrende korrosivt miljø og pga. leve-tidsovervejelser er rådnetanke traditionelt blevet udført af beton. Det lave driftstryk tillader, at der arbejdes med andre koncepter, herunder simple beholdere overdækket med en dug af kunststof.

Biogassens høje indhold af kuldioxid har en række afledte effekter. For det første er brændværdien kun ca. det halve af naturgas, som består af ca. 98 procent metan. For det andet har gassen noget nær neutral densitet, den er altså ikke udpræget let og stiger ikke til vejrs, som naturgas gør. For det tredje udgør det tunge kuldioxidmolekyle knap 2/3 af biogassens vægt. Det betyder, at store oplag af biogas kan blive omfattet af risikobekendtgørelsen. Et anlæg er omfattet, hvis tærskel-mængden på 10 ton overskrides. Det er lidt over 8.000 Nm³, afhængig af biogassens sammensætning. Det lyder måske umiddelbart lidt besynderligt, at et gasoplag, der falder uden for definitionen på en risikovirksomhed, kan blive et sådant ved at indblende en tung inert komponent. Men sådan er det altså.

Politisk er biogas interessant som en CO₂-neutral energikilde, fordi gassen, i modsætning til bl.a. sol og vind, har den store fordel, at den kan gemmes, indtil der er efterspørgsel efter energien. Biogasudbygningen støttes derfor ved forskellige byzantinske subsidieordninger, herunder afregning af produceret elektricitet til overpris. Ambitionen er, at den samlede produktion fra biogasanlæggene skal øges fra godt 4 PJ om året i 2013 til 17 PJ i 2020.

Det vil betyde flere biogasanlæg. En af udfordringerne er at få tilstrækkelige mængder egnet substrat til rådnetankene fra affaldskilder, og undgå at skulle omdanne fødevarer til biogas. De danske renseanlæg kan derfor forventes at afsøge muligheder for at ændre driften, så det organiske stof udfældes som primærslam i stedet for at blive omsat ved aerob respiration i luftningsbassinerne.

Da biogasproduktionen er konstant døgnnet over, mens el-prisen varierer i takt med efterspørgslen, kan det være økonomisk attraktivt at investere i et gaslager, så der kan produceres elektricitet i spidslastperioderne, hvor el-prisen topper. Der vil derfor også komme flere biogaslagre.

Rådnetanken

Det har været helt usædvanligt vanskeligt at fremskaffe oplysninger om denne ulykke, så den følgende beskrivelse bygger delvist på formodninger.

Det ligger fast, at Vejle Centralrenseanlæg skulle have renoveret tagbeklædningen på begge sine rådnetanke, A og B, muligvis for at få fjernet en ældre murdækning af eternit.



Pyntesøjler af beton var væltet bort fra tanken. En af betonsøjlerne hang meget usikkert mod trappetårnet. Bemærk rester af udluftningsslangen, der hænger ned fra taget, samt den intakte(?) identiske rådnetank til højre.
Foto: Vejle Amts Folkeblad.

Løsningen var tagpap, altså svejsning ved brug af gasbrændere (åben ild).

De to identiske rådnetanke, A og B, står ved siden af hinanden adskilt af et trappetårn med fælles-installationer. Arbejdet starter på Tank B.

Rådnetanken har form som en cylinder med kegleformet top og bund udført af in-situ støbt armeret beton. Topkeglen hviler på en ringbjælke, som igen hviler på de lodrette betonvægge. Ydermuren er indvendigt af lecablokke, udvendigt af teglsten og den er ført op over ringbjælken som en murbrystning. Rådnetankens topdæk af beton løber vandret ud fra selve tankens topkegle til murbrystningen. Det ringformede hulrum mellem topdæk og topkegle fungerer som teknikgang og rørkanal. Af arkitektoniske årsager brydes facademuren af nogle lodrette betonbjælker (pyntesøjler), som ikke bærer nogen last. De er anbragt i muren med en lille meters mellemrum i serier på tre, kun fastgjort i det øverste betondæk og med murbindere i lecavæggen.

Planlægning

Planlægningen starter allerede den 31. maj, og eksplosionsfaren er noget af det første, der nævnes. Der afholdes to myndighedsmøder, og det besluttes at nedrosle gasproduktionen og udlufte tanken grundigt for gas, før arbejdet startes. 14 dage før bliver der ikke påfyldt nyt slam, og ugen efter bliver alle fire luger på rådnetankens tag åbnet, så gassen kan komme ud den vej.

Efter en uges udluftning bliver dækslerne lukket igen og de kontrolleres for tæthed. Det sikres, at ventil mod nabo-rådnetank A, som er i drift, er lukket og låst, og at udluftningsrør på toppen af rådnetanken er åben.

For at være helt sikker på, at der ikke kan komme gas på taget, hvor der arbejdes med åben ild, sættes der en slange på udluftningsrøret, der føres ud i luften omkring tre m over rådnetankens top. Både før og under arbejdet testes atmosfæren på arbejdsstedet med eksplosiometer. Der er intet udslag. Arbejdet

■ Serie om ulykker med farlige stoffer

Der er foregået en del ulykker i Danmark med farlige stoffer. Men der er ikke tradition for efterforskning og systematisk vidensdeling. Med ganske få undtagelser er dyrt høstede erfaringer i fare for at blive glemt.

Santayana har sagt, at de, der ikke kender historien, er dømt til at gentage den.

Artiklen er den fjerde i en serie, som vil råde bod på denne sorte plet ved at beskrive tidligere hændelser udvalgt for deres læringspotentialer.

skulle også udføres, så vinden til stadighed har retning fra arbejdsstedet mod udmundingen af udluftningsslangen.

Torsdag den 16. august starter to tagdækkere med at klæbe underpap og overpap. Om fredagen sættes der ekstra kræfter ind, så arbejdet kan færdiggøres til aftalt tid den 24. august, og den dag arbejder fem tagdækkere og to murere på taget. Om mandagen kan der ikke arbejdes pga. regn, men om tirsdagen den 21. august arbejder der igen fem tagdækkere på taget.

Ekspllosion den 22. august 1990

Tirsdag morgen kl. 7.21 modtager Vejle Brandvæsen melding om kraftig eksplosion på renseanlægget, brand og indespærring af personer i ruinerne. Meldingen var ikke helt korrekt, idet der ikke var brand eller indespærrede personer, men eksplosionen var korrekt. Brandvæsenets opgave var derefter at forhindre yderligere udbredelse af skadens omfang.

Ekspllosionen bevirkede, at murbrystningen væltede, hvorefter topdækket kollapsede og lagde sig til hvile oven på rådnetankens topkegle.

På eksplosionstidspunktet var der fem tagdækkere på taget, som blev "slynget væk". To landede livsfarligt kvæstede mellem brokkerne på jorden efter et fald på omkring 15 m. To slap med overfladiske skrammer efter et kortere fald og én slap mirakuløst med skrækken. De to hårdt kvæstede overlevede, men med meget alvorlige læsioner, bl.a. i hovedet, som gav varig svær invaliditet.

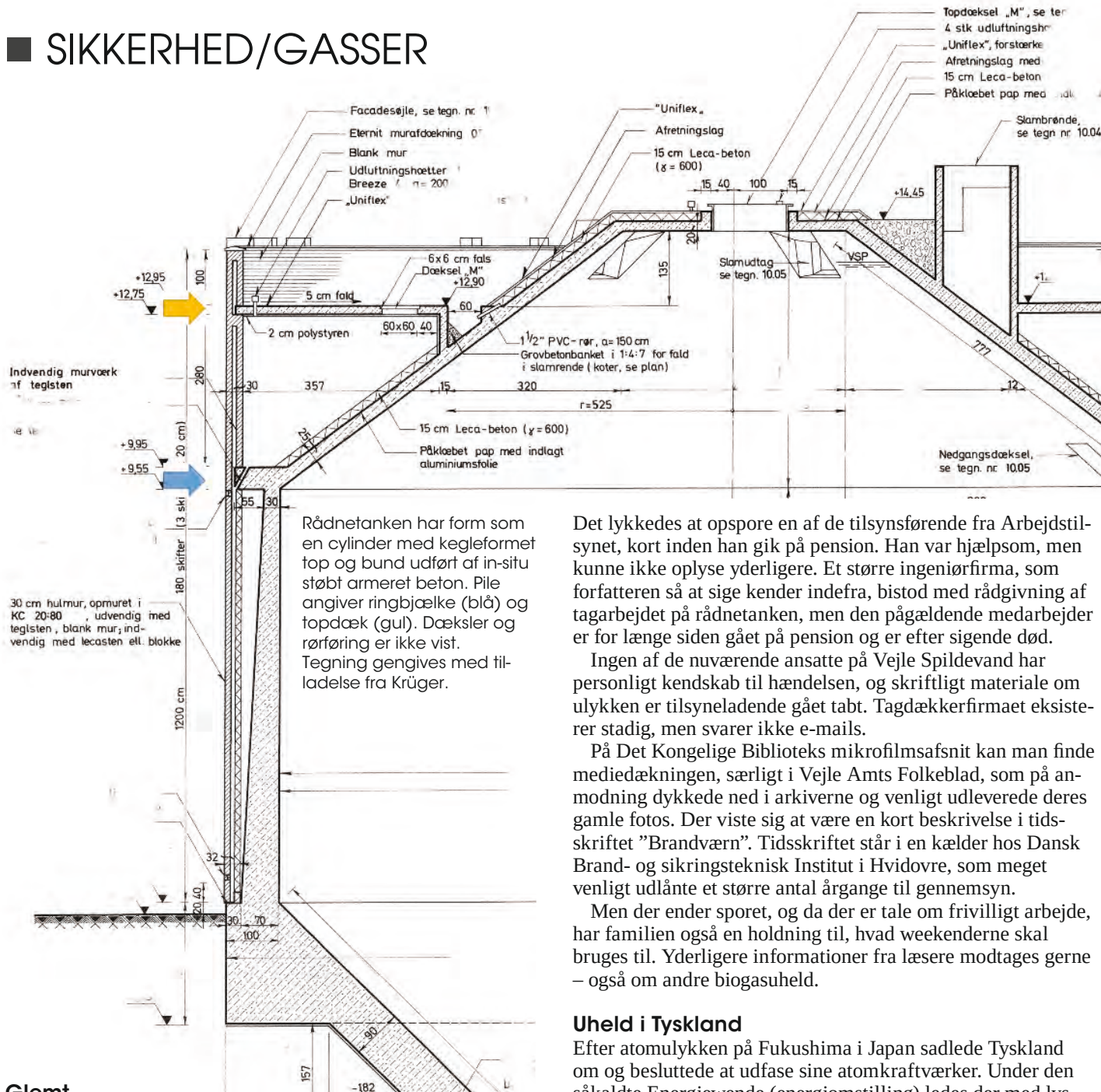
Den direkte årsag til ulykken var hurtigt opklaret. Tilsyneladende var udluftningsslangen ført hen over rådnetankens topdæk, ud til kantmuren, og først her tre m i vejret. Det var en flexslange med spiral af ståltråd beklædt med plast. En tagdækker er kommet til at strejfe den med sin gasbrænder. Det har gennembrændt slangen, antændt gassen, hvorefter flammen er slået tilbage til rådnetanken. Det er så indlysende, at det næsten skræker i øjnene, skriver *Arbejdsmiljø*.

Med en risikoanalytikers øjne er det især den rene jammer, at man har gjort sig så stor umage med at blande godt med luft ind i tanken ved at åbne lugerne på taget. Først når gassen er fortyndet ned under sin øvre antændelsesgrænse, bliver den antændelig. Det nævnes ikke i kildematerialet, så det er ren spekulation, men det ser ud til, at alle implicerede har fokuseret snævert på faren for gas på taget, og at alle har været blinde for faren for antændelig gas i selve tanken, måske et eksempel på en mental fastlåsning, på *group think*.

Skader

På ulykkesstedet var der sammenskrivnings- og nedstyrtningssfare. Næsten alle pyntesøjler af beton var væltet bort fra tanken. Nogle havde ramt en gasbeholder ved siden af, men selvom betondækket vistnok revnede, nævnes gasudslip ikke i kildematerialet. En af betonsøjlerne hang meget usikkert og blev vurderet til at kunne true rådnetanken, hvorefter mange tusinde m³ slam ville løbe ud og forurene en nærliggende bæk, der fører direkte ud i Vejle å. Der sivede slam ud af tanken, og der blev brugt sandsække til at forhindre slammets i at løbe ned i den nærliggende bæk. Billedmaterialet viser en revne i den lodrette betonvæg, men ikke udsivning af slam, selvom revnen må være under væskenniveau(?). Det er uklart, hvordan slam løb ud ad tanken. Tilsyneladende var selve topkeglen intakt.

Formentlig er eksplosionen sket i selve rådnetanken. Der er vist ikke sket en eksplosion i den ringformede teknikgang. Facademuren og den øverste del af rådnetanken blev senere revet ned, men det er ikke klart, om tanken blev totalskadet. Trykbølgen havde forplantet sig til nabotankens topdæk, men der er ikke oplysninger om skadernes omfang der. På fotos kan man ikke se skader på glaspartierne i trappetårnet. ◆



Glem

Cicero er citeret for at have sagt, at "den, der ejer en have og en bogsamling, mangler intet". Men det er ganske længe siden, og mange virksomheder kan ikke længere have et bibliotek. Det er for dyrt, og det hele findes jo på internettet alligevel.

Danmark Tekniske Bibliotek i Lyngby har skiftet navn til Danmarks Tekniske Informationscenter, og der er ikke længere en bog i syne. Insidertip: Hold til venstre, find trappen til kælderen - der er stadig nogle bøger dernede.

Under triage, en sen aften kort før udsmidning af et fagbibliotek, dukkede et udklip op om Vejle-hændelsen. I en relativt nylig risikoanalyse af et biogasanlæg kunne man læse, at der ikke er sket uheld med biogas i Danmark. Det er forståeligt nok, for Google finder intet om ulykken i Vejle. Der er heller ikke hjælp at hente fra søgeværktøjet Rex på Det Kongelige Bibliotek eller fra Infomedia, databasen over samtlige danske medier.

På anmodning om aktindsigt udleverede Arbejdstilsynet en aktpakke på ca. 100 sider, men den er måske ikke komplet, for den dækker kun forløbet efter eksplosionsulykken, der er ingen udredning af selve ulykken. Politiet har ikke længere sine sagsakter og henviste til Landsarkivet for Nørrejylland i Viborg, som dog desværre måtte meddele, at aktpakken heller ikke findes der.

Det lykkedes at opspore en af de tilsynsførende fra Arbejdstilsynet, kort inden han gik på pension. Han var hjælpsom, men kunne ikke oplyse yderligere. Et større ingeniørfirma, som forfatteren så at sige kender indefra, bistod med rådgivning af tagarbejdet på rådnertanken, men den pågældende medarbejder er for længe siden gået på pension og er efter sigende død.

Ingen af de nuværende ansatte på Vejle Spildevand har personligt kendskab til hændelsen, og skriftligt materiale om ulykken er tilsyneladende gået tabt. Tagdækkerfirmaet eksisterer stadig, men svarer ikke e-mails.

På Det Kongelige Biblioteks mikrofilmsafsnit kan man finde mediedækningen, særligt i Vejle Amts Folkeblad, som på anmodning dykkede ned i arkiverne og venligt udleverede deres gamle fotos. Der viste sig at være en kort beskrivelse i tidskriftet "Brandværn". Tidsskriftet står i en kælder hos Dansk Brand- og sikringsteknisk Institut i Hvidovre, som meget venligt udlånte et større antal årgange til gennemsyn.

Men der ender sporet, og da der er tale om frivilligt arbejde, har familien også en holdning til, hvad weekenderne skal bruges til. Yderligere informationer fra læsere modtages gerne – også om andre biogasuheld.

Uheld i Tyskland

Efter atomulykken på Fukushima i Japan sadlede Tyskland om og besluttede at udfase sine atomkraftværker. Under den såkaldte Energiewende (energiomstilling) ledes der med lys og lygte efter energikilder, der kan erstatte a-kraften, og som følge af nogle generøse subsidieordninger er der sket en meget kraftig udbygning af biogaskapaciteten. Der er formentlig lidt under 8.000 anlæg i Tyskland. Der er en del alvorlige ulykker på biogasanlæg i de tyske medier.

Netop fordi der er tale om medierapporter, er oplysningerne mildest talt rudimentære og usikre. En professor fra universitetet i Rostock oplyste, at der ikke er en central database over uheld med biogas. Der har været taget kontakt til forskellige andre aktører, men det er et kæmpearbejde, som ikke kan løftes for nærværende.

Der var en meget alvorlig dødsulykke på et biogasanlæg i Niedersachsen i forbindelse med aflæsning af slagteriaffald fra Holland. Under transporten havde affaldet udviklet giftig svovlbrinte (H_2S). Fire personer omkom, og en person kom svært til skade. Ulykken har egentlig ikke noget med biogas at gøre, men med transport af farlige stoffer, som vel at mærke ikke er klassificeret som farlige stoffer. Alligevel må man spørge, hvad en stor diesel (!) tankbil med hollandsk slagteriaffald laver dybt inde i Tyskland. Svaret skal formentlig søges i problemer med at få egnet substrat og i temmelig generøse subsidier, allerede før Energiewende.



Sandsække forhindrede slammet i at løbe ned i den nærliggende bæk. Bemærk væltede betonpiller over anden tank.
Foto: Vejle Amts Folkeblad.

En anden tankbil lastet med importeret hollandsk gylle var involveret i en noget mere harmløs ulykke på en gade i en forstad til Köln. Beboerne berettede, at en morgen, mens de spiste morgenmad, lød der pludseligt et brag ude på gaden, hvorefter stuen blev helt mørk. Det viste sig hurtigt, at der ikke var tale om en strømafbrydelse, men at vinduer og facader på gadens huse var blevet dækket med en såkaldt "brun klæbrig masse". Der er ingen grund til at gå i detaljer her, men årsagen var formentlig varmeudvikling og trykstigning i tankbilen.

Ved samtaler under uformelle former har repræsentanter for tyske myndigheder udtrykt bekymring for ulykkerne på biogasanlæggene. Der er mange gårdanlæg og anekdoter om landmænd, der sadler om, sælger hele kvægbesætningen, dyrker majs eller anden energiafgrøde og producerer biogas. Der hersker stor respekt om de tyske landmænds uddannelse og faglige kunnen, men samtidig også en nøgtern erkendelse af, at nogle af dem er nogle elendige gasingeniører.

Uanset hvad, vil det være en fordel, at der kommer mere opmærksomhed på sikkerhedsaspekterne ved biogasudbygningen, herunder en systematisk erfaringsopsamling.

Epilog

Tak til Vejle Amts Folkeblad for billedmateriale samt til F. Reese, Vejle Spildevand, for at stå på hovedet i kommunens fjernarkiver. Artiklen er skrevet som frivilligt arbejde og har ikke modtaget nogen støtte. Jeg udtaler mig som privatperson, ikke på vegne af mine arbejdsgivere eller andre.

E-mail:

Frank Huess Hedlund: fhhe@cowi.dk

Kilder

Aktindsigt og avisartikler.

Alligevel røg skidt i luften. *Arbejdsmiljø* 1:13-16 (1991).

Gasekspllosion slamtank på rensningsanlæg (Vejle). *Brandværn* 1:27-28 (1991).

Riesen Schweinerei! - Gülletank explodiert in Köln-Roggendorf. Bild. (2010).

(video)

Schwefelwasserstoff-Freisetzung in einer Biogasanlage. *Lfd. Nr. Sammelstelle*:151. Umweltbundesamt. (2005).

Dräger

Sikkert gennem labyrinten af farlige stoffer

Let antændelige stoffer

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

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

www.draeger.dk

Dräger. Teknik for Livet.

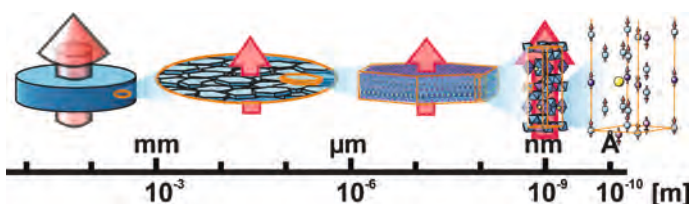


Kemi ved European Spallation Source (ESS)

Materialeforskningens CERN – i Lund.

Af Niels Bech Christensen, Institut for Fysik, Danmarks Tekniske Universitet og Mogens Christensen, Institut for Kemi, Aarhus Universitet

I Lund er byggeriet af den europæiske neutronforskningsfacilitet ESS netop gået i gang. Af den samlede anlægspris på 13,8 mia. kr. bidrager Danmark som medvært med 1,7 mia. kr. Det gør ESS til den største enkeltstående danske forskningssatsning i moderne tid. Vi beskriver her i korte træk, hvad neutronforskning er, og hvordan ESS fungerer. Med udgangspunkt i det dansk-schweiziske instrument HEIMDAL giver vi derpå et glimt af nogle af de kemiske gennembrud, som ESS vil kunne give anledning til, når de første neutroner produceres i 2019.



Figur 1. Magnetiske materialer over mange længdeskalaer – fra centimeter til ångstrømskala ($\text{\AA} = 10^{-10} \text{ m}$). For at kunne lave gode magneter skal alle de viste længdeskalaer undersøges og kontrolleres. Fra højre mod venstre, atomar skala, nanometerskala og mikrometerskala.

Hvad er neutron-spredning?

Da Clifford G. Shull og Bertram N. Brockhouse i 1994 blev tildelt Nobel-prisen i fysik for deres udvikling af neutroindiffraktion og neutronspektroskopi, udtalte Nobelpriskomiteen, at Shull og Brockhouses opdagelser muliggør undersøgelser af, hvor atomer er, og hvad atomer gør [1].

Mere konkret fungerer det således: Neutroner vekselvirker med atomkerner og med elektronernes magnetiske momenter og de trænger pga. deres elektriske neutralitet let igennem de fleste materialer. Når neutroner med bølgelængder i Ångstrøm-området (10^{-10} m) sendes ind på prøver, hvor atomernes indbyrdes afstand er af samme størrelsesorden, kan konstruktiv interferens af de spredte neutroner observeres. I krystallinske materialer ses interferensen i form af strukturelle og magnetiske Bragg-toppe, mens biomolekyler i opløsning giver anledning til mindre strukturerede diffraktionsmønstre.

Ved at undersøge vinkelfordelingen af de spredte neutroner, opnår man et unikt fingeraftryk af en prøves struktur. Hastighedsfordelingen af neutronerne, som forlader prøven, giver information om energiniveauer i prøven. Energierne er bestemt af styrken af bindingerne, der holder materialer sammen, og af de elektromagnetiske vekselvirkninger, der er ansvarlige for f.eks. magnetisme. Dermed kan man grave et spadestik dybere og ikke blot forstå, hvor atomerne er, men også hvorfor de befinder sig, hvor de gør. Endelig kan den strukturelle og dynamiske information fra neutron-eksperimenter kombineres med prøvens

biologiske, fysiske eller kemiske egenskaber, hvorved forskere kan forstå sammenhængen mellem struktur og funktion og dermed designe bedre materialer.

Hvad er ESS?

Traditionelt produceres neutroner til materialeforskning via fission i dedikerede atomreaktorer. Nyere neutronfaciliteter såsom ESS er derimod baseret på en kernefysisk proces, kaldet spallation, der ikke er behæftet med de samme sikkerhedsrisici. Spallation fungerer ved at accelerere pulser af protoner op til hastigheder nær lysets og derpå lade dem kolliderer med et såkaldt target bestående af et tungt grundstof.

ESS vil anvende wolfram som target, som protonpulserne vil ramme 14 gange i sekundet. Hver neutronpuls varer 2.86 ms. Dette er betragteligt længere end verdens øvrige spallationskilder og en væsentlig grund til, at ESS bliver verdens førende facilitet.

Atomkernerne i target eksiteres voldsomt af protonpulsen, og udsender neutroner med meget høj hastighed. Før de kan anvendes til studier af materialer skal disse neutroner nedbremses, så deres bølgelængder når Ångstrøm-området. Dette sker i en såkaldt moderator via kollisioner med lette grundstoffer.

Når ESS er fuldt udbygget, vil der være 22 instrumenter dedikeret til undersøgelser af specifikke materiale-egenskaber lige fra fysik og kemi til biologi, biokemi og ingeniørvidenskab. Danske og schweiziske forskere har samarbejdet om at udvikle innovative instrumentkoncepter til ESS, og tre af disse er nu udvalgt til konstruktion.

De nye instrumentkoncepter kombineret med forbedringer i accelerator-, target- og moderatorteknologier giver ESS gain-

■ ESS i tal

Konstruktionen af ESS vil i alt koste 13,8 mia. kr. Heraf bidrager Sverige som værtsland med 35%, mens Danmark som medvært lægger 12,5%, svarende til cirka 1,7 mia. kr. Det gør ESS til den største danske forskningssatsning i nyere tid. De resterende 52,5% af anlægsomkostningerne betales af de 15 europæiske medlemslande.

Efter planen bliver de første neutroner produceret i 2019, og ESS skal stå fuldt operationsklart i 2025. Det forventes, at ESS vil have ca. 500 fastansatte og at flere tusinde forskere fra hele verden hvert år vil gæste de eksperimentelle faciliteter i Lund, samt ESS' Data Management of Software Center (DMSC) i København. DMSC vil have ca. 60 fastansatte medarbejdere og har ansvaret for processerings- og analysesoftware til de enorme datamængder, der dagligt vil blive produceret i Lund [2].



Her skal ESS bygges.

faktorer på mellem 30 og 1.000 i forhold til de bedste instrumenter i verden. Populært sagt kan ESS-instrumenter måle mellem 30 og 1.000 gange hurtigere, så en måling der i dag tager en time, på ESS vil kunne foretages på under to minutter. Med sådanne forbedringer vil ESS revolutionere materialeforskning i bred forstand og være stærkt medvirkende til at løfte vigtige samfundsudfordringer inden for avancerede materialer til energi- og bioteknologi. Med reference til partikel-fysikkens mekka er det derfor ingen tilsnigelse at hævde, at ESS bliver materialeforskningens CERN!

Kemi på ESS

Vi går nu over til at beskrive eksempler på de mange specifikke kemiske problemstillinger, som ESS vil give afgørende ny information om. Vi tager konkret udgangspunkt i instrumentet HEIMDAL, som er udviklet i et samarbejde mellem Aarhus Universitet, Københavns Universitet og Paul Scherrer Institutet i Schweiz. Ved som noget unikt at kombinere klassisk neutron-diffraktion med småvinkelsspredning og imaging kan HEIMDAL undersøge strukturer på længdeskalaer imellem 0.01 nm og 50 mm. Intervallet svarer til objekter på en længdeskala fra 1 meter op til afstanden til månen – altså ni størrelsesordener.

HEIMDAL udnytter flere af neutronspreddingens specielle styrker i forhold til røntgen-diffraktion, herunder at neutroner tydeligt ser lette elementer såsom H, Li og O, der er centrale for

detaljeret forståelse og forbedring af energilagringsteknologier såsom hydrogenlagring, Li-ion-batterier og brændselsceller.

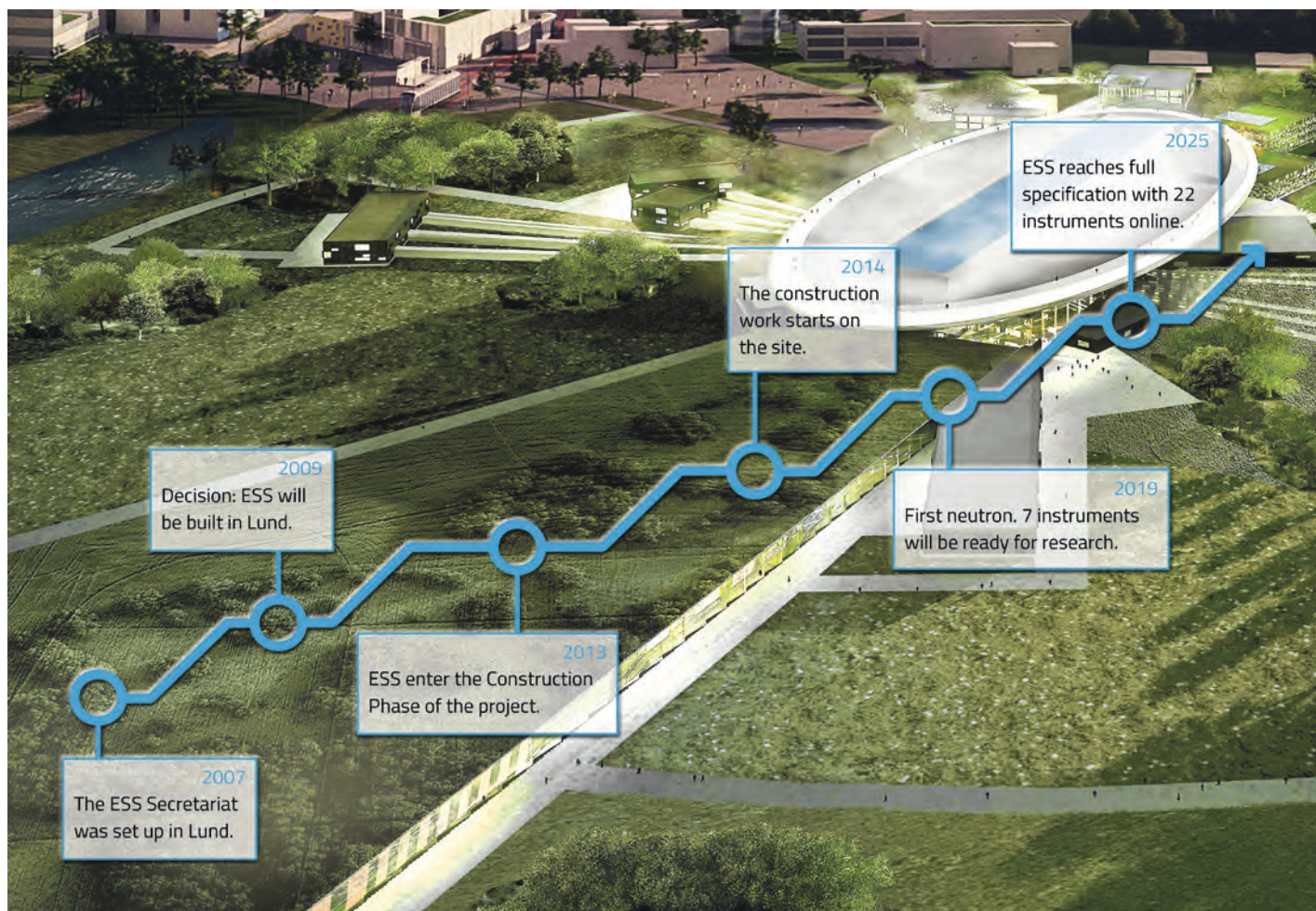
Evnen til at foretage undersøgelser på mange længdeskalaer simultant vil blive kombineret med muligheden for at lave in situ- og in operando-forsøg. Det bliver med andre ord muligt at studere batterier under operationelle betingelser og observere Li-ionernes bevægelse under af- og opladning. Studier af multi-skalastrukturer er også af interesse inden for heterogen katalyse og porøse netværk til transport af medicin.

In situ-forsøg på HEIMDAL med varierende temperatur, tryk, volumen eller kemisk sammensætning vil føre til nye genembrud inden for materialsyntese, idet man vil kunne undersøge krystallisationsprocesser og herunder studere prækrystallinske faser og dermed identificere optimale syntesebetingelser. Dette er ikke blot af akademisk interesse, men kan have konkret økonomisk



SKANLAB **Retsch**
Solutions in Milling & Sieving

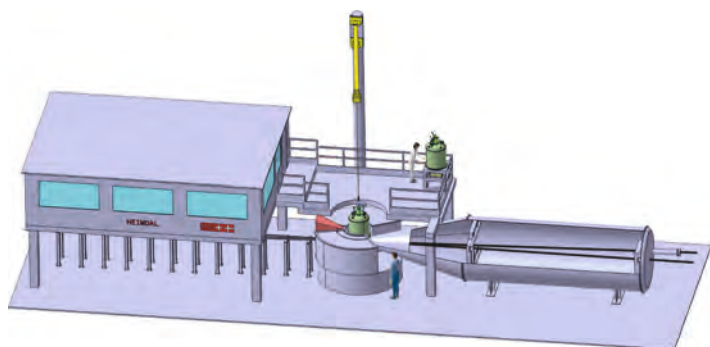
www.retsch.dk
birte@skanlab.com



Tidsplanen for opbygning af ESS.

betydning, f.eks. via studier af cements størkningsproces eller uhensigtsmæssig nukleering af klathrat-hydrater i olie-rør. I begge tilfælde er det essentielt, at HEIMDAL har den fornødne neutronintensitet til at følge tidsudviklingen af strukturerne, hvorved kemiske processer der foregår en på 1 sekunds tidskala, kan "filmes".

Iblandt styrkeområderne finder vi også parametriske studier, hvor komplette fasediagrammer af nye materialer kan



Det er essentielt, at HEIMDAL har den fornødne neutronintensitet til at følge tidsudviklingen af strukturer, hvorved kemiske processer, der foregår på en 1 sekunds tidskala, kan "filmes".

bestemmes i løbet af et og samme eksperiment. HEIMDAL vil desuden være velegnet til studier af væsker og glas, fordi det er muligt at måle parfordelingsfunktionen, som tillader direkte observation af interatomare afstande i ikke-krystallinske materialer. Endelig vil HEIMDAL tillade dybere forståelse af

magnetiske materialer, hvor nye og forbedrede magneter kan fremstilles af magnetiske nanokompositter, figur 1.

Perspektiver med ESS

Udover HEIMDAL bygges der en lang række instrumenter til undersøgelse af kemiske forbindelser og materialer. I fokus er alt fra bestemmelse af hydrogenpositioner i proteinkrystallografi til ingeniørelaterede instrumenter, som kan undersøge strukturelle ændringer under mekanisk påvirkning. Andre instrumenter vil kunne give information om atomernes vibrationer og magnetisk spindynamik, som er vigtige for at forstå termoelektrika og funktionelle magnetiske materialer. De 22 ESS-instrumenter vil hver især bidrage med ny viden inden for fysik, kemi, biokemi, biologi og mange andre naturvidenskabelige discipliner.

Udover verdens kraftigste neutronkilde, ESS, kommer Lund til at huse verdens kraftigste røntgen synkrotronkilde, MAX-IV [3].

Neutron- og røntgenspredningsteknikker er komplementære og de to nabofaciliteter vil findes lige på den anden side af Øresund, til stor gavn for akademisk og industriel forskning og udvikling i Danmark.

E-mail:

Niels Bech Christensen: nbch@fysik.dtu.dk

Mogens Christensen: mch@chem.au.dk

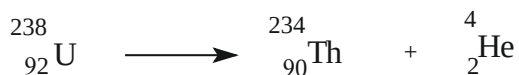
Referencer

1. www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1994/press.html
2. <http://europenspallationsource.se/>
3. www.maxlab.lu.se/maxiv

Nyt om ...

... Gammelt helium
udspyes af varme kilder

Varme kilder i Yellowstone National Park i USA udsender helium. Parken ligger i et stærkt vulkansk område og har mange varme kilder og geysere, hvor der udspyes varm damp,



som indeholder store mængder gasser, bl.a. helium-4, der er en af heliums stabile isotoper. Det er dannet ved henfald af uran i jordskorpen. Beregninger viser, at der frigøres ca. 60 ton helium om året i parken. Det er flere hundrede gange mere, end der kan dannes i jordskorpen på et år. Helium må altså stamme fra reservoirer, der er opbygget for millioner af år siden. Man antager, at gassen er begyndt at undslippe for to millioner år siden. Selv om helium er sjældent, mener man ikke forekomsten i Yellowstone med økonomisk fordel, kan udnyttes.

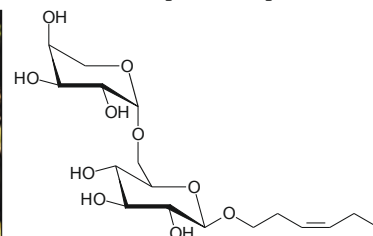
Carl Th.

Prodigious degassing of a billion years of accumulated radiogenic helium at Yellowstone, *Nature* 20, 2014 (7488) side 355. DOI: 10.1038/nature 12992.

Nyt om ...

... Tomatplanter fører
kemisk krig

Japanske forskere har vist, at når sultne møllarver begynder at stille deres sult på tomatplanter, frigør disse (Z)-hex-3-en-1-ol. Når det af vinden føres over til andre tomatplanter, opfatter



(Z)-HEX-3-EN-1-YLVICIANOSID

disse det som et varselsskrig og optager (Z)-hex-3-en-1-ol'en fra luften. Planten omdanner alkoholen til et glycosid (Z)-hex-3-en-1-ylvicianosid, som forhindrer larvernes omdannelse til møl og dermed slægtens videre udbredelse og beskytter herved naboplanterne.

Carl Th.

Intake and transformation to a glycoside of (Z)-hex-3-enol from infested neighbors reveals a mode of plant odor reception and defense, *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* 2014, DOI: 10.1073/pnas.1320660111.

GRATIS MAGASIN-APP!



TIL TABLET OG SMARTPHONE



2014: Hvad der var brandvarmt inden for analytisk kemi denne sommer

Rejsebeskrivelser fra fire analytisk kemiske konferencer

Analytisk kemi er i rivende udvikling disse år. En effektiv måde at holde sig orienteret om de nyeste udviklinger og skabe kontakter er at deltage i internationale møder, hvor de bedste forskere beskriver deres arbejde. I denne artikel beskrives højdepunkterne ved fire kongresser inden for emnefeltet.

Af Nikoline J. Nielsen, Søren F. Skov, Kristina B. Jäpelt, Nana W. Jørgensen, Anne G. Hansen, Jan H. Christensen, Analytisk Kemi Gruppen, Sektion for Miljøkemi og -Fysik, Institut for Plante- og Miljøvidenskab, Det Naturvidenskabelige Fakultet, KU

International Symposium on Capillary Chromatography, Riva del Garda, Italien ved Søren og Jan

Her så vi for første gang præsenteret en vacuum-UV-detektor til gaskromatografi (GC). Præsentationen blev holdt af Kevin Schug fra Texas Universitet, som har deltaget i udviklingen af detektoren. Inden for væskkromatografi (LC) er UV/VIS-spektroskopi et forholdsvis velkendt detektionsprincip, men der er nogle væsentlige forskelle, når vi bevæger os over i vacuum-domænet og kobling til GC. For det første er den nedre grænse for brugbare bølglængder lavere, da den mobile fase ikke er UV-absorberende. Det betyder, at den primære begrænsning, vi kender fra LC-UV - nemlig at man ikke kan detektere analytter uden kromoforer - helt bortfalder. Selv alkaner absorberer i vacuum-UV-området og kan dermed detekteres, identificeres og kvantificeres. Absorption ved lavere bølglængder er desuden mere intens, typisk 1.000 gange højere, hvilket mindsker følsomhedsproblemet i tidligere GC-UV-koblinger. Sidst, men ikke mindst, er vacuum-UV-spektre mere informative end UV/VIS-spektre, f.eks. kan isomere af xylener skelnes fra hinanden. Detektoren produceres af VUV Analytics, Inc, fra Austin, Texas.

Den anden dag på konferencen stod vi tidligt op for at sidde på forreste række og høre Kevin Thurbide fra Calgary Universitet tale om: *"Egenskaber ved vand som stationær fase i gaskromatografi"*. Da brugen af vand som stationær fase strider mod vores grundlæggende forståelse af GC, hvor vi normalt ønsker at undgå vand i prøverne, havde vi store forventninger til foredraget - og Kevin skuffede os bestemt ikke. Coatingen af vand på en "rå" kapilar udføres ved at anvende en restriktor, dermed øges trykket på kolonnen. Samtidig fugtes den mobile fase ved

at boble gassen igennem vand. Resultatet er en markant anderledes elueringsrækkefølge, end man er vant til fra GC. F.eks. eluerer store alkoholer før mindre på trods af deres højere kogepunkter. Ved analyse af benzin med alkohol iblandet eluerer kulbrinterne stort set i dødvolumet, og de interfererer således ikke med kvantificeringen af alkoholer. Den vandige stationære fase er såmænd også brugbar i superkritisk væskkromatografi (SFC), da vand ikke er blandbart med superkritisk kuldioxid. Teknikken er ikke kommercialiseret endnu. Der er stadig store udfordringer, f.eks. er en acceptabel repeterbarhed for den absolutte retentionstid pt. uopnåelig.

GC×GC Symposium, Riva del Garda, Italien ved Nana, Anne, (Søren og Jan)

Vi har arbejdet med todimensional GC (GC×GC), og vi så frem til at opleve to dage med frontforskning inden for emnet - og vi blev ikke skuffede. GC×GC er kompliceret og har sine udfordringer rent praktisk. Det var bemærkelsesværdigt, at det nu var lykkedes at nedskalere hele separationsprocessen til en chipbaseret $\mu\text{GC} \times \mu\text{GC}$ -enhed. Samtlige komponenter fra GC×GC, inklusiv pumper forsøges miniaturiseret. Mobile GC'er (og til dels μGC 'er) anvendes til detektion af semivolatile organiske stoffer (SVOC'er) i felten ifm. f.eks. luftforurening og eksplosiver. μGC 'ens fordele består i lavere omkostninger grundet de mindre komponenter, samt en besparelse i opvarmnings- og nedkølingsenergi. Miniaturiseringen koster dog dyrt på sensitivitet og peak-kapacitet, grundet den meget kortere kolonne. Det vil derfor være fordelagtigt at få $\mu\text{GC} \times \mu\text{GC}$ på banen grundet den potentielt højere peak-kapacitet. Der er et stykke vej endnu, inden det kan realiseres. Det første skandinaviske symposium med bl.a. dette fokus afholdtes på Frederiksberg Campus, KU den 14. november 2014.

International Conference of the Metabolomics Society (Metabolomics 2014), Tsuruoka, Japan ved Kristina

Et overordnet sigte med metabolomics er at kunne (semi)kvantificere så mange metabolitter som muligt ud af det komplette



Figur 1. CE-TOF-MS laboratorium ved The Institute of Advanced Biosciences, Keiko Universitet, Japan.

sæt – metabolomet, i et givent biologisk system. Metabolometets store kompleksitet stiller høje krav til udvikling og kvalitetskontrol af analytiske metoder, dataprocesseringsteknikker og fortolkning af resultater. Konferencen satte fokus på fremskridt inden for området, samt de største udfordringer. En af de største udfordringer er annotering og identifikation af ukendte metabolitter, og konferencen startede med en workshop om ”Iden-

tification of unknown metabolites” med spændende foredrag af Dave Watson, Oliver Fiehn og Ralf Weber. En del software-redskaber med dette formål er udviklet, men de er af svingende kvalitet. Workshoppens deltagere efterlyste en større grad af standardisering ift. hvor-når, og i hvilken grad en metabolit er tilstrækkelig karakteriseret. Den nysgerrige læser kan f.eks. konsultere [1], hvor der gives definitioner på flere niveauer af annotering/identifikation.

Japan er en region med stor forkærlighed for kapillar elektroforese (CE), og adskillige foredrag havde dette fokus. Instrumentparken ved Keiko Universitet bekræftede dette: 47 time-of-flight masspektrometre (TOF-MS), størstedelen koblet til CE-separation, figur 1.

Mitsutoshi Setou præsenterede et samarbejde med Shimadzu om udviklingen af et imaging mass microscope (iM-

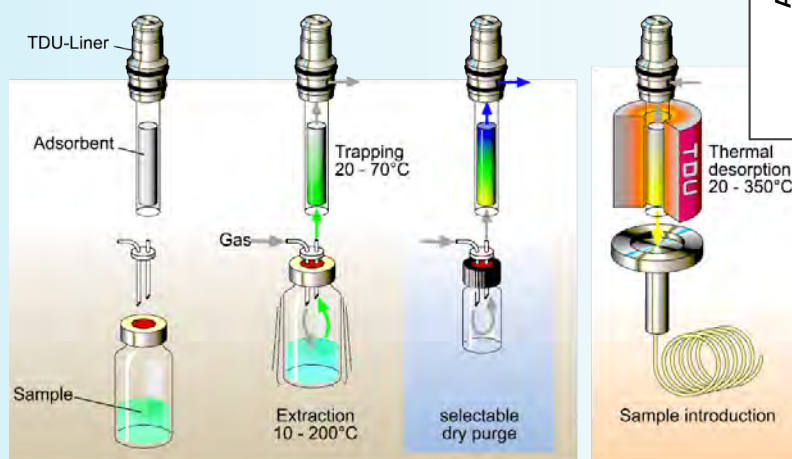
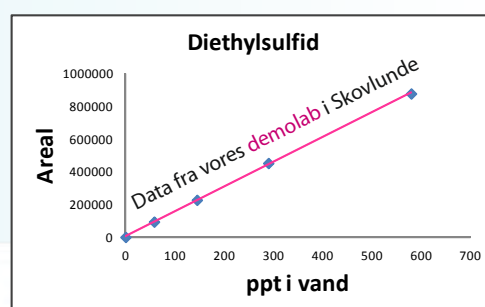
Scope). Instrumentet er en kombination af et optisk mikroskop, som giver højt-opløste morfologiske billeder, samt en indbygget MS, som tillader identifikation og visualisering af fordelingen af specifikke analytter. Koblelsen er elegant, da eksakt positions-information normalt mistes i prøveforberedelsesovergangen fra mikroskopi til MS-analyse. Det mest imponerende foredrag var “A GoogleMAP-type view of specialized

GERSTEL

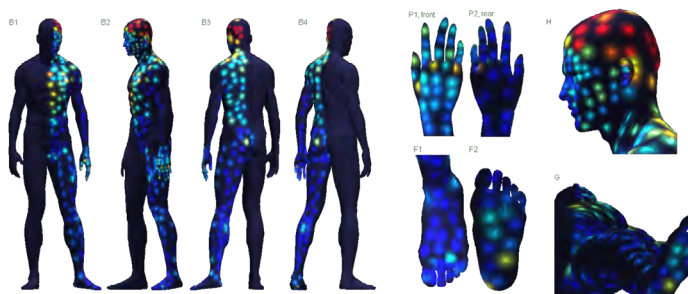


Dynamisk HeadSpace

- Fuldt automatiseret prøvehåndtering
- ppt-niveau



molecules from microbes, their communities and hosts” af Peter C. Dorrestein. Han beskrev MS-baseret kortlægning af organismers overflade mhp. at korrelere kemiske miljøer og forekomsten af forskellige mikrobiologiske sammensætninger. Nedenfor er givet et eksempel for ionen med m/z 355.219 og dens fordeling på en forsøgsperson, figur 2. Ionen stammer fra lauryl ether natriumsulfat, der er en ingrediens i shampoo.



Figur 2. Fordeling af ionen m/z 355.219 på huden af en forsøgsperson. Ionen stammer fra en komponent i forsøgspersonens shampoo. Skalaen er rød, orange, gul, grøn, lys blå, blå. Rød repræsenterer høj intensitet og blå lav intensitet.

Metabolomics 2014 præsenterede en række spændende eksempler på anvendelsen af metabolomics inden for en række forskningsområder helt fra tidlig detektion af lungekræft til modellering af *E. coli*'s biobrændselsproduktion. Desværre var fokus langt mere på applikationer end egentlig generisk udvikling af metoder. Især kunne vi ønske et større fokus på udvikling af analytiske platforme og en større udveksling af erfaringer på området.

Analytical Tools for Cutting-Edge Metabolomics, London ved Nikoline

Dette var en enkeltstående en-dags konference, hvor primært Storbritannien var repræsenteret. Som på den større Metabolomics-konference var annotering og identifikation et fokusområde, og de mest spændende indlæg - når man håber at kunne gå hjem med mere generiske værktøjer - var inden for dette område. Et ungt bidrag om robust metabolit-annotering ved brug af fragmenteringsmønstre kom fra Justin van der Hooft fra Glasgow Universitet. Det var dog Steffen Neumann, Leibniz Institute of Plant Biochemistry, der imponerede mest. Han præsenterede bl.a. MetFusion, figur 3, der kombinerer spektrale databaser (MassBank) med komponent-databaser (ChemSpider, PubChem, KEGG) og *in silico*-fragmentering (MetFrag) for en mere pålidelig annotering og identifikation [2].

Steffen Neumann gennemgik desuden erfaringer fra de åbne globale konkurrencer inden for identifikation af små-molekyle metabolitter ud fra MS-data (Critical Assessment of Small Molecule Identification: CASMI). Generelle erfaringer mhp. pålidelig metabolit-annotering og -identifikation viser, at fornuftig brug af databaser, manuel spektral tolkning, litteraturstudier og prøvekendskab alle er vigtige del-redskaber. 2014-udfordringen blev frigivet i september, og er åben for alle. Interessenter kan læse mere på www.casmi-content.org. Der forefindes f.eks. beskrivelser af, hvordan de grupper der klarer sig godt i denne slags identifikationstests, arbejder. Steffen Neumann kunne opleves til det femte danske symposium om metabolomics som afholdtes på Frederiksberg Campus, KU den 13. november 2014.

Afsluttende bemærkninger

Dette år har vi fokuseret på gruppens konferencedeltagelse omkring emnerne kromatografi og metabolomics. Vi har igen i år haft mulighed for at tage studerende med til konferencer eller på anden måde øge deres internationale kontakthænde, så stor tak til Kemisk Forening og Oticon Fonden for bidrag til deres udgifter. Vi takker desuden Chr. Hansen A/S for rejsehjemmel til ph.d.-studerende Kristina.

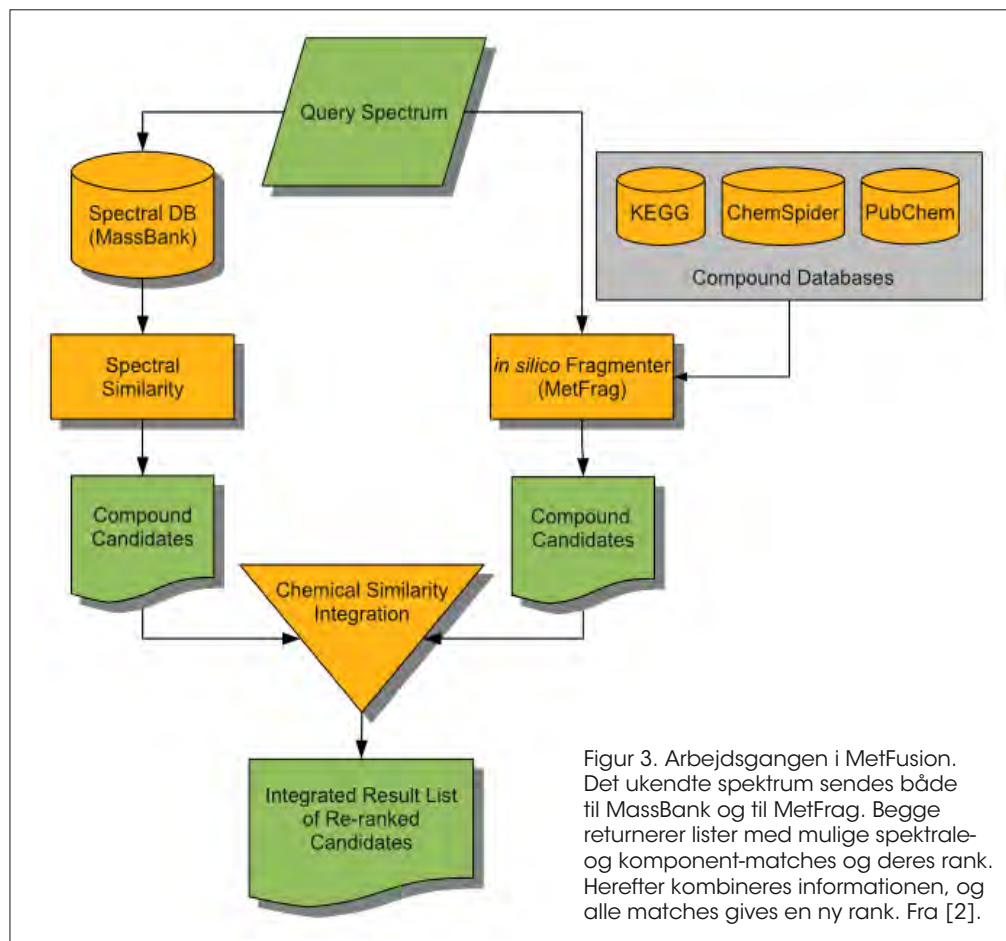
International Symposium on Capillary Chromatography og GC×GC symposium afholdes næste gang i 2016, og altid i smukke Riva del Garda.

International Conference of the Metabolomics Society afholdes i 2015 i San Francisco Bay, Californien.

E-mail:
Nikoline Juul Nielsen:
njn@plen.ku.dk

Referencer

- Sumner, L. *et al.* (2007): Proposed minimum reporting standards for chemical analysis. *Metabolomics*, vol. 3, s. 211-221.
- Gerlich, M; Neumann, S (2013): MetFusion: Integration of compound identification strategies. *Journal of Mass Spectrometry*, vol. 48, s. 291-298.



Figur 3. Arbejdsgangen i MetFusion. Det ukendte spektrum sendes både til MassBank og til MetFrag. Begge returnerer lister med mulige spektrale- og komponent-matches og deres rank. Herefter kombineres informationen, og alle matches gives en ny rank. Fra [2].



Nyt om ...

... Fluer elsker øl

Når fluer sværmer om din øl, er det fordi, de tiltrækkes af stoffer fra den gær, der har produceret øllet. Gærceller producerer foruden alkohol flygtige frugtagtige forbindelser, der tiltrækker insekter.

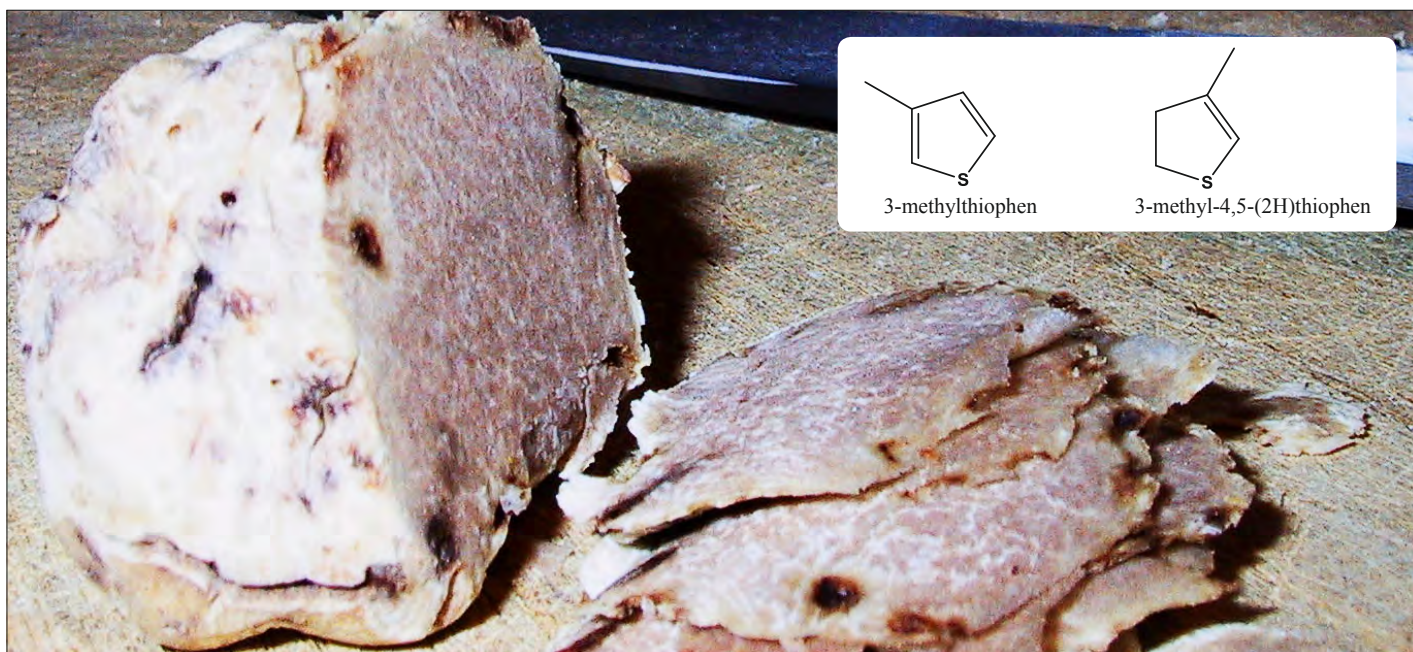
Det er samme forbindelser, der medvirker til at give øl, vin eller brød specielle aromaer og smag. Gær kan ikke selv udforske nye levesteder, da den ikke kan svømme aktivt.

Men når gærcellen klæber til et insekt, får den mulighed for at blive transporteret rundt i miljøet.

Gærs aromasyntese styres af et specielt gen, ATF1. Når dette gen slettes, tiltrækkes fluer ikke mere til gær.

Carsten Christophersen

The fungal aroma gene ATF1 promotes dispersal of yeast cells through insect vectors. J. Christiaens *et al.* *Cell Reports* 2014.



3-methylthiophen

3-methyl-4,5-(2H)thiophen

Nyt om ...

... Trøflers bakterier

Hvide trøfler (*Tuber borchii*) fra Piedmont-regionen i Italien kan koste 5.000 €/kg, og det placerer dem, sammen med kaviar, blandt verdens dyreste føde. Deres duft og aroma skyldes delvist flygtige cykliske svovlforbindelser. Det er dem, som leder hunde og svin til trøflerne.

Thiophener i duften dannes af bakterier ud fra ukendte ikke-flygtige stoffer fra svampen. Trøflen, der selv er en symbiotisk svamp, lever i symbiose med en kompliceret blanding af bakterier, der alle er i stand til at danne thiophener. Sammensætningen af duftsporet varierer for forskellige trøffelarter.

Carsten Christophersen

Bacteria associated with truffle-fruited bodies contribute to truffle aroma. R. Splivallo *et al.* *Environmental Microbiology* 2014, doi:10.1111/1462-2920.12521.

Pipettecenteret

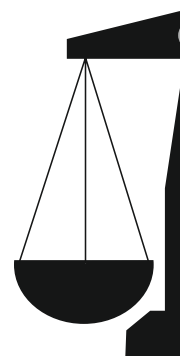
Kalibrering og service af alle fabrikater pipetter.

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



Kvantekemisk mikroskop afslører molekylære mekanismer

Fluorescerende proteiner spiller en central rolle som markører i fluorescensmikroskopi. Vha. kvantekemiske beregninger har vi afdækket de mikroskopiske tuningsmekanismer bag absorptionsegenskaberne af proteinet DsRed. Denne viden kan danne grundlag for en rationel designbaseret strategi for optimering af markøren.

Af Nanna Holmgaard List og Jacob Kongsted, Institut for Fysik, Kemi og Farmaci, Syddansk Universitet

Green Fluorescent Protein (GFP) og relaterede fluorescerende proteiner (FPs) har i bogstaveligste forstand kastet lys over processer i levende celler gennem deres anvendelse som markører i fluorescensmikroskopi [1]. De enestående bidrag fra FPs og avancerede fluorescensteknikker blev endnu engang fastslået ved, at Nobelprisen i Kemi 2014 gik til Betzig, Hell og Moerner for udviklingen af superopløst fluorescensmikroskopi [2]. Specialiserede teknikker og anvendelser afføder et stadigt større behov for videreudvikling af markører, der er skræddersyede til disse specifikke formål. Vores fokus er design af FPs, der kan aktiveres effektivt via to-foton absorption (2PA), hvor den exciterede tilstand nås ved samtidig absorption af to fotoner af den dobbelte bølgelængde, figur 1. Sandsynligheden for 2PA afhænger derfor kvadratisk af lysintensiteten og kombineret med det faktum, at biologisk væv stort set er transparent i det infrarøde område, er resultatet en forbedret opløsning og større penetreringsdybde sammenlignet med en-foton absorption (1PA) [3]. Det rødfluorescerende protein DsRed [4] og varianter heraf har vist sig som potentielle kandidater for videre 2PA-optimering. Relativt til GFP er π -konjugationen af fluoroforen

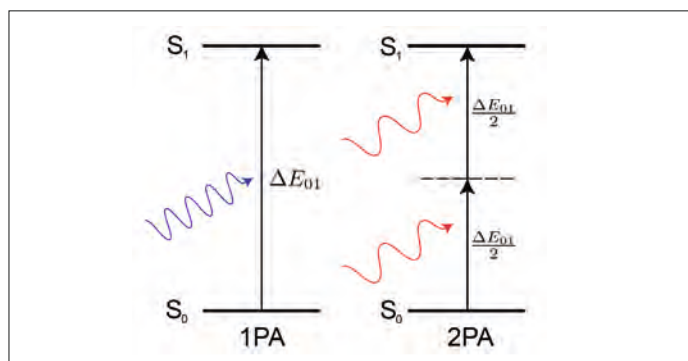
(den del af proteinet, der er ansvarlig for lysabsorption og -emission) i DsRed forlænget med en acylimin-gruppe, figur 2, hvilket giver en rødforskudt absorption og fluorescens [6]. I et designøjemed er det særligt interessant, at 2PA-tværsnittet af S_0 - S_1 -overgangen i den røde fluorofor er stærkt påvirket af det omgivende protein [5]. Et oplagt spørgsmål er derfor: Er det muligt at opnå en samtidig optimering af absorptionsmaksimum (dvs. et rødskifte) og 2PA-tværsnittet ved at introducere modifikationer i proteinet? En mikroskopisk kortlægning af tuningsmekanismerne bag DsRed's absorptionsegenskaber er en forudsætning for at besvare dette spørgsmål og herved bane vejen for optimering baseret på rationelt design.

En direkte måde at opnå viden om de underliggende molekylære mekanismer bag farve- og intensitetstuning er gennem teoretiske beregninger. Herved vil vi samtidigt kunne besvare spørgsmål, der ikke er tilgængelige via eksperimenter. F.eks. kan vi afdække den relative betydning af de indirekte (dvs. strukturelle deformationer af fluoroforen grundet proteinet)

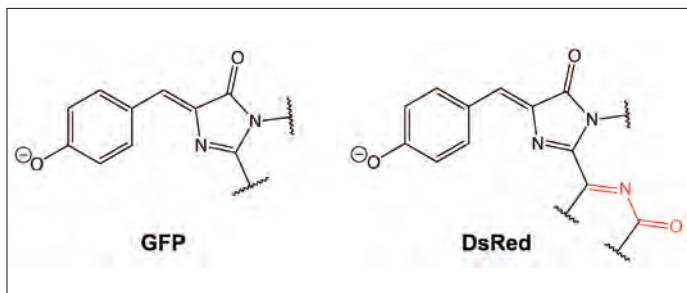
■ To-foton-absorption (2PA)

2PA er en ikke-lineær optisk proces, hvor et molekyle absorberer to fotoner samtidigt.

Fænomenet blev beskrevet teoretisk allerede i 1930'erne af Maria Göppert-Mayer [7], men grundet behovet for en meget intens lyskilde blev det først eftervist eksperimentelt 30 år senere med opfindelsen af laseren [8]. Mens 1PA er bestemt af molekylets lineære polarisation, er evnen til at absorbere to fotoner relateret til den tredjeordens ikke-lineære polarisation. Det betyder, at 2PA følger et andet sæt kvantemekaniske udvalgsregler og derfor ikke i det generelle tilfælde kan forudsiges ud fra molekylets 1PA. For molekyler uden inversionssymmetri, som fluoroforen i DsRed, vil de samme elektroniske overgange dog være tilladte i både 1PA og 2PA omend med forskellige relative intensiteter.



Figur 1. Jablonskidiagrammer af 1PA- og 2PA-processer: I 2PA nås den exciterede tilstand ved absorption af to fotoner med den halve bølgelængde af den tilsvarende 1PA-proces.



Figur 2. Fluoroforerne i GFP og DsRed dannes begge i en auto-katalytisk proces, der kun kræver tilstedeværelse af ilt. Relativt til GFP er fluoroforen i DsRed udvidet med en acylimin-gruppe (vist i rødt), der giver to ekstra dobbeltbindinger og derved en rødforskudt absorption og fluorescens.

og direkte elektrostatiske effekter af DsRed proteinet ved at modellere fluoroforen isoleret i gasfasen (relaxeret såvel som i den geometri, der passer ind i proteinet) samt inde i proteinet. Reaktiviteten af acylimin-gruppen mod nukleofilt angreb har indtil nu forhindret syntese og derfor også gasfasemålinger af DsRed-fluoroforen. Da vekselvirkningen mellem lys og molekyler er kvantemekanisk af natur, kræver en teoretisk beskrivelse af optiske egenskaber brug af kvantekemi. En væsentlig udfordring er dog, at antallet af frihedsgrader i en kvantekemiberegning sætter en skarp begrænsning på størrelsen af systemer, der kan undersøges, hvilket bl.a. gør sig gældende for de FPs.

Kvantekemi på store systemer

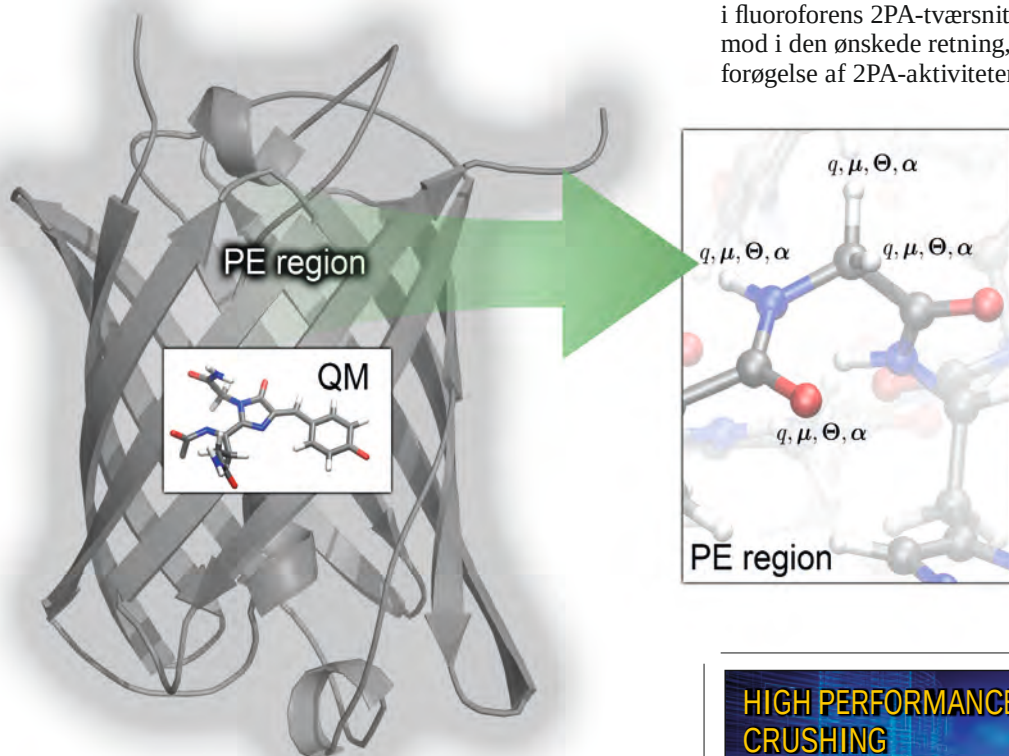
På SDU udvikler vi en effektiv beregningsmetode kaldet "Polarizable Embedding" (PE) [9], der muliggør teoretiske undersøgelser af optiske egenskaber af fluoroforer i deres omgivende miljø, f.eks. et protein. I PE-modellen opdeles systemet i to regioner, der beskrives med forskellig detaljeringsgrad. QM-regionen består af den kemisk interessante del af systemet, her fluoroforen, hvor en kvantekemisk beskrivelse er afgørende, mens proteinet - (kaldet PE-regionen) - repræsenteres med klassisk elektrostatiske, figur 3. For en fysisk korrekt beskrivelse af absorptionsprocessen er det særlig vigtigt, at miljøet kan tilpasse sig ændringen i fluoroforens ladningsfordeling mellem den elektroniske grund- og exciterede tilstand. Udover den permanente ladningsfordeling af det givne miljø, er miljøets lineære polarisering derfor en central komponent i PE-modellen, figur 3.

Inden for denne model kan vi beregne fluoroforens 1PA- og 2PA-egenskaber i dens naturlige proteinomgivelser ved at undersøge dens respons på et påtrykt elektromagnetisk felt – altså analogt til det eksperimentelle setup, men nu formuleret matematisk.

Tuning af absorptionsmaksimum

Beregnete absorptionsmaksima, oscillatorstyrker (proportional til 1PA-tværsnit) og 2PA-tværsnit for S_0-S_1 -overgangen i DsRed-fluoroforen med og uden effekter af proteinomgivelserne er samlet i tabel 1. Specielt bemærkes det, at proteinet giver anledning til et uheldigt blåskifte relativt til gasfasen, dvs. absorptionen skiftes til en kortere bølgelængde. Ændringen i fluoroforens 2PA-tværsnit forårsaget af proteinet er derimod i den ønskede retning, og det resulterer i en ca. seks-fold forøgelse af 2PA-aktiviteten [10]. For at analysere årsagerne

til ændringerne i fluoroforens absorptionsegenskaber er det i første omgang vigtigt at kortlægge det elektrostatiske landskab inde i DsRed-proteinet. Mens det elektrostatiske fingeraftryk af proteinet ikke kan måles direkte, er det lettilgængeligt fra beregningerne. Figur 4 viser det elektrostatiske potential skabt af proteinet på vdW- (van der Waals) overfladen af fluoroforen. Det er evident, at proteinet skaber et elektrisk felt, der tilnærmelsesvist er parallelt med fluoroforens π -konjugerede system. Dette er relevant i forhold til, at den elektroniske overgang



Figur 3. Oversigt over PE-modellen anvendt på DsRed: QM-regionen indeholder fluoroforen, mens selve proteinet udgør PE-regionen. Beskrivelsen af den permanente ladningsfordeling af proteinet består i atomcentrerede elektriske ladninger (q), dipoler (μ) og kvadrupolmomenter (Θ), mens polariseringen af proteinet beskrives til første orden vha. elektroniske dipol-dipolpolarisabiliteter (α). Alle parametrene er bestemt ved kvantekemiske beregninger og er specifikke for hvert enkelt atom i proteinet.

HIGH PERFORMANCE CRUSHING

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

SKANLAB

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

Retsch
Solutions in Milling & Sieving



Nyhed!

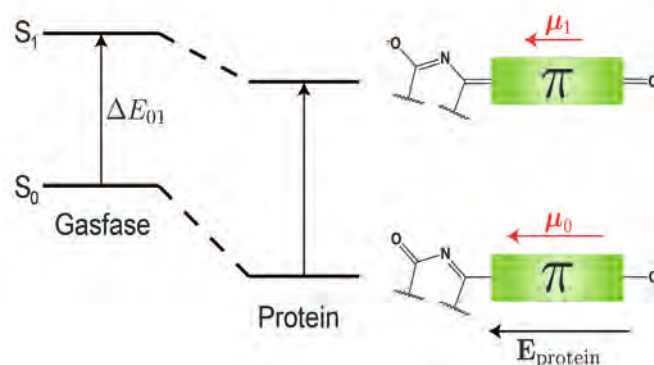
er karakteriseret ved en forskydning af ladningsfordelingen fra phenolat- til acylimin-enden. Det deraf større bidrag fra quinonoid-resonansformen til den exciterede tilstand betyder, at dipolmomentet bliver mindre end i grundtilstanden, figur 5. Det elektriske felt genereret af proteinet vil derfor favorisere den ladningsseparerede grundtilstand over den exciterede tilstand, hvilket forklarer blåskiftet ift. gasfasen. Denne situation er skitseret i figur 5. Endeligt er det værd at nævne, at det protein-skabte elektriske felt henover fluoroforen inde i DsRed er stort (~100 MV/cm) og stærkt heterogent, både hvad angår størrelse og retning. Denne situation afviger væsentlig fra de elektrostatisk omgivelser, der forekommer i opløsningsmiddel.

Proteinets indflydelse på 2PA-aktiviteten

For S_0 - S_1 -overgangen i DsRed har vores beregninger vist, at proteinets betydning for 2PA-aktiviteten kan analyseres inden for en såkaldt to-tilstandsmodel (2SM). Herved kan 2PA-aktiviteten af fluoroforen skrives som

$$\sigma_{2PA} \propto |\mu_{01}|^2 |\Delta\mu_{01}|^2 (1 + 2 \cos^2(\theta_{\Delta\mu_{01}}^{\mu_{01}})).$$

Med udgangspunkt i dette forsimplede udtryk, kan vi identificere et begrænset antal molekylære parametre, der dikterer 2PA-evnen af fluoroforen. Disse inkluderer overgangsdipolmomentet mellem grund- og exciteret tilstand, μ_{01} , forskellen i det permanente dipolmoment af de to tilstande, $\Delta\mu_{01}$, samt den relative orientering af de to vektorer, udtrykt ved vinklen mellem dem, $\theta_{\Delta\mu_{01}}^{\mu_{01}}$. Figur 6 viser, hvordan proteinet modificerer de



Figur 5. Protein-induceret farvetuning af DsRed-fluoroforen: Det permanente dipolmoment af fluoroforens grundtilstand (S_0), dvs. μ_0 , er større end dipolmomentet i den exciterede tilstand (S_1), μ_1 . Da det elektriske felt skabt af proteinet (E_{protein}) er nær-parallelt med $\Delta\mu_{01}$, fås et blåskifte relativt til gasfasen, når fluoroforen befinder sig i sine naturlige proteinomgivelser.

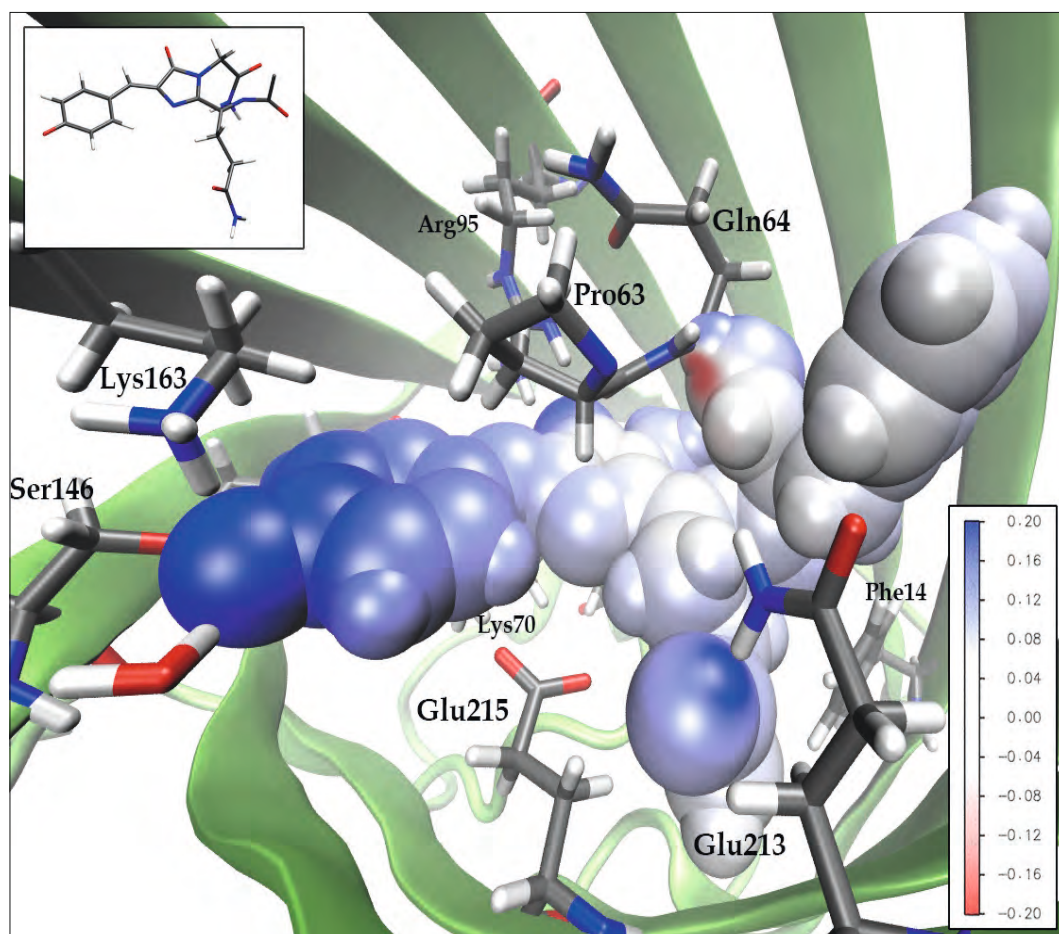
underliggende molekylære parametre, hvor sorte henholdsvis grønne pile indikerer situationen med og uden den elektrostatisk vekselvirkning med proteinet. Denne analyse afslører, at den seks gange forbedrede 2PA-aktivitet i proteinet kan tilskrives kombinationen af en øget forskel i dipolmomentet af de to tilstande og en forbedret positionering af μ_{01} - og $\Delta\mu_{01}$ -vektorerne ved tilstedeværelse af det elektriske felt henover fluoroforen. Endvidere kan vi, fra en opdeling af det elektrostatisk potential i bidrag fra de individuelle aminosyrer, identificere Lys163, figur 4, som hovedansvarlig for det elektriske felts størrelse såvel som retning.

Rationel designstrategi

Farve- og intensitetstuningen i det naturlige DsRed protein består altså i en stabilisering af fluoroforens grundtilstand primært bestemt af den attraktive vekselvirkning mellem Lys163 og phenolat O-atomet. Selvom denne tningsmekanisme er favorabel for 2PA-evnen, forårsager den et uønsket blåskifte i absorptionen. De teoretiske analyser tillader os at identificere et alternativt designprincip, der imødekommer begge krav: Stabilisering af den exciterede tilstand giver en reduktion af dipolmomentet i den exciterede tilstand og deraf øget $\Delta\mu_{01}$, hvilket faciliterer samtidigt rødskifte af absorptionsmaksimum og forbedret 2PA-evne. Vi skal derfor rette fokus mod mutationer, der stabiliserer quinonoid-resonansstrukturen af fluoroforen.

Tak til

Samarbejdspartnere på projektet. Lundbeckfonden for



Figur 4. Det elektrostatisk fingeraftryk af DsRed-protein: Det elektrostatisk potential (i atomare enheder) på vdW-overfladen af fluoroforen. Farveændringen henover overfladen viser, at proteinomgivelserne genererer et stærkt elektrisk felt langs det π -konjugerede system. Bemærk, at potentialet afspejler fluoroforens grundtilstand. Kun de elektroniske frihedsgrader af proteinet kan, under absorptionsprocessen, nå at indstille sig til ændringen i fluoroforens ladningsfordeling. Det elektroniske respons af proteinet er vigtigt for at stabilisere den exciterede tilstand.

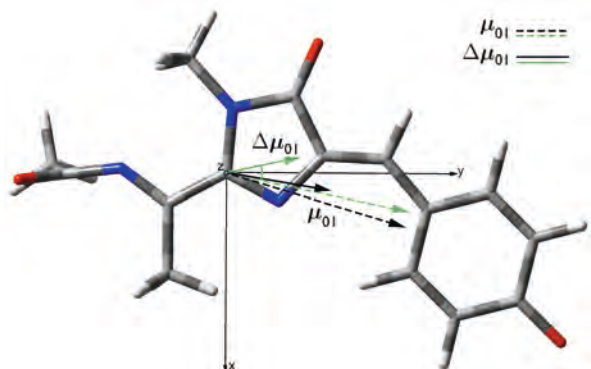
Om hjemmerøgning

Af Jens Folke

Røgning var i gamle dage en konserveringsteknik, der skulle sikre specielt kødprodukter en lang holdbarhed gennem vintren. Processen var typisk saltning – tørring – røgning. Det har i nyere tid fået mange sundhedsapostle til at fraråde eller begrænse mængden af røget mad i kosten specielt pga. salt, som jeg måske kommer tilbage til en anden gang, og skadelige produkter fra røgning, som jeg vil diskutere en smule her.



Det er velkendt blandt røgere, at nåletræ ikke er specielt velegnet til røgning, mens mange slags løvtræ og endda hø (fynsk rygeost) tilfører de røgede produkter kulinariske kvaliteter. Det er ligeledes velkendt blandt trækemikere, at plantelignin bliver stedse mere komplekst, når man går fra nåletræ (hovedsageligt guaiacol-derivater) til løvtræ (syringol-derivater) og til halm og græs, hvis lignin er den mest komplicerede (p-coumaryl-derivater). Ved kemisk nedbrydning af lignin i løvtræ og halm får man således en række komplekse polyphenoler, som vinelskere priser fadlagret rødvin for at indeholde ift. hjerte-kar-sygdomme (vanilliner, veratroler, syringoler osv.). Det er derfor i høj grad et ubesvaret spørgsmål, om man toksikologisk set kan sammenligne røg fra pyrolyse af fedt og proteiner med røg fra pyrolyse af komplekse lignin- og cellulosestrukturer. Jeg argumenterer ikke for, at man skal stikke hovedet ind i et røgkammer – det er alene det kulinariske reaktionsmønster, jeg berører. Svaret er ikke ligetil, idet højtemperaturstegning i sig selv giver anledning til dannelse af PAH'er fra fedt og andre skadelige proteinnedbrydningsprodukter. Når man i et Weber-katalog (udleveret i Silvan) læser om, at gasgrillen giver røgsmag, når fedt og stegesafter drypper ned over varme overflader i grillen, så er der vist ikke tvivl om, at der dannes problematiske reaktionsprodukter. Men ved røgning sænker man netop stegemetemperaturen, og ved koldrøgning foregår de kemiske



Figur 6. Protein-induceret 2PA-intensitetstuning af DsRed-fluoroforen: De elektrostatistiske vekselvirkninger med proteinet (sort) forøger 2PA-evnen af fluoroforen relativt til i gasfasen (grøn). Denne favorable effekt af proteinet skyldes en øget ændring i dipolmomentet af grund- og exciteret tilstand såvel som en reduceret vinkel mellem μ_{01} og $\Delta\mu_{01}$ -vektorerne.

Model		$\Delta E_{01}/\text{eV (nm)}$	f	σ_{2PA}/GM
Omgivelser	Geometri			
vacuum	vacuum	2,4 (517)	1,1	17
vacuum	protein	2,5 (496)	1,2	47
protein	protein	2,8 (443)	1,3	106

Tabel 1. Beregnede 1PA- og 2PA-egenskaber af S_0-S_1 -overgangen i DsRed-fluoroforen. ΔE_{01} : Absorptionsmaksimum, f : oscillatorstyrke og σ_{2PA} : 2PA-tværsnit. Bemærk, at de absolutte energier er overestimeret grundet anvendelsen af time-dependent density functional theory [11], mens ændringerne forårsaget af proteinet er godt beskrevet.

økonomisk støtte og til DeiC (Danish e-Infrastructure Cooperation) for computerressourcer.

E-mail:

Nanna Holmgaard List: nhl@sdu.dk

Jacob Kongsted: kongsted@sdu.dk

Referencer

- Chudakov D.M., Matz M.V., Lukyanov S., Lukyanov K.A., *Physiol. Rev.* 2010, 90, 1103-1163.
- "The Nobel Prize in Chemistry 2014". Nobelprize.org. Nobel Media AB 2014. Web. 18 Oct 2014. www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2014/
- Gaethje H., *Dansk Kemi* 2008, 8, 18-19.; Zipfel W.R., Williams R.M., Webb W.W., *Nat. Biotechnol.* 2003, 21, 1369-1377.; Xu. C., Zipfel W., Shear J.B., Williams, R.M. Webb W.W., *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, 1996, 93, 10763.; Williams R.M., Zipfel W.R., Webb W.W., *Curr. Opin. Chem. Biol.* 2001, 5, 603-608.
- Matz M.V., Fradkov A.F., Labas Y.A., Savitsky A.P., Zaraisky A.G., Markelov M.L., Lukyanov S.A., *Nat. Biotechnol.*, 1999, 17, 969-973.
- Drobizhev M., Makarov N.S., Tillo S.E., Hughes T.E., Rebane A., *Nat. Methods*, 2011, 8, 393-399.
- Gross L.A., Baird G.S., Hoffman R.C., Baldrige K.K., Tsien R.Y., *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, 2000, 97, 11990-11995.
- M. Göppert-Mayer, *Ann. Phys.*, 1931, 401, 273-294.
- W. Kaiser, C.G.B. Garrett, *Phys. Rev. Lett.*, 1961, 7, 229-231.
- Olsen J. M., Aidas K., Kongsted J., *J. Chem. Theory Comput.*, 2010, 6, 3721-3734.
- N.H. List, J.M.H. Olsen, H.J. Aa. Jensen, A.H. Steindal, J. Kongsted, J. *Phys. Chem. Lett.*, 2012, 3, 3513-3521.
- Yanai T, Tew D.P., Handy N.C., *Chem. Phys. Lett.*, 2004, 393, 51-57.; List N.H., Olsen J.M., Rocha-Rinza T., Christiansen O., Kongsted J., *Int. J. Quantum Chem.*, 2012, 112, 789-800.

reaktioner mellem produktet og røggasserne under stuetemperatur. Er der nogen, der kender til undersøgelser af eventuelle skadevirkninger eller sundhedsmæssige fordele ved hvid røg (ikke stegeos) fra grill eller pyrolyseovn brugt som krydderi?

Det er ikke et spørgsmål om det skadelige ved at inhalere røgen. Det er et spørgsmål om at identificere reaktionsprodukterne mellem røgen fra forskelligt løvtræ eller tørrede engplanter og produktet, det være sig fisk, skaldyr, gris, lam, okse, oste osv. Og dernæst lave en toksikologisk vurdering af de frembragte fødevarer.



Beef ribs fra San Antonio, TX.

Her er resultatet af otte timers saltning, to timers udvanding, tørring, fire-seks timers koldrøgning i en Helias pyrolyse smoker, efterfulgt af otte timers sous vide-behandling ved 60°C med en rub i en vakuumpose, frysning indtil senere brug, og derefter 30 min. grillning. Først med direkte grill to min. på hver side, resten med indirekte grill, hvor de pensles med hjemmelavet barbecuesovs, uden at det branker. Ribbenene på billedet er fra et lam fra november 2013, men man kan også bruge svinekamben eller spareribs. Tværreb eller højrebsben fra okse kræver en noget mere drastisk fremgangsmåde for at blive gode.



Efter sous vide, før sidste grillning.

Her kommer opskrifterne

Rub til ribben

50 g moskovit sukker
5 spsk. paprika
Sort peber, mortet
2 spsk. hvidløgpulver
2 spsk. løgpulver
2 spsk. korianderfrø, mortet
1 spsk. cayennepeber
Kødet er allerede saltet, så spar her – det skal i sous viden

Barbecuesovs

5 dl ketchup
½ dl æbleeddike
½ dl Worcestershire-sovs
¼ dl moskovit sukker
2 spsk. rub
Tabascosovs efter smag

Coleslaw

500 g hvidkål, spidskål eller savoykål
2 mellemstore gulerødder, skåret julienne eller revet groft
1 dl hjemmelavet mayonnaise
1 spsk. æbleeddike
1 spsk. rørsukker
friskkværnet peber og salt efter smag

Vend kål og gulerødder med salt og lidt sukker og lad det trække i en halv time. Rør herefter en dressing af mayonnaisen, æbleeddiken og rørsukkeret i serveringsskålen. Hæld derefter kål og gulerødder på et dørslag, skyl det og pres væden ud af grøntsagerne, før det vendes i dressingen lige inden servering.



Færdige lammeribben fra høstlammet med coleslaw og baked beans.

Baked beans

100 g bacon
2 dl tørrede pintobønner
1 stort hakket skalotteløg
1 spsk. moskovit sukker
2 spsk. barbecuesovs
1 spsk. Worcestershire-sovs
1 spsk. æbleeddike
1 middelstærk chili (eller en del af den)
Salt og peber efter smag

Lad bønnerne udbløde natten over, skift vandet og kog dem møre (ca. 40-45 min.) – smid vandet væk. Skær bacon i tern og brun det med det hakkede løg og chili, til de er bløde, smid evt. overskydende fedt væk. Tilsæt bønner og resten af ingredienserne og lad det simre i 10 min. (evt. tilsættes lidt vand eller mere barbecue-marinade efter behov og smag).

Den næste udfordring bliver at lave ribben på oksetværrebet, sådan som jeg fik det i San Antonio for nylig. De fortalte, at kødet var over grillen ved 250°F i 12 timer, men jeg tror ikke på, at det gør det alene. Jeg skal komme tilbage til dette, når jeg har evalueret eksperimenterne.

Kilder

[http://ehs.sph.berkeley.edu/krsmith/publications/HC%20woodsmoke%20report%20Mar%2031%202005\(rev\).pdf](http://ehs.sph.berkeley.edu/krsmith/publications/HC%20woodsmoke%20report%20Mar%2031%202005(rev).pdf)
www.bluesage.ca/are_smoked_foods_harmful.html
www.heliasmoker.com/english/smokers/technology/

Cloud-baseret temperatur- og fugtovervågning

Buhl & Bønsøe præsenterer dataloggeren Saveris 2 fra Testo. Saveris 2 er udviklet til at overvåge temperatur og fugtighed, hvor som helst, når som helst. Sikkerheden er høj samtidig med, at brugeren ikke skal besværes med tidskrævende software eller komplicerede instruktionsmanualer. Hvor det tidligere blot var computeren, som konstant var forbundet til internettet, ser man efterhånden flere og flere hverdagsting såsom telefoner, biler, husholdningsapparater og nu også dataloggere, som via en trådløs forbindelse til internettet kan indsamle og videregive oplysninger. Når hverdagstingene således bliver "intelligente", kan de udveksle information med hinanden over nettet, og det er denne teknologi,

der er omdrejningspunktet i Testos nye dataloggerserie.

Saveris 2 registrerer temperatur og fugt via følere, og sender dem via wi-fi i skyen. Måledataene bliver sikkert opbevaret i skyen, og brugeren har adgang til måledata overalt i verden via en smartphone, pc eller tablet. Dermed behøver man ikke længere fysisk opholde sig på arbejdspladsen for at holde målepunkterne under kontrol. Data kan nu overvåges fra den anden side af jordkloden.

Data fra Saveris 2-loggeren udtrækkes og gemmes trådløst, og kan tilgås ved blot at logge på den sikre placering i skyen. Der anvendes en standard internetbrowser, så ingen speciel software eller konfiguration er nødvendig.



Hvis en grænseværdi bliver overskredet, bliver der sendt en alarm via SMS eller e-mail, og man kan straks tage aktion.

Yderligere information:
Buhl & Bønsøe A/S
Tlf. 45 95 04 10
www.buhl-bonsoe.dk

Problemfri, kontinuert overvågning af vandkvaliteten



Den nye Aquaread AP 7000 måle-sonde til langtids-overvågning af vandkvalitet.

Den er forsynet med et nyudviklet dobbeltskrabersystem til automatisk renholdelse af samtlige elektroder, og kommer med et standard-

sæt af elektroder plus seks yderligere porte, som alle kan benyttes til enhver kombination af Aquaread ISE eller optiske sensorer.

Standardparametre er: Opløst ilt, specifik og absolut ledningsevne, pH, ORP, TDS, modstandsevne, salinitet, SSG, dybde og temperatur.

Herudover kan frit vælges op til seks yderligere sensorer blandt følgende:

Optiske sensorer: Turbiditet, Klorofyl, Blågrøn alger, Rhodamin, Fluorescein og Raffineret olie.

ISE-sensorer: Ammonium og ammoniak, Klorid, Fluorid, Nitrat og Calcium.

Se data i realtid ved kombination med GPS Aquameteret, som også bruges til at kalibrere elektroderne, til at dedikere hver tilvalgt sensor til en udgangsport og til at udføre korttidslogning.

Yderligere information:
Aquasense
Tlf. 42 42 50 80
E-mail: stm@aquasense.dk
www.aquasense.dk

Gasautosampler

Til gasanalyse på GC har Mikrolab Aarhus A/S udviklet denne gasautosampler.

Prøveglassene er typisk evaporeret og prøven tages ganske enkelt ved at stikke en kanylen gennem proppen i låget og prøven suges ind i glasset på grund af undertrykket.

Der er atmosfæretryk i glasset efter fyldning af prøve i glasset.

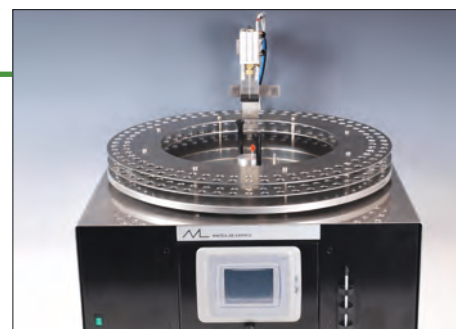
De fyldte prøveglas transporteres til laboratoriet og prøverne sættes i autosampleren. Autosampleren har plads til 120 prøver i to cirkler, hver cirkel med 60 prøver. Det er dog muligt at fremstille karrusellen til autosampler til andre stør-

relser glas og derved kan prøveantallet variere.

Ved prøveinjektion i GC penetreres proppen, og der påføres et justerbart overtryk, typisk 1,5 bar. På et givet tidspunkt sørger et ventilskefte for, at prøven føres ind i injektionsloopet på injektionsventilen. Flowet af prøven sørger det påførte overtryk for, og det sker uden brug af pumper.

Når prøven er i loopet, skifter injektionsventilen og prøve føres med bæregasen ind i GC for analysen.

Autosampleren programmeres nemt på panel på fronten af apparatet.



Apparatet kan modificeres ud fra individuelle krav/ønsker.

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

Leverandørregister

Analyse

A

Analyse- og laboratorieudstyr



AquaSense

Stengårdvej 2
5500 Middelfart
Tlf. 42 42 50 80
info@aquasense.dk
www.aquasense.dk

E

Elektronmikroskoper

DFA A/S/NIKON

Produktionsvej 26
2600 Glostrup
Tlf. 72 48 84 31 - Fax 72 48 84 33
ak@dfa.dk
www.dfa.dk

F

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

Generatørvej 6 B
2730 Herlev
Tlf. 44 50 00 00 - Fax 44 50 00 01
draeger-safety.dk@draeger.com
www.draeger.dk



GasDetect

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

Gasser



AGA A/S

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

L

Laboratoriearmaturer

BROEN LAB DIVISION

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

M

Massespektrometre, 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

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 - Fax
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 CLP faremærkning af
produkter og prøver - med BarSafe™
etiketsystemet

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

M

Miljøbeskyttelse og sikkerhed

Dansk Polyglas A/S

Industrivej 12
5672 Broby
Tlf. 62 64 12 00
www.polyglas.dk
Glasfiberarmerede miljøbokse
til krævende miljøer

P

Patenter



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



LBKPATENT ApS

Gyldenholm Allé 26
2820 Gentofte
Tlf. 30 50 38 78 - Fax
lbk@lbkpatent.dk
www.lbkpatent.dk

Software

A

Arbejdspladsbrugs- anvisninger og etiketter



CHYMEIA ApS

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

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

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**



Analyse Everything

Materials Science

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

Life Science

Structural biology, molecular imaging, metabolomics, proteomics, genomics

Pharmaceuticals

Drug discovery, development, quality control, authenticity testing

Environment

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

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

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

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

Find the solution to your analytical question

info@bruker.com ■ www.bruker.com

Innovation with Integrity



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