

Efnafræði og orkufrekur iðnaður

Fjórða ráðstefna Efnafræðifélags Íslands
Hótel Loftleiðum 17. nóvember 2007

Dagskrá:

9:30 Mæting, ráðstefnugögn afhent

10:00 Setning ráðstefnunar, Sigurður V. Smárason formaður Efnis

10:10 Jarðvarmi, umsjón: Már Másson

Lárus Elíasson, Enex: Útrás í nýtingu jarðvarma

Teitur Gunnarsson, VGK-Hönnun: Hreinsun útblásturs frá jarðvarmavirkjunum

Þráinn Friðriksson, ISOR: Jarðefnafræði og jarðhitarannsóknir

12:00 Hádegismatur á Hótel Loftleiðum

13:00 Stóriðja, umsjón: Soffía Sveinsdóttir

Gunnar Ari Guðmundsson/Fannar Jónsson, Alcan: Álfframleiðsla-rafgreining

Þorsteinn Hannesson, Íslenska járnblendifélaginu:

Járnblendifélagið fetar inn á nýjar brautir

Guðmundur Gunnarsson, Nýsköpunarmiðstöð Íslands:

Kísilframleiðsla, raunhæfur kostur á Íslandi?

15:00 Kaffihlé og veggspjaldakynningar

16:00 Umhverfismál og nýjungar, umsjón: Guðbjörg H. Óskarsdóttir

Þór Tómasson, Umhverfisstofnun: Efnavöktun í umhverfi iðjuvera

Magnús Þór Ásgeirsson, Atvinnuþróunarfélag Eyjafjarðar:

Aflþynnur, hvað er það?

Oddur Ingólfsson, CRI: Koldíoxíð sem eldsneyti

Sigþór Pétursson, Háskólanum Akureyri:

Spörun jarðefnaeldsneytis, raunhæfar lausnir

18:30 Fordrykkur og veggspjaldakynningar framhald

19:30 Kvöldverður, þriggja rétta máltíð, veislustjóri: Oddur Ingólfsson



Eftirtaldir aðilar styrktu ráðstefnuna



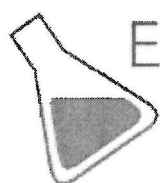
VGK  **HÖNNUN**



Íslenska járnblendifélagið ehf.

Ráðstefna Efnafraeðifélags Íslands, Hótel Loftleiðum, Reykjavík,
17. nóvember 2007.

Ágrip erinda



Efnafraeðifélag Íslands
The Icelandic Chemical Society

Efnisyfirlit

Jarðvarmi.

1. Útrás í nýtingu jarðvarma.
Lárus Elíasson.
2. Hreinsun brennisteins frá jarðgufuvirkjunum.
Teitur Gunnarsson, Gunnlaugur Friðbjarnarson og Ásgeir Ívarsson
3. Jarðefnafræði og jarðhitarannsóknir
Þráinn Friðriksson

Stóriðja.

4. Álframleiðsla – Rafgreining
Gunnar Ari Guðmundsson og Fannar Jónsson
5. Járblendifélagið fetar inn á nýjar brautir
Þorsteinn Hannesson
6. Kísilframleiðsla, raunhæfur kostur á Íslandi
Guðmundur Gunnarsson

Umhverfismál og nýjungar.

7. Efnavöktun í umhverfi iðjuvera
Þór Tómasson
8. Aflþynnur, hvað er það?
Magnús Þór Ásgeirsson
9. Koldíoxíð sem eldsneyti
Oddur Ingólfsson
10. Spörun jarðefnaeldneytis, raunhæfar lausnir.
Sigþór Pétursson

Útrás í nýtingu jarðavarma.

Lárus Elíasson.

CEO – Enex.

Ágrip

Við útrás og útflutning á þekkingu koma mörg fagsvið að málinu, Í erindinu er komið að þætti efnafræði, efnaverkræði og jarðefnafræði sem hlutdeild Íslensku þekkingunni sem byggir þann styrk og á sérstöðu sem útrásarfyrirtækin byggja á. Bent er þá þætti eins og; tæringu, útfellingar, yfir krítískt ástand, efnafræði vinnuhringja, efnahitamælar efna og gas analýsa til að finna jarðhitasvæði og krosstengsl í aðra endurnýjanlega orkugjafa s.s. við eldsneytisframleiðslu.

HREINSUN BRENNISTEINS FRÁ JARÐGUFUVIRKJUNUM

Teitur Gunnarsson, teitur@vgkhonnun.is, Gunnlaugur Friðbjarnarson, gunnlaugurf@vgkhonnun.is og Ásgeir Ívarsson, asgeir@vgkhonnun.is
VGK-Hönnun hf., Grensásvegi 1, 108 Reykjavík, Ísland

Samantekt

Óþéttanlegt gas fylgir jarðhitagufu og er á bilinu 0,5-2% af massa gufunnar hér á landi. Helstu gastegundirnar eru CO₂, H₂S, H₂ og N₂. Víða um heim er gerð krafa um hreinsun H₂S áður en gasið fer til lofts vegna lyktarmengunar. Ekki hefur enn komið til þess hér að landi, en vegna vaxandi lyktar á höfuðborgarsvæðinu er slíkt í undirbúningi. Brennistein má vinna úr gasinu með oxunartölurnar -2, 0, +4 eða +6. Margir ferlar hafa verið þróaðir sem byggja á oxun og framleiðslu á hreinum brennisteini eða brennisteinssýru. Í öllum þessum tilvikum eru afurðirnar verðlitlar og framleiðsla þeirra kostnaðarsöm. Settar eru fram hugmyndir sem byggja á ísogi H₂S í vatn og niðurrennsli þess í jarðlög. Rök má færa fyrir því að þetta sé sömu afdrif H₂S og það hefði fengið ef ekki hefði verið virkjað. Fyrir rannsóknarverkefni um bindingu koldíoxíðs í bergi er gerð krafa um hreint CO₂. Sú krafa um aðskilnað H₂S og CO₂ flækir málið tæknilega.

Jarðefnafræði og jarðhitarannsóknir

Þráinn Friðriksson,

Íslenskum orkurannsóknum

Ágrip

Jarðefnafræði er ein af undirgreinum jarðvísinda og nýtir hún aðferðir efnafræði við rannsóknir á jarðfræðilegum viðfangsefnum. Jarðefnafræðin er ein af meginstoðum jarðhitarannsókna, jafnt við jarðhitaleit sem vinnslueftirlit eftir að nýting hefst. Í erindinu verður gerð tilraun til að skilgreina jarðhitakerfi út frá sjónarhóli jarðefnafræði og tæpt á nokkrum viðfangsefnum jarðefnafræðinnar við jarðhitarannsóknir.

Jarðhitakerfi er skrokkur (body) í jarðskorpunni sem samanstendur af bergi, vatni og gasi, sem er í hitaástandi sem er hærra en gerist á sama dýpi í skorpunni í kring. Efnahvörf milli vatns, gass og bergs í jarðhitakerfum leysa upp frumsteindir bergsins og mynda nýjar og kallast þetta ferli ummyndun. Hlutjafnvægi milli ummyndunarsteinda og jarðhitavökvans stjórnar virkni sumra þátta (kompónenta) í kerfinu (og þar með styrk þeirra í vökvunum). Þessir þættir eru kallaðir hvarfgjarnir þættir og dæmi um þetta eru SiO_2 , Na, K, Ca, Mg, Fe, CO_2 , H_2S o.s.frv. Íhaldssamir þættir, eins og t.d. Cl, Ar og I, stjórnast ekki af hlutjafnvægi við ummyndunarsteindir heldur ræðst styrkur þeirra af upphaflegum styrk í vatninu og hversu mikið af þeim kann að leysast úr frumsteindum bergsins.

Hvortveggja hvarfgjarnir og óhvarfgjarnir þættir nýtast við jarðefnafræðilegar rannsóknir á jarðhita. Hlutjafnvægi milli vökva og ummyndunarsteinda eru mörg hver hitastigsháð og því hægt að nota styrk efna eða efnahlutföll í vökva og gufu til að ákvarða hitastig jarðhitakerfisins (efnahitamælar). Notkun jarðefnafræði til að ákvarða hitastig með þessum hætti er einn mikilvægasti þáttur jarðhitaleitar og einnig við vinnslueftirlit. Dreifing hitaháðra ummyndunarsteinda er notuð til að ákvarða berghita á meðan borun stendur. Styrk og hlutföll óhvarfgjarnra þátta má nota til að ákvarða uppruna vökvans og til að vakta innstreymi kaldara vatns í kerfið (ferilefni; tracers) og eru þessar upplýsingar mikilvægar bæði við jarðhitaleit og vinnslueftirlit.

Útfellingar eru meðal algengustu vandamála sem upp koma við rekstur jarðvarmavirkjana. Þær geta myndast úti í vatnsæðum, borholum, í lögnum og búnaði á yfirborði og í niðurrennslisholum og lögnum að þeim. Eftirlit með útfellingahættu og viðbrögð við útfellingum eru meðal algengra viðfangsefna jarðefnafræðinga (sem og efnafræðinga og efnaverkfræðinga) sem vinna við jarðhitarannsóknir. Útfellingar sem valda vandamálum í borholum eru einkum súlfíð og karbónat útfellingar en leysni þessara fasa er háð pH stigi. Við suðu tapast veiku sýrurnar CO_2 og H_2S úr vökvunum og þá hækkar pH stig vatnsins og útfelling hefst. Í lögnum og búnaði á yfirborði, sem og í niðurrennsli lögnum stafar mest hætta af kísilútfellingum. Leysni kísils er ekki háð pH stigi undir venjulegum kringumstæðum í jarðhitaumhverfi, heldur verða kísilútfellingar vegna þess að vökvinn kólnar og sýður og nær þannig mettnun með tilliti til myndlauss kísils. Ýmsar lausnir hafa verið þróaðar til að draga úr vandamálum vegna útfellinga.

Álframleiðsla – Rafgreining

Gunnar Ari Guðmundsson, Fannar Jónsson

Alcan á Íslandi

Ágrip

Ál er þriðja algengasta frumefni jarðskorpunnar, á eftir súrefni og kísli, og myndar um 8% hennar. Það var óþekkt þar til Daninn Christian Ørsted framleiddi það á tilraunastofu 1825. Það var þó ekki framleitt í neinu magni fyrr en 20 árum síðar. Ástæða þess að ál fannst ekki fyrr er hversu ríka tilhneigingu það hefur til að bindast súrefni og hversu erfitt er að skilja það frá því. Nútíma áliðnaður byggir á rafgreiningaraðferð sem lýst var árið 1886 af Frakkanum Paul Louis Toussaint Héroult og Bandaríkjamanninum Charles Martin Hall. Þeir fundu upp óháðir hvor öðrum sömu aðferð, og fengu báðir einkaleyfi sín skráð vorið 1886. Aðferðin er gjarnan kennd við þá báða og nefnd *Hall-Héroult* ferlið. Í lýsingu sinni lýsir Héroult framleiðsluferlinu og er hún í fullu gildi enn í dag. Lýsingin er eitthvað á þessa leið:

“Í grundvallaratriðum byggist ferlið við framleiðslu áls á að greina súrál sem leyst hefur verið upp í bráðnu krýólíti (steintegund úr natríum, flúor og áli, $(\text{NaF})_3\text{AlF}_3$.) með hjálp rafstraums. Straumurinn er leiddur í raflausnina annars vegar með rafskauti, sem er tengt deiglu úr bökuðum kolamassa, er umlykur raflausnina, en hins vegar með öðru rafskauti, sem einnig er úr bökuðum kolamassa og dýft er ofan í raflausnina. Þessi uppsetning, ásamt straumi með lágru spennu veldur greiningu súrálins; súrefnið streymir til forskautsins og brennur með kolefninu. Álið sest á veggi deiglunnar, sem myndar bakskautið, og botn deiglunnar. Raflausnarhæðin helst nokkurn veginn stöðug og hægt er að nota raflausnina endalaust, ef súráli er matað í hana. Pósitífa skautinu, þ.e. forskautinu, verður að skipta út sökum bruna. Rafstraumurinn veldur nægum varma til að halda súrálínu uppleystu”.

ISAL hefur verið starfandi á Íslandi í 40 ár. Í dag starfa um 450 manns í fyrirtækinu og framleiðslan er um 180.000 tonn af áli ár hvert. Á ráðstefnu Efnafræðifélags Íslands er ISAL með erindi um rafgreiningu í álframleiðslu. Á meðal efnis verður uppbygging rafgreiningakers, helstu hráefni sem notuð eru við framleiðslu áls, efnafræði rafgreiningar og stýring kerresturs.

Járnblendifélagið fetar inn á nýjar brautir.

Þorsteinn Hannesson
Íslenska járnblendifélagið

Kísilframleiðsla, raunhæfur kostur á Íslandi

Guðmundur Gunnarsson

Nýsköpunarmiðstöð Íslands

Ágrip

Fyrsta skrefið í framleiðslu á hreinum kísil (99,9999%) fyrir sólarrafhlöður er framleiðsla á kísilmálm í ljósbogaofnum, en framleiðsla kísilmálm (Si) er að mörgu leiti svipuð framleiðslu á kísiljárni. Meiri kröfur eru þó gerðar til hráefna hvað varðar hreinleika og grafit rafskaut eru notuð í staðinn fyrir sjálfbakandi kolarafskaut. Kísilmálmur úr ljósbogaofnum getur verið af 98 – 99 % hreinleika. Kísill fyrir sólarrafhlöður hefur hingað til verið fenginn úr úrgangskísil úr rafeindaiðnaði, þar sem hreinleiki kísilsins er enn meiri, en vegna aukinnar eftirspurnar fyrir kísil í sólarrafhlöður er framboð á kísil fyrir sólarrafhlöður nú takmarkað. Fjöldi fyrirtækja vinnur nú að þróun á aðferðum til að framleiða kísil fyrir sólarrafhlöður úr kísilmálm. Nokkrum mismunandi aðferum við framleiðslu á kísil fyrir sólarrafhlöður verður lýst.

Efnavöktun í umhverfi iðjuvera

Þór Tómasson
Umhverfisstofnun Íslands

Ágrip

Í erindinu verður farið yfir hvers vegna þarf að vakta efni í umhverfinu. Hvaða efni er helst verið að vakta í umhverfinu og hvaða efni skal meta í tengslum við starfsleyfisgerð fyrir iðjuver. Borin verða saman viðhorf við vöktun andrúmslofts, vatns og lífvera. Farið verður yfir aðferðir við vöktum efna, beinar mælingar á styrk í umhverfinu, mælingar í lífverum og mat á áhrifum á umhverfi og lífverur. Að lokum verða kynnt nokkur dæmi um vöktum úr alþjóðleg og íslensku umhverfi og skoðað dæmi um tengsl slíkrar vöktunar við faraldsfræðilegar rannsóknir á heilsu fólks.

Aflþynnur, hvað er það ?

Magnús Þór Ásgeirsson
Atvinnuþróunarfélag Eyjafjarðar

Koldíoxíð sem eldsneyti.

Oddur Ingólfsson
Carbon Recycling International

Spörun jarðefnaeldneytis, raunhæfar lausnir.

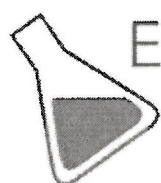
Sigbór Pétursson
Háskólinn á Akureyri.

Ágrip

Stór hluti orkuiðnaðar á Íslandi hefur á undanförunum árum tengst stóriðju, fyrst og fremst álframleiðslu. Á allra síðustu árum hefur umræðan þó einnig beinst að notkun íslenskrar orku fyrir samgöngutæki okkar og fiskiskip. Ég tel þann þátt umræðunnar hafa einkennst af óraunsæum hugmyndum og framkvæmdum sem hafa engu skilað en sóað opinberu fé í stórum stíl. Í fyrirlestrinum verða þessar fullyrðingar rökstuddar með tölulegum upplýsingum. Ég tel einnig að um of hafi verið einblínt á þá óraunhæfu og tilgerðarlegu draumsýn að gera Ísland kolefnisfrítt land á allra næstu árum á sama tíma og afurðir sem eru framleiddir úr jarðefnaeldsneyti en gætu verið framleiddir með vistvænni íslenskri orku eru notaðir í stórum stíl hér á landi. Þessi mál verða einnig rædd.

Ráðstefna Efnafraeðifélags Íslands, Hótel Loftleiðum, Reykjavík,
17. nóvember 2007.

Ágrip veggspjalda



Efnafraeðifélag Íslands
The Icelandic Chemical Society

Efnisyfirlit

- 1. NMR hermun disilacyclohexana.**
Ragnar Björnsson og Ingvar Helgi Árnason.
- 2. Efnasmíði og greining á nýjum 1,3-dititana-5,7-disila-tetraoxocyclooctan komplex.**
Ester Inga Eyjólfsdóttir og Ingvar Helgi Árnason.
- 3. Stellingajafnvægi rannsakað með Raman greiningu.**
Sunna Ólafsdóttir Wallevik og Ingvar Helgi Árnason.
- 4. HCl Photorupture Studies.**
Kristján Matthíasson, Viktor H. Wang og Ágúst Kvaran.
- 5. Ab initio calculation of the excited states of HCl.**
Erlendur Jónsson.
- 6. Hreyfanleiki í kuldavirkum alkalískum fosfatasa mældur með rafeindaspunataekni.**
Pétur Orri Heiðarsson, Bjarni Ásgeirsson.
- 7. Aukinn stöðugleiki kuldakærs alkalísks fosfatasa með innsetningu tvísúlfíðbrúar á kostnað hvötunarvirkni.**
Bjarni Ásgeirsson, Guðjón Andri Gylfason, Björn Viðar Aðalbjörnsson.
- 8. Vetni í nanómálmklösum: Er það hugsanlega lausn á vetnisgeymsluvandamálinu?**
Jón Steinar Garðarsson Mýrdal, Katrín Íris Kortsdóttir og Hannes Jónsson
- 9. Útreikningar á smugi atóma í og á yfirborði fastra efna.**
Andri Arnaldsson og Hannes Jónsson.
- 10. On the role of argon reactions in a low pressure O₂/Ar discharge.**
Jón Tómas Guðmundsson og Eyþór Gísli Þorsteinsson.
- 11. A pulsed nitrogen discharge: A global (volume averaged) model study.**
Eyþór Gísli Þorsteinsson og Jón Tómas Guðmundsson
- 12. Sólarhlöð úr þunnum kísilhúðum ræktuðum úr vökvafasa**
Davíð Már Daníelsson, Halldór G. Svavarsson og Jón Tómas Guðmundsson.
- 13. Synthesis, characterization and investigation of structure activity relationships for methylated chitosaccharide derivatives.**
Ögmundur Rúnarsson, Már Másson o.fl.
- 14. Silicone elastomer as a drug delivery form for Non Steroidal Anti-Inflammatory Drugs.**
Bergþóra Snorradóttir, Már Másson o.fl.

NMR hermun disilacyclohexana

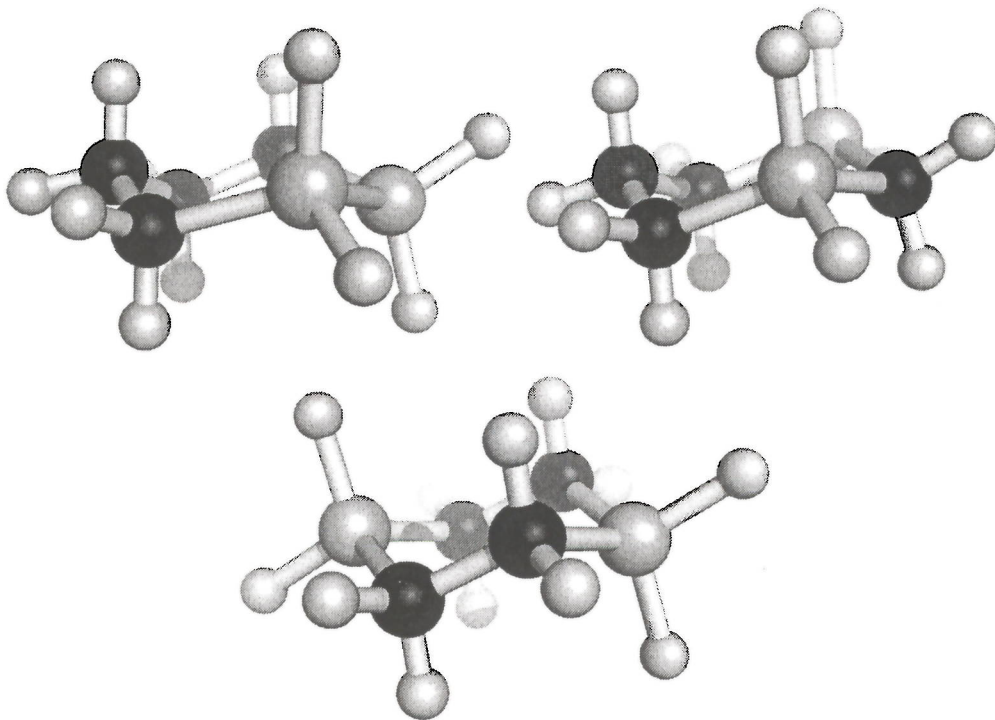
Ragnar Björnsson og Ingvar Árnason.

Raunvísindastofnun Háskólans, Dunhaga 3, 107 Reykjavík

Ágrip

Fyrir nokkrum árum voru ósetin disilacyclohexansambönd smíðuð í fyrsta skipti í rannsóknarhópi Ingvars Árnasonar. Þessi efni eru afleiður cyclohexans með tveimur kísilatómum (sjá myndir að neðan).

Þrátt fyrir að þessar sameindir hafi einfalda byggingu hafa ^1H NMR-róf þeirra reynst illgreinanleg. Orkuyfirborðum efnanna hefur áður verið lýst með skammtafræðireikningum og einkennast þau af lágum virkjunarhólum milli stólforma (4-6 kcal/mol), sem bendir til að sameindirnar séu mjög hreyfanlegar í lausn við stofuhita. Útlit rófa í toluen lausn er óháð hitastigi frá -90°C til $+90^\circ\text{C}$. Hefðbundin hermun NMR-rófa með LAOCOON greiningu hefur ekki borið árangur. Hér er lýst í fyrsta skipti sannfærandi ^1H NMR hermun disilacyclohexana með Integral-Transform ítrekun og Total Line Shape aðferðafræði Laatikainens, sem notuð er í forritinu Perch.



Efnasmíði og greining á nýjum 1,3-dititana-5,7-disila-tetraoxocyclooctan komplex

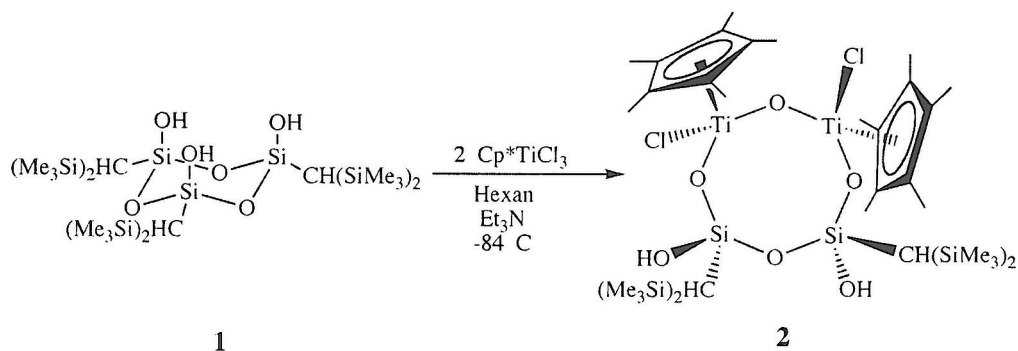
Ester I. Eyjólfsdóttir, Ingvar H. Árnason

Raunvísindastofnun Háskólans, Dunhaga 3, 107 Reykjavík.

Ágrip

Títankomplexar hafa mikla þýðingu í hvötun, bæði í lífrænum efnasmíðum og til myndunar á fjölliðum. Undanfarin ár hefur áhugi á afleiðum títanocenkomplexa aukist mikið í tengslum við svokallaða þriðju kynslóðar hvata. Í rannsóknarhópi Ingvars Árnasonar hafa rannsóknir á adamantanlaga títankomplexum staðið yfir um árabíl. Við tilraunir til að útvíkka flóru þessarra efna með hvarfi sexhrings **1** við Cp^*TiCl_3 , sjá skema, fékkst óvænt myndefni **2**, þar sem stöðugur siloxan hringurinn hafði rofnað og tvær TiCp^*Cl einingar komið inn í staðinn til að mynda átthring.

Efnið var greint með NMR, MS og kristalgreiningu, sem leiddi í ljós að efnið kristallast í triclinic einingasellu, í rúmgrúpunni $P\bar{1}$, og að hver sella inniheldur fjórar sameindir. Til samanburðar var bygging sameindar (í gasfasa) einnig reiknuð skammtafræðilega með B3LYP/3-21G aðferð og bar reikningunum ágætlega saman við mældu bygginguna.



Stellingajafnvægi rannsakað með Raman greiningu.

Sunna Ólafsdóttir Wallevik og Ingvar Helgi Árnason.

Raunvísindastofnun. Dunghagi 3, 107 Reykjavík.

Ágrip

Stellingajafnvægi einsetinna mettaðra sexhringja er vel þekkt og gegnir mikilvægu hlutverki í lífrænni rúmeftafræði. Talsvert minna er vitað um stellingajafnvægi einsetinna silacyclohexan afleiða en umtalsverð vinna hefur farið í rannsóknir á þeim á Raunvísindastofnun á síðustu árum.

Stellingajafnvægi 1-fluoro-1-silacyclohexans (**1**) hefur m.a. verið rannsakað með; beygju rafeindageisla í gasham (GED), örbylgjugreiningu, ^{19}F NMR mælingum við lágt hitastig og Raman mælingum. Skammtafræðilegir reikningar voru framkvæmdir og spágildi þeirra borin saman við niðurstöður tilrauna í gas- og vökvaham.

Hitastigsháðar Raman mælingar voru framkvæmdar á **1** á hitastigsbilinum 300-210 K (hreint efni), 300-120 K (pentan lausn) og 293-200K (diklórómetan lausn). Niðurstöðurnar voru samhljóma um að áslæga stellingin **1a** væri orkulægri en sú þverlæga **1e**. Orkumunur á milli stellinga greindist 0.25(5), 0.22(5) og 0.28(5) kcal/mol (ΔH gildi) í hverju tilfelli fyrir sig.



HCl Photodissociation Studies.

Kristján Matthíasson, Viktor H. Wang og Ágúst Kvaran.
Science Institute, University of Iceland.

Mass analysis was performed for the E^1S^+ excited state of the HCl molecule. A shift in the intensity ratio of each mass peak formed during photodissociation was observed.

For $E^1S^+_{(v'=1)}$ the intensity ratio of the mass peaks change with rotational steps of the vibrational state. This change can be explained with the coupling of the $E^1S^+_{(v'=1)}$ excited state with the $V^1S^+_{(v'=14)}$ and $V^1S^+_{(v'=15)}$ excited states.

Ab initio calculation of the excited states of HCl.

Erlendur Jónsson
Raunvísindastofnun Háskólans

Hreyfanleiki í kuldavirkum alkalískum fosfatasa mældur með rafeindaspunatækni

Pétur O. Heiðarsson, Bjarni Ásgeirsson

: Lífefnafræðistofa, Raunvísindastofnun Háskólans, Háskóli Íslands,
Dunhaga 3, 107 Reykjavík, Ísland.

Ágrip

Kuldavirkur alkalískur fosfatasi (AP) úr kaldsjávarörverunni *Vibrio* sp. G15-21 hefur aukna hvötunarvirkni og minnkaðan hitastöðugleika miðað við skylda fosfatasa úr miðlungshitakærum örverum. Þessir eiginleikar kuldavirkni eru taldir vera árangur þróunar í átt að ensímbyggingu með aukinn sveigjanleika. Kenninguna er þó ekki auðvelt að sanna vegna þess að sveigjanleiki er ekki auðmældur og hann getur verið flókið samspil margra þátta. Markmið þessarar rannsóknar var að skoða hreyfanleika í byggingu AP og öðlast betri skilning á tengslum sveigjanleika, hvötunar og stöðugleika.

Rafeindaspunatækni (Electron paramagnetic resonance, EPR) var notuð til þess að mæla hreyfanleika í stofnkeðju AP. Með markvissum stökkbreytingum má innleiða aminosýruna cystein í byggingu ensímsins og tengja á hana nítroxíð spunamerkið R1 sem hvarfast sértækt á þíólhópa. Greining á línulögun í EPR rófi R1 gefur upplýsingar um staðbundinn sveigjanleika stofnkeðju þar sem spunamerkið er tengt.

Villigerð AP hefur eina náttúrulega cystein aminosýru, Cys67, sem samkvæmt samröðunarlíkani er staðsett á sama helix og hin virka Ser65. Spunamerkið var hvarfað við Cys67 og áhrif hitastigs, afmyndara og hindra á hreyfanleika skoðuð. Ennfremur voru áhrif stökkbreytinga á hreyfanleika C67R1 könnuð með því að breyta Trp274 annars vegar í histidín og hins vegar í lýsín. Að lokum var skoðaður hreyfanleiki í tveimur öðrum staðsetningum, Ser53 og Ser373. Fyrri niðurstöður hafa sýnt að stökkbreytingin S53C leiðir til myndunar á tvísúlfiðbrú við Cys67 en ekkert er vitað um byggingu innskotsraðarinnar sem inniheldur Ser373, þar sem þessi röð er einstök fyrir *Vibrio* AP.

Línulögun EPR rófs C67R1 gaf sterkar vísbindingar um að Cys67 sé staðsett á helix til staðfestingar á samröðunarlíkani. Róf C67R1 voru mæld við mismunandi hitastig og sýndu línulega lækkuð hitastigi. Meðhöndlun C67R1 með afmyndara leiddi til aukins hreyfanleika við lágan styrk og loks afmyndunar við 1,7 M styrk þvagefnis sem er í samræmi við fyrri niðurstöður afvirkjunar- og flúrljómunarmælinga. Lögun EPR rófs C67R1 breyttist ekki við bindingu fosfathindra sem bendir til að hreyfanleiki ensíma sé eiginleiki sem er forritaður í byggingu þeirra.

Í EPR rófi S53R1 gaf ákveðin breikkun til kynna að hliðarkeðjan víxlverki við stofnkeðju ensímsins. Líklega hefur hliðarkeðjan rétta rúmlæga afstöðu til þess að mynda tvísúlfiðbrú við Cys67 og snýr að einhverju leyti inn í bygginguna frekar en út að leysinum. Róf S373R1 sýndi hins vegar mikinn hreyfanleika einkennandi fyrir yfirborðslykkju.

Stökkbreyting Trp274 í bæði lýsín og histidín hafði í för með sér minnkaðan hreyfanleika C67R1 og minnkaða hvötunarvirkni. Hreyfanleiki og hvötunarvirkni virðast því vera tengdir eiginleikar.

Almennt gefur rafeindaspunatækni mjög nákvæmar og staðbundnar upplýsingar hvað varðar hreyfanleika og byggingar- og eðliseiginleika ensíma.

Aukinn stöðugleiki kuldakærs alkalísks fosfatasa með innsetningu tvísúlfíðbrúar á kostnað hvötunarvirkni.

Asgeirsson, B., Gylfason, G.A. , Adalbjörnsson, B.V.

Raunvísindastofnun Háskóla Íslands, lífefnafræðistofa.
bjarni@raunvis.hi.is

Ágrip

Ensím úr kuldakærum lífverum hafa eiginleika til hvötunar við lág hitastig en sameindafræðilegur grundvöllur þess er ekki vel skylgreindur. Eitt af sameiginlegum einkennum kuldakærra ensíma er aukin sveigjanleiki í bygging þeirra í samanburði við skyld ensím úr meðal- og hitakærum lífverum. Því hafa tilgátur verið settar fram um að aukin hvötunargeta þessara ensíma við lág hitastig komi fram í sveigjanleika í byggingu þeirra. En er hann staðbundinn við hvarfsetrið eða dreifist hann um heildarbyggingu ensímsins? Alkalískur fosfatasi (AP) úr E. Coli og hryggdýrum ber venjulega fjórar cystín, sem mynda tvö tvísúlfíð tengi. Hins vegar hefur AP einagraður úr kuldakærri bakteríu af Víbrío sp. örverustofni aðeins eina cystín, staðsetta á helix í nálægð við kjarnsækna serin í hvötunarsetrinu. Við höfum framkvæmt sjö sjálfstæðar stökkbreytingar, þar sem við innleiddum cystín á mjög hreyfanlegri lykkju innan 5Å radíus frá þessari einu cystín. Fjórar þeirra leiddu af sér myndun tvísúlfíðbrúa. Hitastöðugleiki afbrigðanna var mældur með hringskautunarljósmælingum en staðbundinn hitastöðugleiki með virknimælingum. Umtalsverð aukning í stöðugleika fékkst fyrir þessi stökkbrigði. Á sama tíma kom fram minnkun á sækni í hvarfefnið (hærra K_m) og mikil lækkun á hvötunarhraða (k_{cat}). Þessar niðurstöður benda til þess að hreyfanleiki nærri hvarfsetri og líklega í helix sem ber þessa náttúrulegu cystín sé mikilvægur til að viðhalda fullri hvötunargetu í kuldaðlögðu AP.

'Vetni í nanómálmklösum: Er það hugsanlega lausn á vetnisgeymsluvandamálinu?'

Jón Steinar Garðarsson Mýrdal (a), Katrín Íris Kortsdóttir (a,b) og Hannes Jónsson (a)

(a) Háskóli Íslands og Raunvísindastofnun

(b) KTH, Stokkhólmi

Ágrip

Við höfum gert þéttnefelli (DFT) reikninga á varmafræðilegum eiginleikum vetnis sem bundið er í og á yfirborði málmklasa einkum úr magníni og áli. Vitað er að hraði bindingar og losunar vetnis er mun meiri fyrir litla klasa heldur en stóra kristalla, en reikningarnir beinast fyrst of fremst að því að kanna hvort varmafræðilegir eiginleikar klasanna séu ólíkir kristöllum, þá sérstaklega það hitastig sem þarf til að losa vetnið. Ólíkt fyrri reikningum Wageman og fél. í Hollandi fundum við að litlir MgH₂ klasar losa vetni við heldur hærra hitastig en MgH₂ kristall, sem er öfugt við það sem heppilegt væri því losunarhitastig kristallsins er um 200 gráðum of hátt. Íbætur af hliðarmálmum svo sem Ni og Zn virðast hafa lítil áhrif. Niðurstöðurnar fyrir álklassa voru mjög óvæntar því þeir aflagast til að binda vetnisatómin í brúarstöðum á yfirborðinu allt upp í þrjú vetnis atóm per álatom. Bindiorkan er mjög nálægt því gildi sem gefur heppilegt losunarhitastig, um 100 gráður, og magn vetnis sem hægt er að binda er nálægt 10% af heildarmassanum sem er tvöfalt meira en besta afturkræfa vetnisgeymslan sem nú er þekkt. Álklassar af nanóstærð virðast því uppfylla þau skilyrði sem sett hafa verið fyrir heppilega vetnisgeymslu, en spurningin nú er hvort hægt sé að búa til stöðugt efni sem samanstendur af slíkum nanóklösum og þolir það að vera hlaðið og afhlaðið nokkur þúsund sinnum.

Útreikningar á smugi atóma í og á yfirborði fastra efna.

Andri Arnaldsson og Hannes Jónsson
Háskóli Íslands og Raunvísindastofnun

Ágrip

Við höfum þróað aðferð til að reikna út hraðafastann fyrir smug (tunneling) atóma til dæmis í efnahvörfum og sveimi með því að nota kjörsveifilsnálgun í skammtafræðilegri framsetningu á virkjunarástandskenningunni. Aðferðin byggist á ferlategnum Feynman (FPI) og atómkröftum sem fengnir eru með þéttifellaaðferðinni (DFT). Með þessari aðferð opnast þeið til að meta smughraða atóma í stórum kerfum án þess að til sé mættisfall til að lýsa víxlverkuninni milli atómanna. Við höfum notað aðferðina til að reikna út sveimhraða vetnis í ýmsum málum, svo sem Pd og Ta. Smug verður ráðandi hvarfgangur í þessum kerfum þegar hitastigið er um eða undir herbergishita. Smug er ráðandi hvarfgangur við losun vetnis frá ammóníumbórani, efni sem hugsanlega væri hægt að nota sem vetnisgeymslu í bílum. Þar er hraði smugið meira en hundraðfalt hraðari við 100 C en venjulegur, klassískur hvarfgangur. Einnig hefur áhrif smugs á hin ýmsu skref í myndun ammóníaks á yfirborði Ru(1000) verið metið.

On the role of argon reactions in a low pressure O₂/Ar discharge

J. T. Gudmundsson and E. G. Thorsteinsson

Science Institute, University of Iceland, Reykjavik, Iceland
Department of Electrical Engineering, University of Iceland, Reykjavik,
Iceland

Ágrip

We use a global (volume averaged) model to study the argon reactions, and the role of metastable species in an O₂/Ar discharge in the pressure range 1 – 100 mTorr. The relative reaction rates for the creation and loss of the metastable argon atom (the levels 1s₅ and 1s₃) and the argon ion Ar⁺ are calculated and the important reactions determined and discussed. Penning dissociation influences the loss of metastable atoms above 10 mTorr pressure and its role increases with increasing pressure. Roughly 90 % of the argon ions are created by electron impact ionization from the ground state atom while about 10 % are created by electron impact ionization from metastable argon atom. Charge transfer and ion-ion recombination replace wall recombination as the dominating loss channels for argon ions above 20 mTorr.

A pulsed nitrogen discharge: A global (volume averaged) model study

E. G. Thorsteinsson and J. T. Gudmundsson

*Science Institute, University of Iceland, Reykjavik, Iceland
Department of Electrical Engineering, University of Iceland, Reykjavik,
Iceland*

Ágrip

A time dependent global (volume averaged) model is applied to study a pulsed low pressure (1 - 100 mTorr) high density nitrogen discharge. The electron density, electron temperature and the density of ions and neutral species is evaluated for various discharge pressures, pulse frequencies and duty cycles. In particular the dissociation of the nitrogen molecule and the role of metastable nitrogen molecules $N_2(A)$ and metastable nitrogen atoms $N(D)$ and $N(P)$ is explored. The density of the metastable nitrogen atoms $N(D)$ is found to be significant. Furthermore, we explore how the neutral/ion flux ratio varies with duty cycle and pulse frequency.

Sólarhlöð úr þunnum kísilhúðum ræktuðum úr vökvafasa

Davíð Már Daníelsson¹, Halldór G. Svavarsson² og Jón Tómas Guðmundsson¹

¹ Raunvísindastofnun Háskólans, ² Tækni- og verkfræðideild, Háskólinn í Reykjavík

Ágrip

Sólarhlöð sem byggjast á p-n skeytum eru venjulega framleidd með því að sveima íbótarefni inn kísil. Sú aðferð er tiltölulega þurftafrek á kísil. Síðustu ár hefur orðið vart við skort á háhreinum kísli til þessara nota og verð farið hækkandi. Þetta hefur vakið áhuga á að finna aðferð til að minnka magn kísils sem þörf er á til framleiðslu á sólarhlöðum. Ein leið er að framleiða p-n skeyti með þunnhúðartækni. Fjallað verður um framleiðslu á p-n skeytum með því að rækta þunnar húðir á kísil undirlög með ræktun úr vökvafasa við ræktunarhitastig á bilinu 700 - 900°C. Áhrif mismunandi málmleysa á hrjúfleika húðanna voru skoðuð með kraftsjá (AFM) og rafeindasmásjá (SEM).

Synthesis, characterization and investigation of structure activity relationships for methylated chitosaccharide derivatives

Rúnarsson ÖV¹⁺, Holappa J², Nevalainen T², Hjálmsdóttir M³, Järvinen T², Loftsson Th¹, Einarsson JM⁴, Steinsson H¹, Jónsdóttir S⁵ and Másson M¹.

¹⁺ Faculty of Pharm., Univ. of Iceland. ² Dep. of Pharmac. Chem., Univ. of Kuopio. ³ Prog. Biomed. Sci., Reykjavík Univ., ⁴ Genis EHF, Iceland, ⁵ Sci. Instit., Univ. of Iceland.

Purpose: To synthesize a series of methylated chitosaccharide derivatives with various methylation degrees and to investigate the structure activity relationship (SAR) for antibacterial effects against *Staphylococcus aureus*.

Methods: Methylated derivatives of chitosan polymer and chitoooligosaccharides were produced in reaction with MeI. In some cases the material was treated several times using the same reaction conditions. Three different chitosaccharides were used as starting material; Chitosan I (polymer, 97 % deacetylated), chitosan II (oligomer 44 % deacetylated) and chitosan III (oligomer, 84 % deacetylated). Protection strategies to improve the selectively methylation reaction were also investigated. All compounds were analysed with NMR, IR and elemental analysis to determine the degree of *N*-mono-, di- and trimethylation and also the *O*-methylation. Tests for activity against *S. aureus* were performed according to the Clinical and Laboratory Standards Institute (CLSI).

Results: The degree of *N*-quaternization in the nanomaterial ranged from 0-86 % and with varying degree of *N,N*-dimethylation and *O*-methylation. More selective *N*-quaternization could be obtained with the protection group strategy compared to known synthetic strategies. A selective synthetic procedure to produce highly *N*-quaternary material (86%) without any *O*-methylation was developed. The polymers were more active at pH 5.5 against *S. aureus* with MIC ranging from 4-512 µg/mL. At pH 7.2 the compounds were less active but the highly quaternized compounds showed MIC down to 4 µg/mL. At pH 5.5 the methylation had little effect on the activity but extensive *O*-methylation reduced the activity. Protonation of the free amino group at acidic pH is key factor in the antibacterial activity of the compounds. Low molecular weight derivatives were inactive. *N*-quaternization contributed mainly to the antibacterial effects at pH 7.2, where slightly quaternized compounds were inactive. The chitosaccharide derivatives are currently being investigated in cell lines for the effect on epithelial tight junctions.

Conclusion: Procedures for the selective syntheses of highly *N*-quaternized chitosaccharide derivatives were developed. Methylation of chitosan has little impact on the antibacterial effect at low pH, whereas *N*-quaternization is a necessary condition for antibacterial effect at neutral pH.

Silicone elastomer as a drug delivery form for Non Steroidal Anti-Inflammatory Drugs

Snorradóttir, B.S.¹, Scheving, R.¹, Thorsteinsson², F. Guðnason, P.I.² and Másson, M.¹

¹Faculty of Pharmacy University of Iceland, ²Össur hf.

Purpose:

Matrix device are systems where drug is suspended through nondegradable polymer matrix. Matrix systems are prepared when drug is mixed with polymer, then the mixture is put in a mould to shape the polymer matrix. When a drug is distributed through polymer matrix the drug release is according to Higuchi law, release is proportional to the square root of time. In the current study the utility of silicone was tested as a matrix device for Non Steroidal Anti-Inflammatory Drugs (NSAID's).

Material and method: Three types of silicones were used as a matrix device for ibuprofen, ketoprofen, diclofenac, naproxen and diflunisal. The drugs were suspended as particles in the polymer matrixes. Drug influence was tested on silicone matrix curing and their chemical properties. Release from the silicone matrixes were measured in Franz diffusion cells and the influence on drug release estimated. Release curves were fitted to theoretical equations and variance defined from theoretical curve.

Results and conclusions: It was demonstrated that the curing reaction of silicones is dependent on properties of the drug. The drug release from silicone matrixes which were prepared in this test follows Higuchi law, except for diflunisal. Release of drugs is variable, ibuprofen > ketoprofen > naproxen > diclofenac > diflunisal. Cyclodextrin solution is a suitable receptor phase for diffusion measurements. Phosphate buffer saline can also be used but the release is then pH dependent. The silicone chemical structure is relatively porous and therefore, very permeable to diffusion by various substances. The drug release can be fast, due to permeability of the silicone, but organic solvents can also permeate into silicone and affect the properties of the membrane. Ethanol and methanol are therefore not well suited as receptor phases. The drug release increased at elevated temperature and it is possible to influence drug release with different treatment of the silicone matrixes. Elasticity of the silicone matrixes, with or without drugs, does not vary much. Further investigations are planned to determine the effect of drug particles size and different composition of the silicone on drug release rates and physical properties of the silicone matrixes.