

Ráðstefna Efnafræðifélags Íslands

Hótel KEA, Akureyri 13.–14. sept.

Föstudagur 13.09.02:

13:50 Setning; Þóra Ákadóttir, forseti bæjarstjórnar Akureyrar

I. Líftækni í fiskiðnaði

14:00–14:30 Guðmundur G. Haraldsson, Háskóla Íslands, Raunvísindastofnun; „Líftækni tengd fituefnum í sjávarfangi“

14:30–15:00 Jóhannes Gíslason, Primex; „Lífefnaframleiðsla úr rækjuskel“

15:00–15:30 Kaffi og veggspjaldakynningar

15:30–16:00 Jón Bragi Bjarnason, Háskóla Íslands, Raunvísindastofnun; „Líftæknaferðir úr sjávarfangi – frá rannsóknum til markaðar“

16:30–19:00 Skoðunarferð í Háskóla Akureyrar
Rannsóknarstofnun HA og útibú Byggðarannsóknastofnunar Íslands
Auðlindadeild og útibú Rf og Hafrannsóknarstofnunar
Sólborg; fjarkennslubúnaður og bókasafn

Kvöldmatur

Laugardagur 14.09.02:

8:30–9:30 Morgunmatur

II. Málningar- og hreinlætisvörur

09:30–10:00 Jón Bjarnason, Málningu hf; „Vatn í stað leysa – þróun í málningariðnaðinum“

10:00–10:30 Birgir Örn Guðmundsson, Tandri; „Yfirborðsvirk sápuefni og umhverfið“

10:30–10:50 Kaffi

10:50–11:20 Niels Jónsson, Hollustuvernd ríkisins; „Eru málningar- og hreinlætisvörur heilsuspillandi?“

11:20–11:50 Ragnar Jóhannsson, Iðntæknistofnun; „Vistvænn kostur úr kindamör kynlega þykir mér hljóma“

12:00–14:00 Hádegismatur og veggspjaldakynningar

III. Efnafræðikennsla í framhaldsskólum

14:00–14:30 Jóhann Sigurjónsson, MA; „Notkun upplýsingatækni í efnafræðikennslu“

14:30–15:00 Oddný Hafberg, Kvennaskólanum í Reykjavík; „Námskrá framhaldsskóla í raungreinum“

15:00–15:30 Skarphéðinn Óskarsson, MR; „Landskeppni framhaldsskólanema í efnafræði“

15:30–15:45 Kaffi

IV. Pallborðsumræður / Efnafræðikennsla í framhaldsskólum

15:45–16:15: Stuttar (5 mín) framsögur

16:15–17:00: Umræður

17:00 Ráðstefnu slitið

Sigurður Jónsdóttir

Ráðstefna Efnafræðifélags Íslands, Akureyri 13. - 14. 2002

Ágrip fyrirlestra



Efnafræðifélag Íslands
The Icelandic Chemical Society

Efnisyfirlit

I. Líftækni í fiskiðnaði

1. Líftækni tengd fituefnum í sjávarfangi
Guðmundur G. Haraldsson..... 4
2. Lífefnaframleiðsla úr rækjuskel
Jóhannes Gíslason 5
3. Líftækni afurðir úr sjávarfangi, frá rannsóknum til markaðar
Jón Bragi Bjarnason 6

II. Málningar- og hreinlætisvörur 7

4. Vatn í stað leysa - Þróun í málningariðnaðinum -
Jón Bjarnason 8
5. Yfirborðsvirk sápu efni og umhverfið
Birgir Örn Guðmundsson..... 9
6. Eru málningar- og hreinlætisvörur heilsuspillandi?
Niels B. Jónsson 10
7. Vistvænn kostur úr kindamör kynlega þykir mér hljóma
Ragnar Jóhannsson..... 11

III. Efnafræðikennsla í framhaldsskólum

8. Notkun upplýsingatækni í efnafræðikennslu
Jóhann Sigurjónsson..... 13
9. Ný námskrá fyrir framhaldsskóla
Oddný Hafberg..... 14
10. Landskeppni framhaldsskólanema í efnafræði
Skarphéðinn Óskarsson..... 15

I. Líftækni í fiskiðnaði

Líftækni tengd fituefnum í sjávarfangi

Guðmundur G. Haraldsson

Raunvísindastofnun Háskólans, Dunhaga 3, 107 Reykjavík

Ágrip

Á seinustu 15-20 árum hefur líftækni í sívaxandi mæli haldið innreið sína á svið fituefna og orðið að rótgróinni hátækni. Fituefni sjávarfangs eru þar engin undantekning og koma bæði örverur og einangruð ensím þar við sögu. Bakteríum og þörungum er beitt í iðnaði til framleiðslu á verðmætum fituefnum, t.d. n-3 fjölómettuðum fitusýrum og astaxanþíni. Einnig hefur einstökum einangruðum ensímum verið beitt á fituefni í síauknum mæli og koma þar einkum lípasar við sögu. Í þessu erindi verður nær einvörðungu fjallað um notkun lípasa á sviði fituefna sjávarfangs, aðallega í tengslum við hinar verðmætu og eftirsóttu n-3 fjölómettuðu fitusýrur EPA og DHA. Fjallað verður um hvernig útbúa megi ýmis form lípíða, þriglyseríð, eterlípíð og fosfólípíð, með mjög háu hlutfalli EPA og DHA fyrir tilstilli lípasa með ýmsum esterunar- og umesterunarferlum. Þá verður fjallað um notkun lípasa í líf-lífrænum efnasmíðum og lykilhlutverk þeirra í efnasmíðum á ýmsum stöðubundnum lípíðum er byggist á staðvendni lípasa. Þá verður fjallað um um notkun lípasa við einangrun n-3 fjölómettaðra fitusýra úr lýsi og aðgreiningu á EPA og DHA er byggir á fitusýruvendni þeirra. Að lokum verður svo fjallað um notkun lípasa í efnasmíðum hendinna fituefna er byggir á rúm- og handvendni lípasanna.

Lífefnaframléiðsla úr rækjuskel

Dr. Jóhannes Gíslason, framkvæmdastjóri rannsóknna- og þróunarviðs
Primex ehf.

Ágrip

Kítín er fjölsykra, samsett úr β -tengdum N-acetyl glúkósamín einsykrum og er því að ýmsu leyti skyld sellulósa. Líkt og sellúsi gegnir mikilvægu hlutverki í stoðkerfum plantna, þá er kítín mikilvægur þáttur í stoðkerfi margra dýra, einkum þeirra sem hafa um sig ytri stoðgrind, líkt og skordýr og krabbadýr. Kítín er jafnan talið vera næst algengasta fjölliðan, á eftir sellulósa.

Eins og í öðrum krabbadýrum, myndar kítín stoðgrind í ytri skel rækjunnar og gefur skelinni lögun og sveigjanleika. Prótein, kalk og litarefni gegna einnig mikilvægu hlutverki í samsetningu skeljarinnar.

Fjallað verður í grófum dráttum um framleiðslu kítíns og afleiddra efna úr rækjuskelinni og gerð grein fyrir stöðu þessarra efna í viðskiptum og rannsóknum. Drepið verður á sérstökum efna-, eðlis- og líffræðilegum eiginleikum kítín afleiða, og hagnýtingarmöguleikum sem þessir eiginleikar fela í sér.

Líftækniáfurðir úr sjávarfangi, frá rannsóknum til markaðar

Jón Bragi Bjarnason

Raunvísindastofnun Háskóla Íslands, Dunhaga 3, 107 Reykjavík

Ágrip

Starf okkar á sviði líftækni í fiskiðnaði var ýtt úr vör árið 1978 með annsóknnum á meltingarensímum úr þorski og síld. Það er því aldarfjórðungur um næstu áramót síðan þessar rannsóknir hófust. Áhersla okkar hefur verið tvíþætt. Í fyrsta lagi að rannsaka eðli og eiginleika ensímanna, þ.e. grunnrannsóknir á sviði ensímefnafræði próteasa, próteinkljúfandi ensíma, úr kaldsjávarfiskum. Í öðru lagi að rannsaka og þróa aðferðir til að framleiða ensím úr sjávarfangi og til að hagnýta þau í iðnaði.

Þessar nytjarannsóknir í líftækni fiskiðnaðar hófust um miðjan níunda áratuginn með rannsóknum og þróunarvinna á uppþrepu á vinnslu Kríótíns, ensímblöndu úr þorski, eðli ensímblöndunnar, hreinsun einstakra ensíma úr blöndunni, auk rannsókna á hagnýtingu Kríótíns og hreinsuðu ensímanna. Einnig höfum við stundað rannsóknir á eiginleikum euphauylsins, próteasa úr ljósátu frá Suðurskautshafi, og vinnslu þess til klínískra rannsókna til að græða sár.

Afrakstur þessara rannsókna og þróunarvinnu hefur birst í fjölda greina í erlendum lífefnafræðiritum og í tveimur einkaleyfum, þ.e. “Fish serine proteases and their pharmaceutical and cosmetic use” WO 00/78332 A2 og “Method for producing protein hydrolysates using marine proteases” WO 01/28353 A2. Auk þessa hafa verið stofnuð þrjú fyrirtæki, Norður, ehf., Norðurís hf. og Ensímtækni ehf. til að sinna hagnýtingu afurða þessara rannsókna. Í erindinu verður fjallað um rannsóknir, þróun, framleiðslu, markaðsetningu og sölu líftækniáfurða okkar úr sjávarfangi.

II. Málningar- og hreinlætisvörur

Vatn í stað leysa - Þróun í málingariðnaðinum -

Jón Bjarnason
Málning ehf., Dalvegi 18, Kópavogi

Ágrip

Einn mesti áhrifaþáttur í málingariðnaðinum í dag er að gera framleiðsluvörurnar vistvænni. Veigamikill þáttur í þessu sambandi er að leysa vörur af hólmi, sem innihalda lífræna leysa, með vatnspynntum málningartegundum.

Mikilvægir áfangar hafa náðst á undanförunum árum en þróunin heldur áfram og notkun lífrænna leysa í málningariðnaðinum mun halda áfram að dragast saman.

Helstu leysar sem er verið að minnka notkun á eru terpentína, xýlen, nokkrar gerðir af alkóhólum, asetötum og ketónum.

Vatnspynnt emúlsjónmálning er byggð upp á mismunandi bindiefnaflokkum eins og samsvarandi leysiefnþynntar vörur. Má þar t.d. nefna alkýð, akrýl, pólýúretan, epoxý o.fl.

Nýjastar á þessu sviði eru vatnspynntar málningartegundir gerðar úr epoxý- og pólýúretanbindiefnum.

Kröfur notenda og yfirvalda um umhverfisvænni vörur til yfirborðsmeðhöndlunar hvers konar, gera það að verkum að þetta svið verður áfram í brennidepli hjá öllum sem koma að vöruþróun í málningariðnaðinum.

Yfirborðsvirk sápuefni og umhverfið

Birgir Örn Guðmundsson
Tandur hf., Hesthálsi 12, Reykjavík

Ágrip

Yfirborðsvirk sápuefni eru samsett úr vatnssæknum og vatnsfælum einingum. Þau eru flokkuð í anjónir, nonjónir, katjónir og amfótera, allt eftir eðli vatnssækna hlutans. Hlutverk yfirborðsvirkra efna og notkunarvið eru mjög fjölbreytileg. Hin aukna umræða og kröfur varðandi umhverfismál hafa sett sitt mark á þróun í hreinsiefnaiðnaðinum undanfarin ár. Yfirborðsvirk sápuefni eru meginþáttur hreinsiefna og því er ekki að undra þótt umræðan beinist mjög að þeim þætti iðnaðarins. Athyglin hefur m. a. beinst að eftirfarandi þáttum: Uppruna (úr jarðolíu eða úr jurta-/dírafitu), niðurbroti í náttúrunni (biodegradability) og áhrifum yfirborðsvirku efnanna og niðurbrotsefna þeirra á lífríkið. Langstærsti hluti þeirra yfirborðsvirku efna sem í notkun eru uppfylla skilyrði sem sett eru í reglugerðum varðandi hraða á náttúrulegu niðurbroti fyrir tilstilli örvera. Þróun nýrra yfirborðsvirkra sápuefna hefur undanfarin ár mótast mjög af kröfum um umhverfisvernd sem þó verður að haldast í hendur við sambærilegan kostnað og hreinsivirkni eins og er fyrir þau efni sem fyrir eru.

Eru málningar- og hreinlætisvörur heilsuspillandi?

Niels B. Jónsson
Hollustuvernd ríkisins

Ágrip

Vistvænn kostur úr kindamör kynlega þykir mér hljóma

Ragnar Jóhannsson
Iðntæknistofnun

Ágrip

III. Efnafræðikennsla í framhaldsskólum

Notkun upplýsingatækni í efnafræðikennslu

Jóhann Sigurjónsson
Menntaskólanum á Akureyri

Ágrip

INNGANGUR.

Menntaskólinn á Akureyri varð þróunarskóli í upplýsingatækni 1998. Kennarar í íslensku, erlendum tungumálum og samfélagsgreinum byrjuðu strax að nýta sér upplýsingatækni í kennslu, en þróunin varð hægari í raungreinum. Skýringar eru margar. Tungumál og samfélagsgreinar geta nýtt sér hefbundinn hugbúnað eins og ritvinnslu, tölvupóst og hugbúnað til glæru- og vefsíðugerðar, en táknmál raungreinanna gerir notkun hefðbundins hugbúnaðar miklu erfiðari.

Í efnafræði komu smám saman á markað forrit sem fyrst og fremst voru ætluð á einmenningstölvur, en ekki fyrir net. Ég safnaði þessum forritum og haustið 2000, taldi ég mig vera kominn með það gott safn ýmissa forrita að tímabært væri að hefja skipulagðar tilraunir í notkun þeirra með nemendum, auk þess sem ég sá þá möguleika á að kaupa fleiri forrit, fengist styrkur til verkefnisins. Þróunarsjóður framhaldsskóla styrkti verkefnið auk þess sem skólinn sá um að skapa það umhverfi og kaupa nauðsynlegasta tækjabúnað til verkefnisins.

MARKMIÐ.

Markmið verkefnisins var og er „að þróa notkun upplýsingatækni í námi og kennslu í efnafræði og móta heildstætt umhverfi um efnafræðinám, þar sem blandað er saman mismunandi kennslu og námsaðferðum.“

Meginmarkmið verkefnisins eru þó:

- Að kynna nemendum það umhverfi sem líklegt er að þeir muni vinna í þegar þeir hafa lokið námi og fara að vinna á almennum markaði, þ.e. að búa nemendur betur undir nám á háskólastigi og starf í tæknivæddu upplýsingaþjófélagi.
- Að kanna hvort notkun upplýsingatækni bætir árangur nemenda í námi.
- Að kanna hvort notkun upplýsingatækni minnkar eða dreifir vinnuálagi á bæði nemendur og kennara.

Ný námskrá fyrir framhaldsskóla

Oddný Hafberg
Kvennaskólanum í Reykjavík

Ágrip

Vorið 1999 gaf Menntamálaráðuneytið út nýja námskrá fyrir framhaldsskóla og tók hún gildi þann 1. júní sama ár. Í almennum hluta námskrárinnar er m.a. fjallað um hlutverk og markmið framhaldsskóla, uppbyggingu náms og námsleiðir, inntökuskilyrði, skólanámskrá, sjálfsmat skóla, námsmat og próf, réttindi og skyldur nemenda og meðferð persónulegra upplýsinga. Í námskrám einstakra námsgreina eru markmið námsins skilgreind, gefnar ábendingar um nám, kennslu og námsmat og þar eru áfangalýsingar kjarna- og kjörsviðsáfangana.

Þegar uppbygging námsins er skoðuð, skipulag námsbrauta og skipting námsins í kjarna, kjörsvið og val, kemur í ljós að nám nemenda sem útskrifast af sömu braut getur verið nokkuð mismunandi. Valfrelsi nemenda hefur aukist og möguleikar á sérhæfingu einnig. Auknu frelsi fylgir aukin ábyrgð, innan ákveðins ramma velja nemendur nú sjálfir þær greinar innan sinnar brautar sem þeir vilja læra mest í og forvitnilegt er að velta fyrir sér hvaða þættir það eru helst sem hafa áhrif á það val.

Landskeppni framhaldsskólanema í efnafræði

Skarphédinn Óskarsson
Menntaskólanum í Reykjavík

Ágrip

Almenna landskeppnin í efnafræði fyrir framhaldsskólanema var haldinn í fyrsta sinn í nóvember 2001. Skipuleggjendur keppinnar voru Efnafræðifélag Íslands og Félag raungreinakennara. Olympíunefnd Efnafræðifélagsins sá um framkvæmd keppinnar. Markmiðið með keppninni var að vekja og efla áhuga framhaldsskólanema á efnafræði og hvetja þá til að auka þekkingu sína á þessu fræðasviði. Fyrst var efnt til Almennrar landskeppni með 116 þátttakendum frá 11 framhaldsskólum. Af þeim fengu 11 efstu nemendurnir bókaverðlaun. Eftir almennu landskeppnina bauðst 46 efstu nemendum að taka þátt í úrslita- keppninni. Að lokinni úrslitakeppni, sem skiptist í fræðilegan og verklegan hluta, voru valdi 4 nemendur í keppnislið Íslands sem tók þátt í Olympíukeppninni sem fram fór í Groningen í Hollandi í 5.-14.júlí 2002.

Með markmið almennu landskeppninnar í huga vakna ýmsar spurningar sem nausynlegt er að svara..

Hver er ávinningur svona keppni? Náðust sett markmið að einhverju leyti? Hver er staða íslenskra framhaldsskólanema í efnafræði á alþjóða vettfangi? Er hægt að auka menntun þeirra umfram þær kröfur sem settar er í námskrá? Er þörf á breytingum á fjölda kennslustunda í efnafræði við grunn- og framhaldsskóla á Íslandi? Eru kennslubækur á íslensku nógu margar og nógu góðar? Er fjöldi efnafræðikennara nægur? Er fjöldi menntaðra efnafræðinga nægur? Hver er þörf þjóðfélagsins á efnafræðingum? Hvernig er samvinnu kennara skólastiganna þriggja háttað? Hvernig má auka og bæta þessa samvinnu? Í fyrirlestrinum verður þessum spurningum varpað fram og reynt að nálgast svör við nokkrum þeirra eftir bestu getu.

Ágrip veggspjalda



Efnafraeðifélag Íslands
The Icelandic Chemical Society

Efnisyfirlit

1. Landkeppnin í efnafræði og þátttaka Íslands í Alþjóðlegu Ólympíukeppninni í efnafræði Már Björgvinsson og Skarphéðinn Óskarsson	3
2. Sphingólípíð og boðflutningar í hjartavöðvafrumum V.Edda Benediktsdóttir, Anna Margrét Jónsdóttir, Bergþóra Skúladóttir, Jón Ólafur Skarphéðinsson, Sigmundur Guðbjarnason	4
3. Áhrif viðtengdra kítósan fáliða á stöðugleika trypsíns Fannar Jónsson og Hörður Filippusson	5
4. Aminósýruraðir alkalískra fosfatasa og tengsl þeirra við kuldavirka eiginleika Bjarni Ásgeirsson	5
5. Ósetið 1,3-dísilacyclóhexan: <i>Nýsmíði, eiginleikar og orkuyfirborð</i> Pálmar I. Guðnason og Ingvar Árnason	6
6. Trypsín I-K, tjáning, virkjun, hreinsun og greining Guðrún Jónsdóttir og Ágústa Guðmundsdóttir	6
7. Efnasmíði, greining og kristalbygging 2,8,9-tríoxa-3,5,7-trísíla-1-títanaadamantans Ingvar Árnason og Pálmar I. Guðnason	7
8. Efnasmíðar á stöðubundnum eterlípíðum með lípasa Carlos D. Magnússon, Arnar Halldórsson og Guðmundur G. Haraldsson	7
9. Rúmefnafræði 2,5,5-þrísétinna-1,3-díoxan afleiða: <i>Áhrif metýlsetins arylhóps í stöðu 2</i> Baldur Bragi Sigurðsson, Ágúst Kvaran, Jón K.F. Geirsson, Sigríður Jónsdóttir	8
10. Hvarfgangur fyrir basahvataða umröðun bicyclo[3.3.1]nónan-3-óna í fjölsetnar bicyclo[4.4.0]dekan afleiður Jón K. F. Geirsson og Sigríður Jónsdóttir	8
11. Efna- og eðlisfræðilegir eiginleikar kítósanfásýkra Soffía Sveinsdóttir, Ágúst Kvaran, Jóhannes Gíslason, Jón M. Einarsson, Martin G. Peter	9
12. Nýjungar í ljósgleypnigreiningu Victor Huasheng Wang, Ingvar Hlynsson og Ágúst Kvaran	9
13. Ilmoliur úr ætíhvannarfræjum og áhrif þeirra á krabbameinsfrumur í rækt Steinþór Sigurðsson, Helga Ógmundsdóttir, Haraldur Ágúst Sigurðsson og Sigmundur Guðbjarnason	10
14. Fullkomin staðvendni í asylun glyseróls með lípasa Arnar Halldórsson, Carlos D. Magnússon og Guðmundur G. Haraldsson	10
15. Lögum hamarshauss ríbósímsins er háð sýrustigi Snorri Sigurðsson	11
16. Polyol úr sykrum Gunnlaugur Friðbjarnarson og Teitur Gunnarsson	11
17. Sjálfmelta, bygging og stöðugleiki trypsíns I úr Atlantshafsporski (<i>Gadus morhua</i>) Linda Helgadóttir, Sigríður Ólafsdóttir og Jón Bragi Bjarnason	12

Landkeppnin í efnafræði og þátttaka Íslands í Alþjóðlegu Ólympíukeppninni í efnafræði

Már Björgvinsson^{a)} og Skarphéðinn Óskarsson^{b)}

a) Raunvísindastofnun Háskólans, Dunhaga 3, 107 Reykjavík

b) Menntaskólinn í Reykjavík, Lækjargötu, 101 Reykjavík

Ágrip

Skólaárið 2001-2002 fór fram 1. Landskeppnin í efnafræði fyrir nemendur framhaldsskóla. Keppnin skiptist í tvo hluta. Fyrst var Almenn landskeppni á haustmisserinu en síðan Úrslitakeppni á vormisserinu. Almenna Landskeppnin fór fram 6. nóvember 2001 og tóku 116 nemendur þátt í keppninni frá 12 framhaldsskólum. Eftir Almennu landskeppninni bauðst 46. efstu keppendum að taka þátt í Úrslitakeppninni. Úrslitakeppnin skiptist í tvo hluta: Fræðilegan keppni sem gildi 60% og Verklegan keppni sem gildi 40%. Fræðilega keppnin fór fram 9. mars 2002 og tóku 24 keppendur þátt. Frá þessum hópi voru valdir, að teknu tilliti til aldurs, 11 efstu keppendurnir sem síðan þreyttu Verklegu keppnina í Háskóla Íslands 7. apríl. Lokaröð keppenda réðst af samnlögðum árangri í fræðilega og verklega hluta Úrslitakeppninnar. Fjórir efstur nemendurnir voru: 1. Erlendur Jónsson (MK), 2. Kristján Alexandersson (MA), 3. Helga Dögg Flosadóttir (MR) og 4. Gunnar Þorgilsson (MA).

Fjórir keppendur úr Landskeppninni voru valdir í keppnislið Íslands fyrir 34. Alþjóðlegu Ólympíukeppninni í efnafræði í Groningen, Hollandi, dagana 5.-14. júlí. Í liði Íslands voru Erlendur Jónsson (MK), Helga Dögg Flosadóttir (MR), Lýdía Ósk Ómarsdóttir (MR) og Húni Sighvatsson (MH). Fyrir keppnina var liðið í tveggja vikna stífri þjálfun við Háskóla Íslands. Tveir “lærimeistarar”, Már Björgvinsson og Skarphéðinn Óskarsson, fóru með liðinu til Hollands og sáu þeir um að þýða verkefni á íslensku. Ólympíukeppnin skiptist í tvo hluta; verklegan hluta (40%) og fræðilegan hluta (60%) og glímdu 225 keppendur frá 57 löndum við verkefni. Tveir kínverjar voru í fyrsta og öðru sæti keppninnar en indverji í þriðja sæti. Íslensku keppendum tókst ekki að vinna til verðlauna, en þeir Erlendur og Húni fengu heiðursviðurkenningu fyrir að leysa eitt dæmi óaðfínanlega.

Sphingólípíð og boðflutningar í hjartavöðvafrumum

V.Edda Benediktsdóttir, Anna Margrét Jónsdóttir, Bergþóra Skúladóttir, *Jón Ólafur Skarphéðinsson, Sigmundur Guðbjarnason
*Raunvísindastofnun Háskólans og *Lífeðlisfræðistofnun, Læknagarði,
Vatnsmýrarvegi 16, 101 Reykjavík*

Ágrip

Markmið rannsóknarinnar var að kanna hlutverk sphingósíns í boðflutningum og stjórnun á starfsemi hjartans í rottum. Sphingósín er eitt af innanfrumubodæfnum sphingósín boðkerfisins, en áhrif þess eru ekki fullkönnuð í hjartavöðvafrumum. **Aðferðir:** Áhrif sphingósíns á hjartsláttartíðni í lifandi svæfðum rottum og á samdráttartíðni í ræktuðum hjartavöðvafrumum voru mæld. Ennfremur var mældur innanfrumustyrkur cAMP í hjartavöðvafrumum sem örvaðar höfðu verið með isoproterenoli (sem örvar beta-adrenerga viðtaka) eða forskolini (sem örvar adenylcýklasa) og í óörvuðum hjartavöðvafrumum í öllum tilfellum eftir forhitun í næringaræti með sphingósíni eða án **Niðurstöður:** a) Í svæfðu rottunum olli sphingósíngjöf í bláæð talsverðri lækkun á hjartsláttartíðni og var lækkun þessi háð skammtastærð sphingósíns. Tíðnin komst í fyrra horf á innan við klukkustund eftir gjöf. b) Tíðni samdráttu í ræktuðum hjartavöðvafrumunum minnkaði og tíðniaukning eftir örvun með isoproterenóli varð líka minni ef frumurnar voru forhitaðar með sphingósíni samanborið við kontrólsýni. c) Forhitun ræktaðra hjartavöðvafruma með sphingósíni hindraði einnig framleiðslu cAMP í frumunum eftir örvun með isoproterenóli og var hindrunin háð skammtastærð sphingósíns. Grunnstyrkur cAMP í frumunum lækkaði einnig í návist sphingósíns. Örvun á cAMP framleiðslu með forskolini varð ekki fyrir neinum áhrifum frá sphingósíni og má því útiloka að lækkun á cAMP styrk í návist sphingósíns stafi af áhrifum þess á adenylcyclasa. Fosfodíesterasa inhibitor (IBMX) var settur í ræktunarætið í öllum tilraununum, en það kemur í veg fyrir truflanir niðurstaðna vegna breytinga á virkni fosfodíesterasa (sem hefði þýtt breytingar á niðurbroti cAMP). **Ályktun:** Niðurstöður rannsóknarinnar benda til þess að sphingósín taki þátt í stjórnun á starfsemi hjartans með því að minnka hana og draga úr áhrifum örvunar á beta adrenergum viðtökum. Verkun sphingósíns á beta-adrenerga örvun beinist að þáttum sem eru á undan adenylcyclasa á boðleið viðtakanna.

Áhrif viðtengdra kítósan fáliða á stöðugleika trypsíns

Fannar Jónsson og Hörður Filippusson
Raunvísindastofnun Háskólans, Dunhaga 3, 107 Reykjavík

Ágrip

Ensímið trypsín úr nautabrisi var tengt inn á 3 gerðir af kítósan afleiðum með aðstoð vatnsleysinna karbódíímíðefna, þar sem afleiðurnar voru misjafnlega langar kítósan fáliður. Markmiðið var að rannsaka hvort slíkar breytingar myndu hafa áhrif á stöðugleika próteasans við hitun og geymslu. Aukinn stöðugleiki próteina er áhugavert í tengslum við notkun próteina sem lyf, auka geymslupól ensíma og hvötun efnahvarfa við hærri hitastig. Niðurstöðurnar sýndu að trypsín tengt 7-8 eininga kítósan fáliðum gaf mestan stöðugleika. Helmingunartíminn jókst um 59% við 60°C og um 129% við 50°C. Virkjunarorkan jókst einnig um 17,3%.

Amínósýruraðir alkalískra fosfatasa og tengsl þeirra við kuldavirka eiginleika

Bjarni Ásgeirsson
Raunvísindastofnun Háskólans, Dunhaga 3, 107 Reykjavík

Ágrip

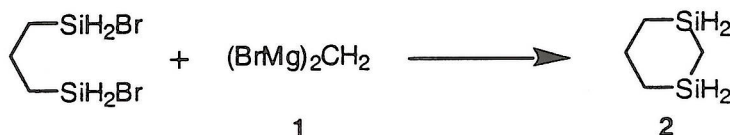
Einstök röð amínósýra í hverju próteini ákvarðar eiginleika þess. Stökkbreytingar á erfðaefninu fela í sér skipti á kímum og geta þannig leitt til skipta á einstökum amínósýrum í próteini falli þær innan arfbera þess. Þannig skapast leið til að aðlaga eiginleika próteina sem best að aðstæðum og þörf einstakra lífvera. Kuldaaðlögun er einmitt ferli sem felur í sér slíkar breytingar í ensímum. Við höfum rannsakað eiginleika og greint amínósýruraðir tveggja kuldavirkra fosfatasa, annars vegar úr þorski en hins vegar úr kaldsjávarörveru. Nýlega hefur tekist að greina þrívíddarbygginga þriggja skyldra fosfatasa, og reynist hún í grundvallaratriðum mjög lík innbyrðis. Markmið rannsókna okkar er að leysa þá gátu hvaða amínósýruskipti gefa kuldavirkum afbrigðum aukinn hvötunarmátt. Til þess nýtum við m.a. spálíkan varðandi þrívíddarbyggingu þeirra. Einstakar amínósýrur veljast inn í eða út úr kuldakærum ensímum (t.d. fleiri Gly, og færri Pro og Cys), auk þess sem jónískum tengjum fækkar (vetnistengi og jónahrif) og vatnsfælnir hópar minnka í innviðum próteinanna. Stöðugleiki kuldavirkra próteina er af þeim sökum minni, en hreyfanleikinn við hvötun að sama skapi meiri. Ljóst er að mjög ítarleg og staðbundin greining er nauðsynlega áður en fullur skilningur mun liggja fyrir.

Ósetið 1,3-dísilacyclóhexan: Nýsmíði, eiginleikar og orkuyfirborð

Pálmar I. Guðnason og Ingvar Árnason
Raunvísindastofnun Háskólans, Dunhaga 3, 107 Reykjavík

Ágrip

Ýmsar setnar afleiður af 1,3-dísilacyclóhexani eru þekktar og hefur smíði þeirra verið lýst. Hins vegar finnast ekki heimildir um smíði á þessu hringkerfi ósetnu. Lýst verður einfaldri aðferð sem leiðir til smíði á 2 með viðunandi heimtum. Lykilatriði þeirrar aðferðar felst í endurbættri smíði á tví-Grignard hvarfefninu 1. Efni 2 hefur verið auðkennt með NMR (^1H , ^{13}C og ^{29}Si), MS og IR greiningum. Orkuyfirborð 2 hefur verið skannað með skammtafræðilegum reikningum með DFT (density functional theory) aðferðinni B3LYP og grunninum STO-3G.



Trypsín I-K, tjáning, virkjun, hreinsun og greining

Guðrún Jónsdóttir og Ágústa Guðmundsdóttir
Raunvísindastofnun Háskólans, Læknagarði, Vatnsmýrarvegi 16, 101 Reykjavík

Ágrip

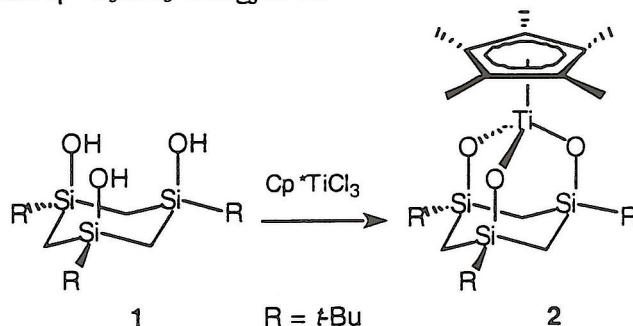
Markmið verkefnisins var að tjá trypsín I-K (K=klónað) úr þorski og staðfesta að það væri eins og trypsín I-N (N=náttúrulegt). Forveraform trypsíns I-K var framleitt í nýju E.coli His-Patch ThioFusion tjáningarkerfi. Það býður upp á hreinsun ensímsins á málmbindisúlu og greiningu með mótefnum. pThioHis tjáningarvektorinn er þannig að á þeim enda, sem næstur er 5'-enda trypsín I-K gensins hefur verið komið fyrir HP-thioredoxin genabúti. Thio hluti tjáðu afurðarinnar eykur leysni trypsíns I-K auk þess sem hann binst ProBond súluefni. Einnig er HP-thioredoxin hlutinn mótefnavaki. Við tjáninguna er framleitt samrunaprótein ThioHis-trypsín I-K, sem er einangrað á ProBond súlu. Því næst er virki hluti trypsíns I-K klipptur frá með örlitlu magni af náttúrulegu þorskatrypsíni. Virkjaða ensímið er hreinsað á p-amínóbenzamidín súlu, sem er sértæk fyrir trypsín. Virknimælingar trypsíns I-K gagnvart tilbúnu trypsín hvarfefnunum Ala-Ala-Pro-Arg-pNA og Gly-Pro-Arg-pNA sýna að virkjun forveraformsins lýtur allt öðrum hraðafræðilegum lögmálum en rof tilbúinna hvarfefna með trypsíni I-K og I-N. Virkjunarskrefið er mjög vandasamt og krefst mikillar nákvæmni vegna viðkvæmni ensímsins fyrir óvirkjun með hita og sjálfmeltu. Yfirgnæfandi líkur eru á að trypsín I-K og I-N séu eitt og sama ensímið.

Efnasmíði, greining og kristalbygging 2,8,9-tríoxa-3,5,7-trísíla-1-títanaadamantans

Ingvar Árnason og Pálmar I. Guðnason
Raunvísindastofnun Háskólans, Dunhaga 3, 107 Reykjavík

Ágrip

Títilefnið 2 hefur verið smíðað með því að hvarfa saman $[\text{Ti}(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)\text{Cl}_3]$ og *cis-cis*-(*t*-BuSi(OH)–CH₂)₃ í hexani í viðurvist Et₃N sem basa. Ljósult myndefnið var auðkennt með NMR og MS greiningum auk þess sem kristalbygging þess var ákvörðuð. Í ósamhverfri einingarsellu þess (triclinic kristalkerfi, rúmgrúpa P1, Z = 4) eru tvær sameindir sem hafa óháða legu innan kristalsins. Þær hafa auk þess verulega mismunandi tengihorn methyl hópa við Cp* fimmhringinn. Í annarri sameindinni eru þessi horn á bilinu 123° til 129° en sambærileg horn í hinni sameindinni eru frá 101° til 153° auk þess sem þau eru óreglulega dreifð innan kristalsins. Skammtafræðilegir útreikningar gefa til kynna að í frjálsri sameind séu þessi horn á bilinu 124° til 127°. TiO₃Si₃C₃ kjarninn í adamantanolíku búi efnis 2 hefur nær því C_{3v} samhverfu. Uppröðun sameindanna í kristallnum er einkennandi fyrir hliðraða “face-to-face π–π stacking” arómatísku η⁵-C₅Me₅ hringjanna.



Efnasmíðar á stöðubundnum eterlípiðum með lípasa

Carlos D. Magnússon, Arnar Halldórsson og Guðmundur G. Haraldsson
Raunvísindastofnun Háskólans, Dunhaga 3, 107 Reykjavík

Ágrip

Stöðubundin eterlípið kunna að hafa þýðingu sem fæðu- og heilsubótarefni. Tólf staðhverfuhrein stöðubundin eterlípið með hreinni miðlungslangri mettaðri fitusýru í endastöðu og hreinni EPA eða DHA fitusýru í miðstöðu voru smíðuð með því að tvíanna saman aðferðum hefðbundinna lífrænna efnasmíða og ensímferlum. Kyrrsettur *Candida antarctica* lípasi reyndist hafa fullkomna staðvendni gagnvart endastöðu 1-O-alkylglyseróla (hexadekyl og oktadekyl) þegar vinyl esterar voru notaðir sem asyl gjafar við 0–4 °C.

Rúmeftnafræði 2,5,5-þrísetinna-1,3-díoxan afleiða: *Áhrif metýlsetins arýlhóps í stöðu 2*

Baldur Bragi Sigurðsson, Ágúst Kvaran, Jón K.F. Geirsson, Sigríður Jónsdóttir
Raunvísindastofnun Háskólans, Dunhaga 3, 107 Reykjavík

Ágrip

Undanfarin misseri hafa á Raunvísindastofnun Háskólans verið smíðaðar 2,5,5-þrísetnar-1,3-díoxan afleiður, með það að markmiði að rannsaka stellingar þeirra í lausn. Sá flokkur efna sem rætt verður um hér er 2-arýl-5-metýl-5-fenýl-1,3-díoxan með arýl hópin ymist ein-, tví-, eða þrísetinn af metýlhóp.

¹H NMR róf af efnunum tekin í benseni-d₆, hafa verið hermd með tölvuhugbúnaði, sem sýnir að sameindirnar eru á stólformi. Þær óvæntu niðurstöður fengust hinsvegar að ¹H NMR róf í klóróformi-d sýndu tvær stellingar: Stólform og bátsform. Framkvæmdir voru líkanreikningar til að meta orkumun stellinganna og virkjunarorku við breytinguna úr stólformi yfir í bátsform. Kæliróf af einu efninu styðja þessa niðurstöðu.

Hvarfgangur fyrir basahvataða umröðun bicyclo[3.3.1]nónan-3-óna í fjölsetnar bicyclo[4.4.0]dekan afleiður

Jón K. F. Geirsson og Sigríður Jónsdóttir
Raunvísindastofnun Háskólans, Dunhaga 3, 107 Reykjavík

Ágrip

Meðalflókin lífræn efnasambönd, afleiður bicyclo[3.3.1]nónan-3-óna, hafa sýnt umtalsverða virkni gagnvart krabbameinsfrumum. Þessi efni hafa tvo samþættaða sex-hringi og hugsanlegt þótti að auka mætti líffræðilega virkni efnaflokksins með því að stækka annan sex-hringinn í átt-hring. Þannig fengist hringkerfi taxana, en afleiður þeirra eru meðal krabbameinsvirkustu efna.

Umrædd hringstækkun hefur enn ekki tekist, en við tilraunir myndast óvænt nýtt myndefni í góðum heimtum. Myndbygging þessa nýja efnis var ákvörðuð með aðstoð umfangsmikilla NMR greininga, og í framhaldi af því var sett fram hugmynd að hvarfgangi fyrir myndun efnisins við þau hvarfskilyrði sem notuð voru.

Efnasambandið var einnig sent í kristalgreiningu og þegar þær niðurstöður lágu fyrir var ljóst að kristalgreiningunni og NMR greiningunni bar vel saman nema í einu atriði sem varðar stefnu eins vetnisatóms í rúminu. Þetta litla (?) atriði sýndi hins vegar ótvírætt að sú tilgáta að hvarfgangi sem áður hafði verið sett fram, gat ekki staðist.

Á ráðstefnunni verður sagt frá nýrri hugmynd að hvarfgangi og greint frá tilraunum sem renna stöðum undir þá hugmynd.

Efna- og eðlisfræðilegir eiginleikar kítósanfásykra

Soffía Sveinsdóttir, Ágúst Kvaran, Jóhannes Gíslason, Jón M. Einarsson, Martin G. Peter

Raunvísindastofnun HÍ, Primex ehf. (Háskólinn í Potsdam)

Ágrip

Í þessu mastersverkefni er markmiðið að greina samsetningu og byggingu kítósanfásykra í blöndu sem framleidd er af Primex ehf. Notuð er greiningartækni á borð við NMR, FPLC, HPLC, GPC og MALDI-TOF massagreiningu. Verkefnið er unnið að frumkvæði Primex ehf og í samstarfi við Dr. Martin Peter, prófessor við Háskólann í Potsdam, Þýskalandi. Fjölsykran kítósan inniheldur einsykrurnar N-acetyl glúkósamín (A) og glúkósamín (D) og ráðast efna- og eðliseiginleikar mismunandi kítósanefna af samsetningu þessara einsykra í efninu. Með NMR mælingum er ætlunin að finna innbyrðis afstöðu A og D einsykra innan smæstu kítósanfásykranna. Með FPLC, HPLC og GPC verður samsetningfásykrublöndunnar greind með tilliti til hleðslu og stærðardreifingarfásykrusameindanna í blöndunni. Niðurstöður þessara greininga verða síðan staðfestar með MALDI-TOF raðgreiningu.

Nýjungar í ljósgleypnigreiningu

Victor Huasheng Wang, Ingvar Hlynsson og Ágúst Kvaran
Raunvísindastofnun Háskólans, Dunhaga 3, 107 Reykjavík

Ágrip

Hefðbundin ljósgleypni er ein helsta greiniaðferð í efnagreiningum. Styrkur ljósgleypni nýtist í magnbundinni greiningu og munstur litrófa nýtist í þáttbundinni greiningu sem og við ákvarðanir á sameindalögun. Slíkar gleypnimælingar byggja á einnar ljóseinda ísogi sameinda. Með notkun aflmikilla LASER geisla gefst færi á samtíma ísogi fleirri en einnar ljóseindar per sameind; þ.e. “fjölljóseindagleypni”. Greint verður frá eiginleikum, kostum og göllum fjölljóseindagleypni í efnagreiningu og samanburður við hefðbundna gleypni framkvæmdur. Dæmi verða sýnd¹⁻⁴.

Heimildir:

- 1 Á. Kvaran and H. Wang, Molecular Physics; to be published, (2002).
- 2 Á. Kvaran, H. Wang, and B. G. Waage, Can. J. Physics 79, 197-210 (2001).
- 3 H. Wang and Á. Kvaran, J. of Molec. Structure 563-564, 235-239 (2001).
- 4 I. Hlynsson, research project, University of Iceland, 2002.

Ilmolíur úr ætíhvannarfræjum og áhrif þeirra á krabbameinsfrumur í rækt

Steinþór Sigurðsson, Helga Ögmundsdóttir*, Haraldur Ágúst Sigurðsson og Sigmundur Guðbjarnason
*Raunvísindastofnun HÍ og *Rannsóknastofa Krabbameinsfélags Íslands*

Ágrip

Ilmolíur voru unnar úr fræjum íslenskrar ætíhvannar með gufueimingu, og samsetning þeirra var skoðuð með gasskilju og massagreini. Í ljós kom að um er að ræða a.m.k. tvær gerólíkar ilmgerðir (chemotypes). Ilmgerð A inniheldur 50-70% β -fellandren, eins og almennt gerist um ætíhvannarfræ, en ilmgerð B er gersneydd β -fellandren. Mun meira er af ilmólíum í ilmgerð A. Samsetning enskrar ætíhvannarfræjailmólíu á markaði var skoðuð, og svipaði henni frekar til ilmgerðar A. Áhrif olíanna á krabbameinsfrumur í rækt voru mæld með því að mæla efnaskiptavirkni ræktanna eftir að þær höfðu vaxið með sýnunum í sólarhring. Könnuð voru áhrif íslensku olíanna á þrjár gerðir krabbameinsfruma úr mönnum: briskrabbameinsfrumurnar (PANC), brjóstakrabbameinsfrumurnar (T47D) og ristilkrabbameinsfrumurnar (WiDr). Áhrif ensku olíunnar voru könnuð á briskrabbameinsfrumur. Íslensku olíurnar reyndust hindra efnaskipti í öllum frumulínum, en mismikið eftir ilmgerð og frumutegundum. Helmingsvirkni, ED₅₀, þ.e. það magn sýnis sem þarf til þess að hindra efnaskipti um helming, ilmgerðar B á briskrabbameinsfrumur var 38 $\mu\text{g/mL}$, á brjóstakrabbameinsfrumur 56 $\mu\text{g/mL}$, en 233 $\mu\text{g/mL}$ á ristilkrabbameinsfrumur. ED₅₀ fyrir ilmgerð A á frumulínum í sömu röð var 197 $\mu\text{g/mL}$, 185 $\mu\text{g/mL}$ og 293 $\mu\text{g/mL}$. Enska ilmólían hafði engin áhrif á briskrabbameinsfrumur í styrknum 500 $\mu\text{g/mL}$. Samanburður á virkni ólíkra olía útilokar öll helstu ilmefnin sem “virka þáttinn”.

Fullkomin staðvendni í asylun glyseróls með lípasa

Arnar Halldórsson, Carlos D. Magnússon og Guðmundur G. Haraldsson
Raunvísindastofnun Háskólans, Dunhaga 3, 107 Reykjavík

Ágrip

Stöðubundin þríglyseríð hafa nýlega vakið athygli vísindamanna sem vænleg næringar- og fæðubótarefni. Sex stöðubundin þríglyseríð með hreinni miðlungslangri mettaðri fitusýru í endastöðum og hreinni EPA eða DHA fitusýru í miðstöðu hafa verið smíðuð sem hreinar staðhverfur með því að tvinna saman aðferðum hefðbundinna lífrænna efnasmíða og ensímferlum. Kyrrsettur *Candida antarctica* lípasi reyndist sýna fullkomna staðvendni gagnvart endastöðum glyseróls við 0-4 °C þegar vinyl esterum var beitt sem asyl miðlum.

Lögun hamarshauss ríbósímsins er háð sýrustigi

Snorri Sigurðsson

Raunvísindastofnun Háskólans, Dunhaga 3, 107 Reykjavík

Ágrip

Hamarshaus ríbósímið er RNA sameind sem hvatar rof á annarri RNA sameind. Við höfum uppgötvað tvo staði á ríbósíminu sjálfu þar sem RNA sameindin rofnar í návist tvígilda sink málmjóna, við fosföt 5'-megin við A9 og U4. Lógaritmi hvarfhraðans við A9 hvarfstöðina sem fall af sýrustigi sýnir beina línu upp að pH 8.3, sem er í samræmi við hvarfgang þar sink hýdroxíð tekur prótónu frá G8 2'-hýdroxýl hópnum. Samband hvarfhraða og sýrustigs fyrir U4 hvarfstöðina er mjög ólíkt A9 hvarfstöðinni og leiðir líkum að breytingu á lögun RNA sameindarinnar fyrir ofan pH 8.0. Ólíkt virkni ýmissa tvígilda málmjóna á A9 hvarfstöðina, þá var sink eina málmjónin sem hvatað gat hvarfið við U4 hvarfstöðina. Þetta er fyrsta dæmi um RNA rof, hvatað af tvígildum málmjónum sem á sér einungis stað í návist einnar málmjónar.

Polyol úr sykrum

Gunnlaugur Friðbjarnarson og Teitur Gunnarsson

VGK hf., verkfræðistofa

Ágrip

VGK hf, Verkfræðistofa er fjölfaglegt tækni- og þjónustufyrirtæki með sérfræðipækkingu á sviði jarðvarma, orkutækni, lagna- og burðarþoslhönnunar, umhverfis-, efna- og framleiðslutækni. Starfsmenn og sérfræðingar fyrirtækisins hafa m.a. komið að verkefnum eins og

- Hönnun orkuvera og jarðvarmalausna
- Feril- og útfærslulausnum á sviði kítín/kítósanframleiðslu
- Tilraunaverkefnum á framleiðslu gelatíns úr fiskroði
- Sérhæfðum launsnum á úrgangsnýtingu í fiskiðnaði
- Hönnun og smíði á tækjum og búnaði til fiskmöls og lýsisframleiðslu

Auk þess er fyrirtækið þátttakandi í fjölþjóðlegu samstarfi við eitt stærsta líftækni- og verkfræðistofna sem íslendingar hafa átt aðild að en það er þróun á tækni til þess að umbreyta sykrum í fjölgild alkóhól. Samhliða því höfum við haft umsjón með rekstri tilraunaverksmiðju í Suður Afríku og m.a. haft samstarf við Háskóla Íslands og fleiri vísindastofnarnir í því samhengi.

Sjálfmelta, bygging og stöðugleiki trypsíns I úr Atlantshafsporski (*Gadus morhua*)

Linda Helgadóttir, Sigríður Ólafsdóttir og Jón Bragi Bjarnason
Lífefnafræðistofu, Raunvísindastofnun Háskólans, Dunhaga 3, 107 Reykjavík

Ágrip

Sjö afbrigði trypsíns, nefnd trypsín I-VII, hafa verið einangruð úr skúflöngum Atlantshafsporsksins (*Gadus morhua*) á p-aminóbenzamidín sérvirkri próteinskilju og Mono-Q jónaskiptaskilju. Mest er af trypsíni I og var það rannakað sérstaklega.

Sjálfmelta trypsíns I var skoðuð með virknimælingum, SDS-rafdrætti og prótein- og peptíðþáttun á FPLC Mono-Q skilju og HPLC vatnsfælinni skilju. Til að greina fyrstu rofstaði var peptíðbútum safnað til aminóendaraðgreininga. Niðurstöður úr þessum greiningum sýndu að fyrstu rofstaðir eru við K107 og K154 og virðist ensímið sjálfmeltast í lausn en einnig meðan það er bundið Mono-Q jónaskiptasúlunni. Þegar um 50% af aminósýruröð ensímsins hafa verið greind benda niðurstöður til að trypsín I sé sama afbrigðið og cDNA klón úr Atlantshafsporski, sem einnig er nefnt trypsín I (Gudmundsdóttir et al. 1993 *European Journal of Biochemistry* 217: 1091-1097).

Skoðuð voru áhrif hitastigs á stöðugleika trypsíns I með og án CaCl_2 . Varmastöðugleiki TLCK hindraðs trypsíns I var metinn með mælingum á flúrljómun sem fall af hitastigi, en með slíkri aðferð er hægt að meta varmastöðugleika ensímsins án truflanna frá sjálfmeltuþættinum. Til samanburðar voru samskonar mælingar gerðar á óhindruðu trypsíni. T_m gildið fyrir TLCK hindrað trypsín I var 58°C , trypsín I $53,5^\circ\text{C}$ og nautatrypsín 58°C .