



Efnafraeði og Nýsköpun

5. ráðstefna Efnafraeðifélags Íslands
Hótel Loftleiðum 14. Nóvember 2009

Dagskrá:

09:30 Mæting, ráðstefnugögn afhent.

10:00 Setning, Kristján Matthíasson, gjaldkeri Efnís.

10:10 – 12:00 Líf og heilsutækni, umsjón Hörður Filippusson

Fyrirlestur 1, Sesselja Ómarsdóttir, Lyfjafraeðideild HÍ 10:10 – 10:40
Bioprospecting: Efnauðlegð í lífríki hafsins.

Fyrirlestur 2, Gissur Örlygsson, Nýsköpunarmiðstöð. 10:40 – 11:10
Kítínafleiður og kalsíumfosföt til beingræðslu.

Fyrirlestur 3, Eric Knight, Center for System Biology. 11:10 – 11:40
High-Density Algal Photobioreactors Using Geothermal Supplied Energy and CO₂.

Örfyrirlestur 1, Hrönn Ólína Jörundsdóttir, Matís. 11:40 – 11:50
Mengun í íslenska þorskinum.

Örfyrirlestur 2, Már Másson, Lyfjafraeðideild HÍ. 11:50 – 12:00
Optimization of Silicone Drug Delivery Matrix using Experimental Design and in vitro Transdermal Permeation.

12:00 – 13:00 Hádegisverður á Hótel Loftleiðum.

13:00 – 15:00 Efnafraeði og efnatækni, umsjón Már Másson.

Fyrirlestur 4, Margrét Þorsteinsdóttir, Artic Mass. 14:30 – 14:00
Multivariate Approach to Evaluate Differences between a HPLC-MS/MS versus an UPLC-MS/MS Assay for Quantification of a Clinical Candidate and its Metabolites in Plasma.

Fyrirlestur 5, Páll Theodórsson, Raunvísindastofnun HÍ. 13:00 – 13:30
Upphaf landnáms lesið með kolefni-14 aldursgreiningum.

Fyrirlestur 6, Ragnar Jóhannsson, Arctic Tilapia. 14:00 – 14:30
Efnafraeði vatnsendurnýtingar í eldi hlýsvatnsfiska á Íslandi.

Örfyrirlestur 3, Baldur Sigurðsson, Artic Mass. 14:30 – 14:40
Nýtt fyrirtæki á sviði efnagreininga.

Örfyrirlestur 4, Daníel Frímansson, *Unv. College Dublin*. 14:40 – 14:50
Light Induced Antimicrobial Properties of BF₂ – Chelated Tetraaryl-
azadipyrrromethene Photosensitizers.

Örfyrirlestur 5, Manuela Magnúsdóttir, RHÍ 14:50 – 15:00
The role of the major loop in *Vibrio* alkaline phosphatase on cold-adaption.

15:00 – 16:00 Kaffihlé og veggspjaldakynningar.

16:00 Græn efnafræði, umsjón Hrönn Jörundsdóttir.

Fyrirlestur 7, Oddur Ingólfsson, Carbon Recycling Int. 16:00 – 16:30
CO₂; kolefnisuppspretta framtíðarinnar. Nýtt sjónarhorn á
hlýnun jarðar og eldsneytisvandann.

Fyrirlestur 8, Halldór Svarsson, Bláa lónið. 16:30 – 17:00
Fóðrun smápörunga með CO₂ jarðhitagasi.

Fyrirlestur 9, Edda Sif Aradóttir, HÍ. 16:30 – 17:00
Föngun og förgun kolefnis - staðbundnar lausnir á hnattrænum vanda.

17:00 – 19:00 Hlé.

19:00 Fordrykkur og veggspjaldakynning.

**20:00 Árshátíð Efnafræðifélags Íslands.
Veislustjóri Soffía Sveinsdóttir.**



Efnafraeðifélag Íslands
The Icelandic Chemical Society

EFNAFRAEÐI & NÝSKÖPUN

5. ráðstefna Efnafraeðifélags Íslands
Hótel Loftleiðum 14. nóvember 2009

Waters

THE SCIENCE OF WHAT'S POSSIBLE.™

vistor



GRÓCO ehf.



Ágrip erinda

Abstracts of oral
presentations

Efnaauðlegð í lífríki hafsins.

Sesselja Sigurborg Ómarsdóttir

Leit að lyfjavirkum efnum í sjávarlífverum hefur borið talsverðan árangur og eru efni sem m.a. fundist hafa í mosadýrum, sæhéategundum, möttuldýrum, svömpum og örverum komin í klínískar rannsóknir og fjögur lyf sem eiga rætur sínar að rekja til sjávarlífvera eru nú þegar á markaði. Náttúru efni og afleiður af þeim eru virku efnið í meira en þriðjungu allra lyfseðilsskyldra lyfja og það kemur ekki á óvart sé haft í huga að lífverur, sérlega þær sem ekki geta flúið af hólmi svo sem ýmsar frumstæðar sjávarlífverur heyja stöðugan efnahernað sín á milli. Stríðið um að lifa af með vörn og sókn hefur staðið í milljónir ára og myndað ótrúlega fjölbreyttan banka lífvirkra efnasambanda. Nú þegar hafa yfir 21000 efnasambönd verið einangruð og byggingaákvörðuð úr sjávarlífverum, einkum frá heitari hafsvæðum. Hins vegar hafa sjávarlífverur frá norðlægum slóðum lítið verið skoðaðar út frá efna- og lyfjafræðilegu sjónarhorni. Ísland er staðsett á einstökum stað í Norður-Atlantshafi og líffræðilegur fjölbreytileiki í hafinu í kringum landið hefur nánast ekkert verið rannsakaður m.t.t. efnainnihalds lífvera. Sérstaða Íslands er ekki hvað síst vegna þess að hér mætast kaldir straumar norður úr Atlantshafi og jarðhitasvæði á hafsbötni, sem gefur möguleika á sérstæðu lífríki sem ekki hefur áður verið metið m.t.t. framleiðslu áhugaverðra náttúru efna.

Nýlegt rannsóknarverkefni sem unnið er við lyfjafræðideild HÍ í samvinnu við innlenda og erlenda fræðimenn gæti leitt til uppgötvunar nýrra og lífvirkra efnasambanda sem hægt væri að nýta til frekari rannsókna og nýsköpunar.

Marine biosprospecting

The search for new chemical entities from marine organisms, (e.g. bryozoans, sea-hares, tunicates, sponges and microorganisms), has led to the discovery of potent drug-candidates currently in clinical trials. In addition, four marine-derived compounds have been approved as drugs. Natural compounds are the active substances in more than one third of all western drugs which is not surprising since in nature there is a constant competition amongst different life forms for survival, resulting in a tremendous diversity of bioactive compounds. To date more than 21,000 compounds have been isolated and structurally characterized from marine sources, mainly from tropical and temperate waters. On the other hand bioprospecting in northern waters has only been performed to a limited extent.

Iceland has a unique position in the North Atlantic, with marine biodiversity largely unexplored with respect to chemical constituents. In particular, the confluence of cold-water currents from Atlantic gyres and warm-water geothermal activity makes for a unique marine biogeography that has not been evaluated for the potential of marine natural product diversity.

A new research project conducted at the Faculty of Pharmaceutical Sciences, University of Iceland in collaboration with Icelandic and foreign scientists could result in potential new bioactive compounds used for further research and innovation.

Kítínafleiður og kalsíumfosföt til beingræðslu

Gissur Örlýgsson¹, Mariam Darai¹, C.-H. Ng², Jón M. Einarsson², Benedikt Helgason³, Eggert Gunnarsson⁴, Atli Dagbjartsson⁵, Sigurbergur Kárason^{5,6}, Elín H. Laxdal^{5,6,7}, Ólafur E. Sigurjónsson^{8,9}, Ramona Lieder^{1,8}, Halldór Jónsson jr.^{4,6}, Jóhannes Gíslason²

¹Nýsköpunarmiðstöð Íslands, Keldnaholt, 112 Reykjavík, gissuro@nmi.is, ²Genís ehf., Vatnagarðar 18, 104 Reykjavík, ³Institute for Surgical Technology and Biomechanics, University of Bern, Switzerland, ⁴Tilraunastöð Háskóla Íslands í meinafræði, Keldum, 112 Reykjavík, ⁵Landspítali-Háskólasjúkrahús, Fossvogi, 108 Reykjavík, ⁶Læknadeild Háskóla Íslands, Reykjavík, ⁷Department of Surgical Sciences, University of Bergen, Bergen, Norway, ⁸Blóðbankinn, Snorrabraut 60, 105 Reykjavík, ⁹Tækni- og verkfræðideild, Háskólinn í Reykjavík, Ofanleiti 2, 103 Reykjavík

Aminó fjölsykran kítín er önnur algengasta fjölliðan í náttúrunni á eftir sellulósa. Úr kítíni má vinna ýmsar tegundir aminófjöl- og fásykra. Komið hefur í ljós að ákveðnar aminófásykrur örva beinmyndun [1]. Hugsanlegt er að þær hafi áhrif á sérstök prótein, kítínasalík prótein (CLP), sem síðan hafi áhrif á frumur til nýmyndunar beins. Þessi virkni aminófásykranna er nýtt í þróun á efnum til beinalækninga sem og til þróunar á húðum fyrir málmígæðlinga. Í samsettum efnum er lífvirkum aminófásykrum fléttað saman við aminófjölsykrur og blöndur kalsíumfosfatetna. Samspil aminósýkranna og kalsíumfosfatetnanna á smásæjum skala, ásamt efnahvörfum kalsíumfosfatetnanna sem leiða að endingu til myndunar hýdroxyapatíts, segja fyrir um efnisfræðilega eiginleika efnisins. Þannig eru bæði lífvirkni og fjölliðueiginleikar kítínafleiðanna notuð á virkan hátt, sem og efnahvörf og eiginleikar kalsíumfosfatetnanna. Þessi samsettu efni má framleiða til innspýtingar með sprautu, sem einkonar sparsl, eða sem formaða ígræðlinga, allt eftir þörfum. Gert er ráð fyrir að efnið víki smátt og smátt fyrir náttúrulegu beini í líkamanum. Í húðun á málmígæðlingum er leitast við að nýta lífvirkni aminófásykranna til að hraða því að bein vaxi upp að ígræðlingi og festi hann. Húðunarefnið er aminófjölsykra sem myndar filmu á málmýfirborðinu. Filman leysist svo upp samhliða því sem bein vex uppáð málminum. Í erindinu verður skýrt frá nokkrum verkefnum þar sem kítínafleiður og kalsíumfosföt og blöndur þeirra eru þróuð til notkunar í beingræðslu.

Chitin derivatives and calcium phosphates for bone regeneration

The polysaccharide chitin is, after cellulose, the second most abundant organic polymer in nature. Many different types of aminopoly- and oligosaccharides can be processed from chitin. Certain specific aminooligosaccharides have been found to modulate bone regeneration [1]. In bone tissue, their mode of action is believed to be mediated through chitinase like proteins (CLPs), which in turn stimulate cells involved in bone regeneration. This effect of the oligomeric aminosugars is utilized in the development of new composite materials for bone healing as well as new coatings for metallic implants. In composite materials the bioactivity of the oligomeric aminosugars is combined with polymeric aminosugars and a mixture of different calcium phosphates. Nanoscale interactions of the aminosugars and the calcium phosphate materials, as well as the chemical reactions of the calcium phosphates to hydroxyapatite, dictate the macroscopic properties of the materials. In this way the bioactivity and the polymeric properties of the chitin derivatives, as well as the chemical reactions of the calcium phosphates, is used in an active manner. The composite materials can be injected, applied as pastes or formed to implants, depending on the planned application. After implantation, the composites are gradually absorbed by the organism and replaced by natural bone. The aim of coating metallic implants is to utilize the bioactivity of the chitooligosaccharides to speed up the fixation of implants in bone. The coating material is a polymeric aminosugar that forms a film on the metallic surface after application. The film is then absorbed as new bone grows around the implant. The presentation will describe some projects where chitin derivatives, calcium phosphates and their mixtures are developed for use in bone regenerative implants.

[1] R.A.A. Muzzarelli. Chitins and chitosans for the repair of wounded skin, nerve, cartilage and bone. Carbohydrate Polymers 76 (2009) 167-182.

High-Density Algal Photobioreactors Using Geothermal Supplied Energy and CO₂

Eric Knight, Center for Systems Biology, University of Iceland

eric@hi.is

Every year, geothermal wells in Iceland release hundreds of thousands of tonnes of carbon dioxide into the atmosphere, and is expected to increase in the coming years. The convergence of light-emitting diode(LED) technology, photobioreactor design, algal biotechnology and low energy processing costs make biological fixation of this CO₂ into fine chemicals (pharmaceuticals, cosmetics, coloring agents, food supplements, etc) feasible. With the rapidly dropping cost of LEDs, commercial versions of these LED-based PBRs are a realistic possibility. The conditions that prevail at geothermal power-plants represent especially favorable economic conditions to build a fine chemical industry in Iceland. The goals of our current research are 1) to build, test and optimize the core unit of a new generation of LED-based PBRs, 2) to lay out the subsequent scale-up process, and 3) to examine the spectrum of alga that can be used in the designed system. The establishment of such an industry in Iceland would significantly add to the diversity of industries operating in Iceland, and in addition, would form the basis for globalization of such technology to other areas of the world that will develop geothermal power in the coming years.

A Multivariate Approach to Evaluate Differences between a HPLC-MS/MS versus an UPLC-MS/MS Assay for Quantification of a Clinical Candidate and its Metabolites in Plasma

Margrét Thorsteinsdóttir^{a,b}, Gísli Bragason^{a,b} and Baldur Bragi Sigurðsson^b

^aUniversity of Iceland, Haga-Hofsvallagötu 53, 101 Reykjavík, Iceland.

^bArcticMass, Sturlugata 8, 101 Reykjavík, Iceland

e-mail: margreth@hi.is

Introduction:

Chemometric and multivariate statistical methods, such as principal component analysis (PCA) and partial least squares (PLS) can facilitate a rapid and reliable identification and differentiation of complex systems. Liquid chromatography coupled to tandem mass spectrometric (LC-MS/MS) methods are complex processes which involve many experimental factors which need to be simultaneously optimized to obtain maximum performances. The purpose of this work was to compare the performance of two LC-MS/MS methods, HPLC-MS/MS versus UPLC-MS/MS, for quantification of a candidate drug and two metabolites thereof, utilizing a chemometric approach and multivariate statistical methods such as PCA and PLS.

Methods:

D-optimal design with multi-level qualitative factors was applied for screening experiments to reveal significant factors influencing the HPLC-MS/MS and the UPLC-MS/MS, respectively. Twelve experimental factors; pH of mobile phase, type of organic solvent, initial amount of organic solvent, flow rate, slope of gradient, type of gradient slope, capillary voltage, cone voltage, hexapole voltages, ion energy and collision energy were studied in two separated domains. Significant factors were studied via S-optimal design and related to sensitivity, resolution and retention time utilizing PLS-regression. The results from the experimental screening were used to redefine a new experimental domain for further optimization of the methods and to explore the differentiation utilizing PCA analysis.

Results and Conclusions:

A sensitive method with fast analysis time for quantification of a candidate drug and its two metabolites in plasma was generated with two methods, a HPLC-MS/MS and an UPLC-MS/MS. Baseline separation was achieved between the candidate drug and metabolites after extraction of the compounds from human plasma following protein precipitation. After chemometric optimization, the limit of quantification was improved by a factor of 5 and 15 for the HPLC-MS/MS and UPLC-MS/MS methods, respectively. The results showed that sensitivity was significantly influenced by pH of the mobile phase, type of organic solvent, flow rate, collision energy, hexapole voltage and cone voltage. Many interaction terms between the experimental variables were significant, especially interaction term between variables controlling the HPLC and variables controlling the mass spectrometer were highly significant, so these variables cannot be independently controlled to obtain the optimal sensitivity. A very interesting finding was that type of organic solvent had very different effect on sensitivity for the two methods. The sensitivity of the UPLC-MS/MS method was greatly improved by using methanol instead of acetonitrile, while for the HPLC-MS/MS method a better sensitivity was obtained with acetonitrile. Chemometric optimization resulted in lowering of LLOQ for both methods and both can be applied to a single dose clinical study. However the UPLC-MS/MS method resulted in much lower operational cost.

Upphaf landnáms lesið með kolefni-14 aldursgreiningum

Páll Theodórsson

Raunvísindastofnun Háskólans

Tímatal landnáms á Íslandi er í uppnámi. Nýtt yfirlit yfir kolefni-14 aldursgreiningar á fornum mannvistarleifum frá ýmsum stöðum á Íslandi sýna að landnám er mun eldra en Ari fróði segir, allt að 200 árum eldra. Þessu er almennt hafnað af íslenskum fræðimönnum. Rætt er hvernig má komast til botns í málinu með mjög nákvæmum mælingum í vökvasindurkerfi. Lýst er hvernig fornum lífrænum mannvistarleifum, viðarkolum og dýrabeinum, er breytt í benzen, sem er mæliefni vökvasindurkerfa, þar sem kolefni-14 geislavirknin er mæld. Kerfið sem oftast er notað nefnist Quantulus. Það kostar um 27 milljónir króna og vegur 1000 kg. Við Raunvísindastofnun Háskólans hefur síðustu ár verið hannað og prófað mun einfaldara vökvasindurkerfi, ICELS, sem er sérsniðið fyrir aldursgreiningar, vegur 30 kg og kostar í framleiðslu innan við 0,5 milljónir króna. Rannsóknasjóður Rannís hefur veitt 3ja ára styrk til að rannsaka frumbyggð á Íslandi og hopun skóga með því að aldursgreina fornar kolagrafir. Síðar verða bein húsdýra úr fornum ruslahaugum væntanlega aldursgreind. Vegna yfirburðakosta ICELS er líklegt að selja megi þessi tæki erlendum rannsóknarstofum og að íslensk aldursgreiningastofa geti skilað góðum hagnaði af nákvæmum aldursgreiningum fyrir erlenda vísindamenn.

Efnafræði vatnsendurnýtingar í eldi hlýsvatnsfiska á Íslandi.

Ragnar Jóhannson
Arctic Tilapia

Á markað í Evrópu og Norður Ameríku eru að ryðja sér til rúms fisktegundir sem menn vissu ekki nöfnin á fyrir tíu árum síðan. Nú eru þessar tegundir að taka yfir markaði hefðbundinna fisktegunda eins og þorsk og ýsu sem eiga undir högg að sækja á mörgum mörkuðum. Það sem þessar fisktegundir hafa sammerkt er að þær eru harðgerar og vaxa hratt – og yfirleitt við frekar hátt hitastig eða allt að 30°C.

Ætla mætti að Ísland sé ekki kjörstaður fyrir eldi slíktra fiska en það þarf ekki að vera raunin. Ástæður þess eru þær að héraendis eru gufuaflsvirkjanir sem frá rennur mikið af kælivatni sem er heitt og í miklu magni og einnig er hægt að hita upp vatn beint frá borholum.

Þetta krefst þó að eldisrymi séu í lokuðu húsi og síðast en ekki síst að vatnið sé endurnýtt svo varmanum sé ekki kastað á glæ.

Til að það sé hægt þarf að hreinsa vatnið áður en það er endurnýtt. Hreinsa þarf úr því grugg, lofta úr því koltvísýring, yfirmetta með súrefni og umbreyta því ammoníaki sem fiskarnir láta frá sér í skaðlaus nitröt.

Arctic Tilapia var stofnað til að framleiða og markaðsetja fersk tilapiuflök á Evrópumarkaði.

Sett hefur verið upp tilraunakerfi með um 3 tonnum af fiski þar sem vatnið er endurnýtt 180 sinnum áður en það rennur frá stöðinni.

Stefnt er á að selja dreifingaraðilum í Evrópu sem þjónusta stórmarkaði. Til að sérgreina okkar vöru frá uppþýddum kínverskum flökum stefnum við að:

- Framleiða stóra flök, með lítið sótspor (carbon footprint) ,
- Nýta endurnýtanlega orku (jarðvarma)
- Nýta á innlent hráefni í fôðurgerð, afskurð úr flakavinnslu á síld og repjumjöl en repjurækt er nýhafin hér.
- Nýta rækjuhæsa sem falla til við pillun rækju. Í þeim eru svokölluð brómóphenól sem ætlað er að gefa afurðinni vott af sjávarbraði sem styrkir markaðsmynd vörumerkisins

CO₂; kolefnisuppspretta framtíðarinnar.

Nýtt sjónarhorn á hlýnun jarðar og eldsneytisvandann.

Prófessor Oddur Ingólfsson

Háskóli Íslands, Efnafræðistofa, Raunvísindastofnun, Dunhaga 3, 107 Reykjavík

Carbon Recycling International, Höfðabakka 9, 110 Reykjavík

Núverandi mat á olíuforða heimsins gerir ráð fyrir því að framleiðslan nái hámarki í kringum 2010 og næsta líklegt að við horfum fram á samdrátt í framleiðslugetu næstu áratuginna. Hinsvegar er eftirspurnin sívaxandi og því fyrirsjáanlegt að framleiðslan muni innan skamms tíma ekki anna henni.

Síðastliðin 50 ár hefur losun koltvísýrings á heimsvísu aukist umtalsvert. Árið 1950 var losunin u.þ.b. einn milljarður tonna kolefnisjafngilda en er nú komin upp í tæplega 10 milljarða tonna. U.þ.b. fjórðungur þessarar losunar kemur frá iðnaði. Þessi gríðarlega losun og aukinn styrkur í andrúmsloftinu veldur vaxandi áhyggjum af afleiðingum hnattrænnar hlýnunar sem rekja má að stórum hluta til gróðurhúsaáhrifa af völdum koltvísýrings.

Það er því aðkallandi og ögrandi verkefni að þróa aðferðir sem gera nýtingu endurnýjanlegra orkugjafa til að umbreyta koltvísýringi í verðmæta afurð á borð við fljótandi eldsneyti mögulega. Enn gagnlegra væri þó að þróa aðferð til að umbreyta koltvísýringi í fljótandi eldsneyti sem getur beinlínis leyst bensín og dísilolíu af hólmi. Slíkt eldsneyti, sem hentar hefðbundnum bensín- og dísilvélum, myndi spara okkur meiriháttar og tímafrekar tæknilausnir, auk breytinga á núverandi dreifikerfi, í leitinni að nýjum orkugjöfum.

Carbon Recycling International hefur aðsetur á Íslandi, og starfsemi fyrirtækisins byggir á endurnýtingu koltvísýrings í fljótandi eldsneyti. Í fyrirlestri mínum mun ég fjalla um mikilvægi verkefna á borð við þetta og segja frá bakgrunni, núverandi stöðu og framtíðarsýn fyrirtækisins.

CO₂; the carbon source of the future: A new approach to global warming and fuel security.

Current evaluation of the world oil production predicts the production to peak around the year 2010 and the expectations are that we will have diminishing production capacity within a few decades from now. Demand on the other hand rises rapidly and it has become foreseeable that in fairly short time, gasoline production will not meet demand.

The global carbon dioxide emission has grown enormously in the past 50 years. In 1950 the global emission was about 1000 million tons carbon equivalent, but has now reached close to 10,000 million tons carbon equivalent. About one fourth of this is industrial emission. Due to the greenhouse effect of carbon dioxide, this enormous emission and increased levels cause increasing concern about the consequences of global warming.

It is therefore an important challenge to develop processes that allow utilization of alternative energy sources to recycle carbon dioxide to a valuable product such as liquid fuel. It is even more beneficial to develop a process to recycle carbon dioxide to a liquid fuel that can immediately substitute the currently used gasoline and diesel distilled from petroleum oil. Such fuel which is compatible with combustion engines as they are today will render the need for major, time consuming, technical developments and infrastructural changes unnecessary in our quest for new energy carriers.

Carbon Recycling International is an Iceland based company that focuses on the conversion of carbon dioxide to liquid fuels. In this talk I will argue the need for such initiative, outline the background and the vision of the companies R&D and briefly introduced our first industrial scale production unit which is under design.

Fóðrun smápörunga á jarðhitagasi

Sigurbjörn Einarsson, Bláa Lónið.

Hækkandi hitastig á jörðinni sem afleiðing af losun gróðurhúsalofttegunda er umhverfisvá sem vofir yfir mannkyninu og þrýstir á um breytingar. Á alþjóðlegum pólitískum vettvangi er unnið að gerð samkomulags um takmarkanir á losun gróðurhúsalofttegunda. Stóran hluta af losuninni á rekja til notkunar jarðefnaeldsneytis í atvinnulífinu. Fyrirtæki sem nýta orku frá „grænum“ orkulindum eins og gerist hér á landi hafa augljóslega mikla möguleika í þessari stöðu. Bláa Lónið ehf. vinnur að því að nýta CO₂ sem losnar samfara öflun fyrirtækisins á heitum jarðsjó til ræktunar á þörungalífsmassa. Þörungalífsmassin er notaður sem efnisþáttur í mörgum Bláa Lóns húðvörum. Önnur nýting gæti komið til greina í framtíðinni, svo sem í dýrafóður og til framleiðslu lífdísels. Frumgögn sem núna liggja fyrir um nýtingu gassins miðað við framleiddan lífmassa gefa sterklega til kynna að nota mega ómeðhöndlað jarhitagas með góðum árangri.

Global warming as a consequence of greenhouse gas emission is a major threat to mankind and calls for changes. On political level attempt is made to reach an international agreement to reduce release of greenhouse gases. Corporate activity accounts for a significant part of the emission. This situation gives companies using green energy, like many Icelandic companies do, an increased momentum. Currently the Blue Lagoon ltd works on using CO₂, emitted in association with mining of geothermal seawater, for cultivation of algae. The algae biomass is used as an ingredient in several Blue Lagoon skin care products. Other applications might be relevant in the future such as for animal feed and biodiesel production. First data obtained from testing the efficiency of using the gas for biomass production indicate that untreated geo-gas can be viable for that purpose.

Föngun og förgun kolefnis - staðbundnar lausnir á hnattrænum vanda

Edda S.P. Aradóttir

Notkun mannkyns á jarðefnaeldsneyti hefur stóraukist frá upphafi iðnbyltingarinnar og leitt til sívaxandi styrks CO₂ í andrúmslofti. Talið er líklegt að þessi aukni CO₂ styrkur sé valdur að þeirri hnattrænu hlýnun sem óumdeilanlega hefur átt sér stað undanfarna áratugi. Loftslagslíkön benda til þess að ef ekki verður gripið til róttækra aðgerða sem draga hvort tveggja úr losun og styrk CO₂ í andrúmslofti haldi hitastig heimsins áfram að hækka á komandi öldum með alvarlegum afleiðingum. Þannig munu jöklar halda áfram að hopa, yfirborð sjávar hækka auk þess sem djúpsjárstraumar gætu stöðvast. Einnig mun vistkerfum sjávar stafa ógn af áframhaldandi lækkun á sýrustigi hafsins. Föngun og förgun kolefnis eru meðal aðferða sem gætu verið mikilvægar í glímunni við loftslagsbreytingar af mannavöldum.

Áður en hægt er að farga kolefni er nauðsynlegt að fanga það úr útblástri virkjana og stóriðju. Lífrænir leysar eru jafnan notaðir við föngunina, ýmist fyrir eða eftir bruna eldsneytis, en einnig má nota hreinan bruna. Bein föngun koltvísýrings úr andrúmslofti hefur jafnframt verið nefnd sem möguleg aðferð við að lækka styrk koltvísýrings í andrúmslofti en vísindamenn í Bandaríkjunum vinna um þessar mundir að smíði tækis, e.k. gervitrés, sem fangar CO₂ beint úr andrúmslofti. Sýnt hefur verið fram á að tæknilega er aðferðin möguleg en enn er óljóst hvort hún er efnahagslega hagkvæm.

Þegar kemur að förgun kolefnis hafa fjórar aðferðir einkum verið nefndar; förgun í setlög, förgun í sjó, binding í steindum og binding í lífmassa. Skipulögð binding í lífmassa er þegar hafin um allan heim, t.a.m. á Íslandi með skógrækt Kolviðar. Aðrar aðferðir eru tæknilega flóknari og skemmra á veg komnar. Í tilfelli setlagaförgunar er CO₂ dælt niður í gropið berg, t.a.m. yfirgefín olíuvinnslusvæði eða setlagalægðir. Nauðsynlegt er að yfir svæðunum sem um ræðir liggja þétt berglag sem hindrar CO₂ í að leita aftur til yfirborðs vegna flotkrafts. Einnig má hugsa sér förgun CO₂ í sjó en þar sem sýrustig hans myndi lækka í kjölfarið þyrfti förgunin að eiga sér stað á töluverðu dýpi til að lágmarka áhrif á lífverur. Binding kolefnis í steindir er fýsilegur kostur að því leitinu til að myndefnin (einkum karbónöt) eru stöðug og lítil hætta á að kolefnið sem bundið er í þeim sleppi aftur út í andrúmsloftið. Hins vegar er aðferðin tæknilega krefjandi og að mörgu að huga.

CarbFix verkefnið er alþjóðlegt rannsóknarverkefni sem kannar fýsileika þess að binda CO₂ í basalti. Tilraunaniðurdæling CO₂ í basalt mun hefjast á Hellisheiði á allra næstu vikum eða mánuðum en verkefninu var valinn staður þar annars vegar vegna nálægðar við Hellisheiðarvirkjun sem útvegar CO₂ til niðurdælingar en hins vegar vegna þess að fjölda holna hafa verið boraðar á svæðinu sem auðveldar eftirlit með tilrauninni. CO₂ verður dælt við um 25 loftþyngda þrýsting niður í basaltlög sem liggja á 400-800 m dýpi við og leyst upp í vatni við niðurdælinguna. Ef vel tekst til í verkefninu má búast við því að aðferðin verði notuð hér á landi við að binda CO₂ útblástur frá jarðhitavirkjunum og jafnvel annarri stóriðju. Einnig er ljóst að niðurstöður koma til með að nýtast annars staðar þar sem basaltraunlög eru algeng víða um heim.

Carbon capture and sequestration local solutions to a global problem

Edda S.P. Aradóttir

Anthropogenic use of fossil fuels has increased substantially over the past hundred years and consequently, atmospheric CO₂ concentrations have risen dramatically. The increased CO₂ concentration is believed to be responsible for a significant rise in global temperature over the past decades. Climate models suggest that unless drastic measures are taken towards bringing atmospheric CO₂ levels down, temperature increase will continue, at least over the next few hundred years, leading e.g. to glacial melting, rising sea levels and decreased thermohaline circulation. Increased atmospheric CO₂ also leads to ocean acidification, which will have drastic consequences for marine ecosystems. Large scale capture and sequestration of atmospheric CO₂ has been proposed in an attempt to solve this problem.

In order to sequester CO₂ it has to be captured, e.g. from electric power plants. Pre- or postcombustion systems are most commonly used to capture CO₂ emissions from stationary industrial facilities but oxycombustion can be used as well. Direct capture of CO₂ from the atmosphere has been suggested and successfully demonstrated with an air scrubbing device that is currently under development. This method could prove to be an essential part in attempts to stem buildup of CO₂ in the atmosphere as the scrubbers could be located anywhere on the planet and once rise of atmospheric CO₂ levels has been stemmed, air capture can be used to bring the levels down to an acceptable value.

Geologic storage, ocean storage, carbon mineralization and storage in forests and soil are among the proposed CO₂ sequestration methods. In geological storage, CO₂ is injected into porous rock formations, including sedimentary basins, depleted oil reservoirs and non-economic coal beds. An impermeable cap rock is essential so that buoyancy forces will not drive CO₂. Ocean storage would involve CO₂ injection into oceans at depths greater than 1000 m where it would dissolve whereas carbon mineralization aims to create stable carbonate minerals such as magnesite and calcite by reacting CO₂ with minerals. Such minerals are stable over geologic scale, so sequestration by mineralization minimizes risk of leakage back to the atmosphere. CO₂ storage in biomass offers an alternative to the previous industrial solutions. One must keep in mind though, that biomass acts both as a carbon sink and source but there is a net CO₂ storage.

In attempt to assess the feasibility of in situ CO₂ mineral storage in basaltic rocks, a field-scale project is scheduled to launch early 2010 at Hellisheiði, Iceland. Hellisheiði comprises ideal conditions for this study, as the injection site is adjacent to a geothermal power plant, which will supply up to 30,000 tons of CO₂ per year for injection into subsurface basalts at intermediate depths (400-800 m). Additionally, several strategically located wells are available downstream from the injection site enabling monitoring of the chemical evolution of the groundwater. CO₂ will be injected at a partial pressure of approximately 25 bars and will be dissolved in water during injection. It is anticipated that the results of this project will be used to optimize the in situ carbon mineralization process, enabling in situ carbonation at sites throughout the world.

Ágrip
veggspjalda
Abstracts of posters

ArcticMass – Nýtt fyrirtæki á sviði efnagreininga
Baldur Bragi Sigurðsson¹, Eiríkur Vigfússon¹, Gísli Bragason¹ og Margrét Þorsteinsdóttir^{1,2}.

¹ArcticMass ehf., ²Lyfjafræðideild Háskóla Íslands

ArcticMass ehf. er nýtt fyrirtæki á sviði efnagreininga og var stofnað af fyrrum starfsmönnum efnagreiningadeildar Íslenskrar erfðagreiningar. Starfsmenn ArcticMass búa yfir viðamikilli reynslu af efnagreiningum á lífsýnum, enda hefur hópurinn fylgt rannsóknarlyfjum allt frá *in-vitro* skimunum í byrjun lyfjaþróunarferils til klínískra prófana í fólki.

LC-MS/MS er sú efnagreiningartækni sem algengust er við magngreiningu á rannsóknarlyfi, niðurbrotsefnum rannsóknarlyfs og lífmerkjum (biomarkers) í lífsýnum. LC-MS/MS er kerfi sem samsett er af vökvagreini sem tengdur er tvöföldum massagreini. Þess lags massagreinar eru þeim eiginleikum búnir að vera mjög næmir og valvísir. ArcticMass hefur yfir að ráða þremur LC-MS/MS tækjum og hefur því möguleika á miklu gegnumstreymi sína.

Einn þáttur efnagreininga á lífsýnum er undirbúningur þeirra fyrir greiningu og eru þær aðferðir m.a. einföld prótínfelling, útdráttur með stöðufasa og vökva/vökva útdráttur. Markmið þessa undirbúnings er að hreinsa sýnið af sem flestum efnum sem ekki eru til skoðunar en geta haft neikvæð áhrif á mælinguna. ArcticMass hefur yfir fullkomnum búnaði til sýnameðhöndunar að ráða. Sá búnaður gefur einnig möguleika á meira gegnumstreymi sína.

Þegar þörf er á að þróa aðferð á skilvirkan hátt er efnagreining tölfræði (chemometrics) notuð sem verkfæri. Í stað þess að skoða eina breytistærð í einu tryggir tilraunahönnun (design of experiments, DoE) að valin próf innihaldi hámarks upplýsingar þannig að hægt sé að nálgast hámarks svörum með sem fæstum prófunum. ArcticMass hefur mikla reynslu í notkun efnagreiningar tölfræði við aðferðaþróun og er notaður hugbúnaðarpakki frá Umetrics.

Meðal þeirrar þjónustu sem ArcticMass býður uppá er magngreining lífrænna sameinda með LC-MS/MS, skimun umbrotsefna með LC-Q-TOF, ráðgjöf við þróun mæliaðferða, ráðgjöf og uppsetning tilrauna með hjálp efnagreiningar tölfræði og *in-vitro* greiningar við leit að niðurbrotsefnum rannsóknarlyfja.

ArcticMass – New company in the field of analytical chemistry

Baldur Bragi Sigurðsson¹, Eiríkur Vigfússon¹, Gísli Bragason¹ og Margrét Þorsteinsdóttir^{1,2}.

¹ArcticMass ehf., ²Faculty of Pharmacy University of Iceland

ArcticMass ehf. is a new company in the field of analytical chemistry and was founded by former employees of deCODE Genetics, analytical department. The staff at ArcticMass has supported several experimental drug compounds from drug discovery *in-vitro* screening to clinical trials. LC-MS/MS is the analytical technique which is most commonly used in quantification of experimental drugs, metabolites and biomarkers in biological samples. LC-MS/MS is a system which consists of liquid chromatography system which is coupled to a tandem mass spectrometer. Tandem mass spectrometers are unique since they are very sensitive and selective. ArcticMass has three LC-MS/MS systems and can therefore analyze thousands of samples per week.

Sample preparation is the first step of the analysis. The methods used are, among others, simple protein precipitation, solid phase extraction and liquid/liquid extraction. The goal of sample preparation is to rinse the sample of unwanted compounds which could have negative effects on the analysis. ArcticMass has advanced automation systems for sample preparation, which helps fast throughput.

Method development is executed by using chemometrics as a tool. In stead of evaluating one variable at a time, a structured, organized method is used to determine the relationship between the different variables, that is a method called design of experiments (DoE). Using DoE gives the maximum amount of information in the least number of experiments. ArcticMass has vast experience in the use of chemometrics for method development and uses a software package from Umetrics.

Among the services ArcticMass offers is quantification of organic compounds with LC-MS/MS, screening of metabolites with LC-Q-TOF, counseling in method development for LC-MS, counseling and configuration of experiments using chemometrics and *in-vitro* assays in metabolite identification of experimental drugs.

Laser Induced Acoustic Desorption í tilraunum á sviði rjúfandi rafeindaálagningar.

Benedikt Ómarsson, Frímann Haukur Ómarsson, Elías H. Bjarnason and Oddur Ingólfsson.
Faculty of science, University of Iceland.

Rjúfandi rafeindaálagning (DEA) er grundvallarferli sem spilar stórt hlutverk á fjölmörgum sviðum, þar má nefna margvíslegar rannsóknir og ferli innan tækniönaðarins.

Ólíkt rafeindaörvaðri jónun (electron bombardment ionization) þar sem rafeindir með töluverða umframorku (4-5 eV) eru notaðar til að jóna og brjóta niður sameindir getur DEA rofið tengi sameinda þegar orka rafeindanna er nálægt 0 eV. Margar sameindir eru mjög hvarfgjarnar gagnvart lágorku rafeindum [1-3]. Ferli af þessu tagi eru mjög háð orku rafeindanna.

DEA er talið spila stórt hlutverk í niðurbroti lífvirkra sameinda þegar vefur verður fyrir jónandi geislun. Mikið magn dótturrafeinda (rafeindir með orku < 20 eV) myndast í rás geislans. Þessar rafeindir geta orsakað tengjarof í sameindum innan vefsins.

Undanfarna áratugi hafa DEA rannsóknir aðallega farið fram á litlum sameindum undir eins-árekstrar ástæðum. Lífvirkar sameindir eru aftur á móti oft viðkvæmar og eiga það til að brotna niður við þær aðstæður sem venjulega eru notaðar til að koma sameindunum á gasfasa (hitun, MALDI, o.f.l.).

Tiltölulega ný aðferð til DEA rannsókna á stórum og lífvirkum sameindum er „Laser Induced Acoustic Desorption (LIAD)“ [4,5]. Hér kynnum við aðalatriði þessarar aðferðar og lýsum möguleikum þessarar tækni til að framkvæma DEA tilraunir á stórum og lífvirkum sameindum.

Laser Induced Acoustic Desorption in Dissociative Electron Attachment experiments.

Dissociative Electron Attachment (DEA) is a fundamental process that plays a significant role in many research and technological areas as well as in everyday life.

In contrast to direct electron impact where an excess energy of several eV (e.g. 4 to 5 eV) is required to fragment a molecule, DEA can dissociate a molecule with an almost zero electron energy threshold (i.e. it is an example of a barrier-less chemical reaction). Many molecules are known to decompose very effectively through dissociative electron attachment (DEA) when interacting with low energy electrons [1-3].

DEA is believed to play a vital role in the mechanism behind radiation damage to biologically relevant molecules. Secondary (low energy) electrons are formed in vast numbers in the track of ionizing radiation as it propagates through the biological medium. These electrons are highly reactive and can induce rupture of chemical bonds. Substantial work and effort has been put into DEA experiments through the last decades. These experiments however concentrate mostly on relatively small molecules under single collision conditions. Biologically relevant molecules tend to be both large and fragile. Promoting these molecules into the gas phase using normal techniques (heating, MALDI and more) poses a problem since this usually leads to decomposition of the molecule.

A relatively new approach to study DEA to large and fragile molecules is by the application of the soft desorption technique termed Laser induced acoustic desorption (LIAD) [4,5]. Here we present the operation principle of LIAD-EA-MS and describe its usefulness in DEA experiments on large and fragile biologically relevant molecules.

[1] E. Illenberger, J. Momigny (Eds.), Gaseous Molecular Ions. An Introduction to Elementary Processes Induced by Ionization. Steinkopff/Springer, Darmstadt/New York, 1992.

[2] O. Ingólfsson, F. Weik, E. Illenberger, Int. J. Mass Spectrom. 155 (1996) 1.

[3] I. Bald, J. Langer, P. Tegeder, O. Ingólfsson, Int. J. Mass Spectrom. 277 (2008) 4.

[4] V. V. Golovlev, S. L. Allman, W. R. Garrett and C. H. Chen. Applied Physics Letters 71, 6 (1997) 852 - 854.

[5] I. Bald, I. Dabkowska and E. Illenberger. Angewandte Chemie-International Edition 47, 44 (2008) 8518 - 8520.

Optimization of Silicone Drug Delivery Matrix using Experimental Design and *in vitro* Transdermal Permeation

Snorraddóttir, B.S.¹, Thorsteinsson, F.², Guðnason, P.I.² and Mátsson, M.¹

¹*Faculty of Pharmaceutical Sciences, University of Iceland, Reykjavik, Iceland.*

²*Össur hf., Reykjavik, Iceland.*

As a continuation of our previous work [1] with silicone and NSAIDs, we have applied experimental design software (MODDE) to optimize the material properties of silicone drug delivery matrix. The matrix contained drug particles and various excipients in different compositions. The aim was to engineer the elastomer material to provide excellent mechanical strength and optimal transdermal delivery.

The experimental design software proposed a D-optimal design for this system since the region becomes an irregular polyhedron. D-optimal designs are computer generated designs, tailor made for each problem [2]. They allow great flexibility in the specifications of each problem and are particularly useful when you want to constrain a region and no classical design exists.

The model was fitted with MLR (multiple linear regression), which gave a G-efficiency of 73.5%. Evaluation of the raw data replication plot suggests a reasonably good model. The coefficient plots showed correlation ($Q^2 > 0.5$) of the excipients on all of the responses, and the most important factor for the release was the drug quantity. Majority of the excipients had a positive influence on the release.

In vitro transdermal permeation studies were done with 9 compositions of the drug delivery matrix that were proposed as optimal by MODDE. Human skin from 3 Caucasian female patients was obtained from cosmetic surgery and used to perform the drug release studies through the skin barrier. Diffusion experiments were done with heat separated dermis and epidermis from full thickness skin.

The sizes distribution of the drug particles was investigated by electron microscopy. The effect of particle size was not part of the current study but this is a future perspective for our current work, were we will investigate the contribution of material micro- and nanostructure.

References

1. Snorraddóttir, B.S., et al., *Release of anti-inflammatory drugs from a silicone elastomer matrix system*. Pharmazie, 2009. 64(1): p. 19-25.
2. Eriksson, L., et al., *Design of Experiments Principles and Applications*. 2000, Stockholm: Learnways AB.

Light Induced Antimicrobial Properties of BF₂ – Chelated Tetraarylazadipyrrromethene Photosensitizers

*Daniel O. Frimannsson, Julie Murtagh, Marco Grossi, Mariusz Tasiór, and Donal F. O'Shea**

Centre for Synthesis and Chemical Biology, School of Chemistry and Chemical Biology, University College Dublin, Belfield, Dublin 4, Ireland.

email: frimannnd@tcd.ie

Tíðni baktería sem eru ónæmar fyrir sýklalyfjum fer vaxandi og til að hindra vöxt og útbreiðslu þessara baktería hafa ýmsar nýjar aðferðir verið þróaðar. Ein þessara aðferða notkun ljóshrifameðferðar sem er gædd margvíslegum kostum, s.s. virkni gegn flestum bakteríutegundum og lægri tíðni stökkbreytinga.¹

Þrátt fyrir þessa kosti hafa fá ljósnæm efni verið þróuð í þeim tilgangi að eyða bakteríum og nú til dags eru phenothiazinium efni eins og metýlen blátt eða tólúín blátt notuð í læknisfræðilegum tilgangi.²

Við höfum þróað nýja tegund ljósnæmra efna sem eru byggð á BF₂-tetraarylazadipyrrromethene sem hafa m.a. sýnt mikla virkni gegn krabbameinsæxlum í músum.³

Hér höfum við lítillega breytt þessum efnum svo þau yrðu nothæf fyrir bæði eyðingu og skoðun baktería með flúrljómunarsmásmá. Á veggspjaldinu verður sýnd efnasmíði og eðlisefnafræðilegir eiginleikar tveggja efna 1 og 2. Niðurstöðurnar sýndu að efni 1 var kjörið fyrir smásjárskoðun baktería og var að auki tekið upp í mjög hröðum mæli. Efni 2 var hinsvegar mjög virkt gegn bæði gram-jákvæðum og – neikvæðum bakteríum, sem og MRSA og meinvaldandi *C. albicans*.

The evolution of bacterial phenotypes that show increased resistance against traditional antibiotics has prompted the search for different antimicrobial approaches to control the growth of these pathogens. One potential strategy is the use of photodynamic antimicrobial chemotherapy (PACT) for the inactivation of these microbial pathogens, seeing that PACT could possess favourable features such as a broad spectrum of action and low mutagenic potential.¹

Despite these characteristics, relatively few photosensitizers have been designed for the specific photo irradiation of bacteria and to date only phenothiazinium dyes such as methylene blue and toluidine blue are being used for clinical antimicrobial applications.²

Previously, we developed a new class of photodynamic therapy agent, based on the BF₂ – chelated tetraarylazadipyrrromethene, which has shown excellent *in vivo* efficacy in human tumour bearing nude mice.³

Herein, we describe the optimization of this class of compounds for imaging and inactivation of a broad spectrum of pathogens. The synthesis and photophysical properties of two novel bis-cationic compounds 1 and 2 will be described. Photosensitizer 1 proved optimal for confocal imaging and uptake studies while sensitizer 2 showed excellent light induced cytotoxicity for gram positive and negative bacteria, clinical MRSA, and the pathogenic yeast *C. albicans*.

1. Wainwright, M., Photodynamic antimicrobial chemotherapy (PACT). *J Antimicrob Chemother* **1998**, *42* (1), 13-28.
2. Foley, J. W.; Song, X.; Demidova, T. N.; Jalil, F.; Hamblin, M. R., Synthesis and properties of benzo[a]phenoxazinium chalcogen analogues as novel broad-spectrum antimicrobial photosensitizers. *J Med Chem* **2006**, *49* (17), 5291-9.
3. Byrne, A. T.; O' Connor, A.; Hall, M.; Murtagh, J.; O' Neill, K.; Curran, K.; Mongrain, K.; Rousseau, J. A.; Lecomte, R.; McGee, S.; Callanan, S.; O'Shea, D. F.; Gallagher, W. M., Vascular targeted photodynamic therapy with BF₂-Chelated Tetraaryl-Azadipyrrromethene Agents. *Br J Cancer* **2009**, *in press*.

Efnafræði í jarðhitarannsóknum og vinnslu
Ester Eyjólfsdóttir*
Íslenskar orkurannsóknir, Grensásvegi 9, 108 Reykjavík.

Jarðhiti er skilgreindur sem endurnýjanleg orkuauðlind. Hann hefur verið notaður til rafmagnsframleiðslu, húshitunar og til ýmiskonar framleiðslu í löndum þar sem vatnsfræðilegar, jarðeðlisfræðilegar og jarðfræðilegar aðstæður gera vinnslu hans að fýsilegum kosti. Áður en tilraunaboranir hefjast fer fram yfirgripsmikil rannsóknarvinna sem miðar að því að ákvarða eiginleika og nýtingarmöguleika svæðis, og þar kemur efnafræðin við sögu. Á þessu stigi er djúphitastig metið ásamt uppruna og gerð vatnsins, og flæði rannsakað.

Eftir að vinnsla hefur hafist er mikilvægt að fylgjast með viðbrögðum svæðis við massatöku. Merki um niðurdrátt, þrýstingsfall, innstreymi grunnvatns eða sjávar og aukna suðu eru gefin til kynna með breytingum á efnasamsetningu jarðhitavökvans áður en þær hafa áhrif á framleiðsluna, og því er hægt að grípa til viðeigandi ráðstafana í tíma. Útreikningar á mettunarstigi vökvans og líkum á tæringu eru einnig mikilvægur hluti vinnslueftirlits, sérstaklega í háhitakerfum þar sem efnastyrkur er hár.

The role of chemistry in geothermal exploration and production

Geothermal energy is considered to be a renewable energy source. It has been widely used for energy production and heating in countries where geological, hydrological and geophysical conditions are favourable. Extensive research has to be conducted in order to determine the potential of a geothermal area before expensive test drillings take place, and during the exploring phase chemistry is an important tool to evaluate subsurface conditions of the fluid in the system. The main objective is to predict subsurface temperatures, the water type and its origin, and understand flow directions.

After production has been initiated monitoring of the system is essential. Response to production load, such as pressure drawdown, recharge and increased boiling in the system, is indicated by a change in the chemical composition of the geothermal fluid. Scaling and corrosion calculations are also an important aspect of the production monitoring, especially in high temperature systems where concentration of different species is relatively high.

*E-mail: ester.inga.eyjolfisdottir@isor.is

Combined DEA and MALDI study on potential candidates for halogenating MALDI matrices

F. H. Ómarsson¹, H. D. Flosadóttir¹, O. Ingólfsson¹, E. Illenberger²

¹Science Institute, University of Iceland, Dunhagi 3, 107 Reykjavik, Iceland

²Institut für Chemie und Biochemie, Physikalische und Theoretische Chemie, Freie Universität Berlin, Takustrasse 3, D-14195 Berlin, Germany

Motivated by the possibility of using halogenating matrices for Matrix Assisted Laser Desorption Ionization Time of Flight Mass Spectrometer (MALDI-TOF-MS) we have studied two candidates with regards to their properties as halogenating matrixes. These candidates are 9-chloromethyl anthracene and 7-hydroxy-4-(trifluoromethyl)coumarin. These molecules are both partially halogenated and have similar characteristics with regards to fluorescence emission and UV absorption.

To identify low-energy resonances that lead to halogenide or "pseudo-halogenide" formation from these molecules we have studied dissociative electron attachment (DEA) in the energy range from about 0 eV to about 15 eV. These studies were conducted with a crossed beam apparatus with a trochoidal electron monochromator and a quadrupole mass spectrometer. These results are then compared to the fragmentation patterns we observe when these molecules are ionized in the MALDI process.

9-chloromethyl anthracene

Anthracene is a fused three ring aromatic system. The molecule transparent but it shows some fluorescence effect when exposed to irradiation of ultraviolet light.

We have measured the dissociative electron attachment to 9-chloromethyl anthracene. This molecule does not show a rich fragmentation and only two fragments. These are the chlorine anion Cl^- and the complimentary $[\text{M}-\text{Cl}]^-$. Both these anions are formed through two distinct resonances at 0 eV and 1.1 eV and at 3.0 and 5.1 eV respectively.

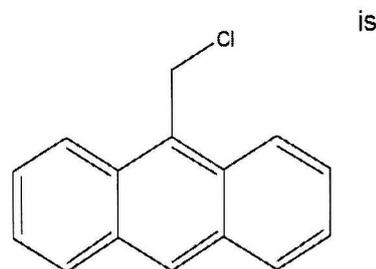


Figure 1. Molecular structure of 9-chloromethyl anthracene.

7-hydroxy-4-(trifluoromethyl)-coumarin

7-hydroxy-4-(trifluoromethyl)-coumarin is frequently used as a fluorescent probe in biochemistry and molecular biology as well as a dye laser combined with excimer lasers. This molecule has one slightly acidic proton as well as a trifluoromethyl group. The possible formation of fluorine anions and the "pseudo-halogenide" CF_3^- and the fact that the trifluoromethyl group stabilizes the coumarin derivative and broadens its UV/VIS spectral absorption and fluorescence emission¹ makes it a potential candidate for a halogenating MALDI matrix.

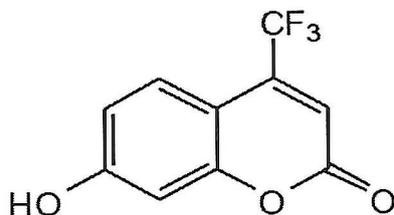


Figure 2. Molecular structure of 7-hydroxy-4-(trifluoromethyl)-coumarin

We measured the DEA of 7-hydroxy-4-(trifluoromethyl)-coumarin and observed resonances at 0 eV, 1.1 eV, 3.3 eV and 11 eV.

Here we compare the results from the DEA measurements with the direct and metastable fragmentation we observe from these molecules in MALDI ToF MS.

References

1. L. I. Loboda, I. V. Sokolova, A. Y. Ilchenko and T. N. Kopylova, *Kvantovaya Elektron.* **13** (1), 183-186 (1986).

Leit að mögulegum halógenandi burðarefnum fyrir MALDI með rjúfandi rafeindaálagningu

Frímann H. Ómarsson¹, Helga D. Flosadóttir¹, Oddur Ingólfsson¹, E. Illenberger²

¹Raunvísindastofnun, Háskóli Íslands, Dunhagi 3, 107 Reykjavík, Iceland

²Institut für Chemie und Biochemie, Physikalische und Theoretische Chemie, Freie Universität Berlin, Takustrasse 3, D-14195 Berlin, Germany

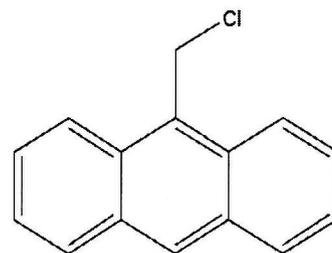
Í leit okkar af halógenandi burðarefnum fyrir Matrix Assisted Laser Desorption Ionization flugtímamassagreini (MALDI-TOF-MS) höfum við skoðað tvö efni. Þessi efni eru 9-chloromethyl-anthracene og 7-hydroxy-4-(trifluoromethyl)coumarin.

Við skoðuðum rjúfandi rafeindaálagningu (Dissociative Electron Attachment, DEA) á efnunum sem mynda halógena eða skinhalógena á orkubílinu frá ca. 0 eV upp í ca. 15 eV. Þessar mælingar voru gerðar á þvergeislatæki með rafeindaorkustilli og fjórþólsmassagreini. Niðurstöður DEA eru síðan bornar saman við niðurbrotsmunstrið sem fékkst með MALDI-mælingum á efnunum.

9-chloromethyl anthracene

Anthracene er þríhringja arómatískt kerfi. Sameindin sýnir flúrljómandi virkni við útfjólubláa geislun.

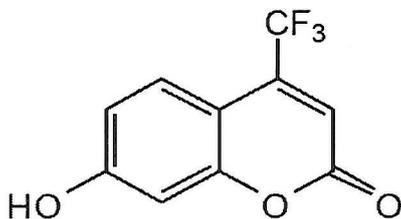
Við mældum rjúfandi rafeindaálagningu 9-chloromethyl anthracene og sáum aðeins tvö niðurbrot, Cl⁻ og [M-Cl]. Þessar jónir myndast báðar við tvö orkugildi, annars vegar við ~0 eV og 1,1 eV og hins vegar við 3,0 eV og 5,1 eV.



Mynd 1. Bygging 9-chloromethyl anthracene.

7-hydroxy-4-(trifluoromethyl)-coumarin

7-hydroxy-4-(trifluoromethyl)-coumarin er mikið notað sem flúrljómunarnemi í lífefnafræði og sameindalíffræði en einnig í litleysigeisla. Sameindin hefur eina súra prótónu og trifluorómetylhóp. Mögulegt er að fá flúor anjónir eða skinhalógeninn CF₃⁻ og sú staðreynd að trifluorómetylhópurinn stöðgar efnið og breikkar svið ÚF/SÝN gleypni og flúrljómunar¹ gerir það að verkum að mögulegt var talið að hægt væri að nota það sem halógenandi burðarefni í MALDI.



Mynd 2. Bygging 7-hydroxy-4-(trifluoromethyl)-coumarin

Við sáum rjúfandi rafeindaálagningu við ~0 eV, 1,1 eV, 3,3 eV og 11 eV. Við sáum 8 mismunandi niðurbrot við þessi orkugildi.

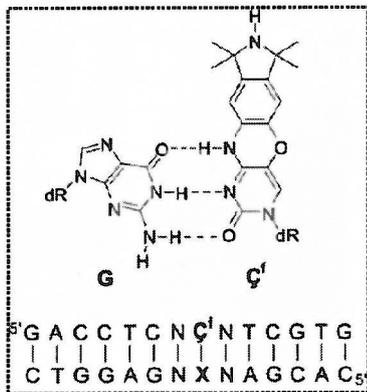
Við berum saman niðurstöður úr mælingum á rjúfandi rafeindaálagningu við niðurstöður úr beinu og hálfstöðugu niðurbroti sem við fengum í MALDI-TOF.

Heimildir

1. L. I. Loboda, I. V. Sokolova, A. Y. Ilchenko and T. N. Kopylova, *Kvantovaya Elektron.* **13** (1), 183-186 (1986).

Auðkenning mismörunar í DNA með notkun flúrmerkisins ζ^f

Haraldur Garðarsson og Snorri Þór Sigurðsson
Raunvísindastofnun, Háskóli Íslands, Dunhagi 3, 107 Reykjavík



Flúrljómandi kímisleifin (flúorósíðið) ζ^f er afleiða deoxýsýtídíns og myndar stöðugt basapar við gúanósín. Við innlimun flúorósíðsins í tvíþátta kjarnsýru (DNA), verða litlar breytingar í styrk flúrljómunarinnar. Að auki er hið flúrljómandi merki ólíkt eftir því við hvaða kímisleif ζ^f er parað. Þannig getur ζ^f greint hvaða basi er á mótstæða þættinum. Þessir eiginleikar gera flúorósíðið að mjög ákjósanlegum flúrljómandi hópi til að greina SNP (e. Single Nucleotide Polymorphism). Fyrri rannsóknir á áhrifum hliðstæðra basa, þ.e. basa sitt hvorum megin við ζ^f , bentu til þess að þeir hafa áhrif á flúrljómun (Cekan P og Sigurðsson SP (2008), *Chem Comm*, 29, 3393-3395). Því var ákveðið að skoða áhrif allra mögulegra hliðstæðra basa á flúrljómun flúorósíðsins. Niðurstöðurnar sýndu að hliðstæðu basarnir hafa töluverð áhrif, en að mismiklu leyti. Umnt er að greina áhrif hliðstæðra basa í þrjá flokka. Í fyrsta flokknum, og reyndar þeim stærsta, var hægt að greina nákvæmlega hvaða basi væri á mótstæða þættinum. Í næsta, var unnt að greina rétta basa-pörun við G frá mismörun. Í þriðja flokknum gat ζ^f ekki greint rétta basa-pörunina frá mismörðu DNA. Afur á móti var unnt, með því að breyta aðstæðum, að greina á milli allra basa sem basa-paraðir voru við ζ^f , óháð hliðstæðum bösum. Kvikasilfursjónir (Hg^{2+}) voru sérstaklega nytsamlegar, þar sem þær lækkuðu flúrljómun ζ^f sérhæft þegar um T-mispörun var að ræða. Getu ζ^f til að greina mótstæðan basa óháð hliðstæðum bösum gerir ζ^f að einum nytsamlegasta SNP-nema sem völ er á í dag.

Single nucleotide mismatch detection using fluoroside ζ^f

The fluorescent nucleoside (fluoroside) ζ^f is a cytosine-analogue that forms a stable base pair with deoxyguanosine in DNA. Upon incorporation of the fluoroside into double stranded DNA, it retains most of its fluorescence. Furthermore, the fluorescent signal is different, depending on the nucleotide that ζ^f is base-paired to. Thus it is able to identify its base-pairing partner. These abilities make it a promising candidate for single nucleotide polymorphism (SNP) genotyping. A preliminary study showed that the flanking sequence, i.e. the nucleotides immediately flanking the 3' and 5' side of the fluoroside, affected the emission of ζ^f (Cekan P and Sigursson ST (2008), *Chem. Comm.*, 29, 3393-3395). We were therefore interested in examining the effects of all possible flanking sequences on the fluorescence intensity of ζ^f . We found that the flanking sequence does induce changes in the emission, but to a different degree depending on the flanking sequence in question. In fact there were three distinct levels of mismatch detection. First, in the majority of flanking sequence, ζ^f was capable of identifying its base-pairing partner. Second, ζ^f was able to discriminate the fully base-paired duplex from the mismatches. Finally, the third category was when the fluoroside was not able to distinguish the fully base-paired duplex from a mismatch. In the sequences where distinction between all base-pairing partner was not possible, we were able to alter conditions, so that full discrimination was facilitated. The ability to use ζ^f in any flanking sequence makes it one of the most versatile SNP probes available today.

Mengun í íslenska þorskinum

Vordís Baldursdóttir¹, Kristín Ólafsdóttir², Hrönn Ólína Jörundsdóttir³, Helga Gunnlaugsdóttir³

PCB (Polychlorinated biphenyls) eru þrávirk lífræn efni sem eru fituleysanleg og safnast upp í lífverum og magnast upp fæðukeðjuna. Rannsóknir hafa sýnt fram á ýmis eituráhrif sem efnin hafa á heilsu manna og dýra má þar m.a nefna lifraskemmdir, krabbamein í lifur, sortuæxli, áhrif á taugakerfi og skjaldkirtil. PCB hafa ekki verið greind í þorski hér við land þar sem einstaklings breytileiki er skoðaður. Þorsksýni hafa verið tekin á síðustu 3 árum og hafa fiskarnir verið mældir og vigtaðir nákvæmlega auk þess sem þeir hafa verið kyngreindir og kvarnir hafa verið teknar til aldursgreininga. ASE (Accelerated Solvent Extraction) tæki er notað til útdráttar efnanna og er n-hexane notað sem leysir, eftir útdrátt eru sýnin hreinsuð frekar með brennisteinssýru til að fjarlægja þá fitu sem kann að vera eftir í sýnunum. Eftir útdrátt og hreinsun sýna fer greining efnanna fram með GC-ECD (gasgreini) og er notast við tvær mismunandi súlur DB-5 og DB-1701. Greind eru 7 mismunandi PCB efni svonefnd PCB7 eða marker PCB. Nú þegar hafa verið mæld PCB efni í holdi um 70 þorska. Meðaltal PCB7-efna í þorskholdi reyndist vera: 0,496µg/kg og virðist magnið einkum háð fituinnihaldi vöðvans. Tölfræðilega er verið að kanna hvort það er samband á milli magns PCB efna í fiskinum og m.a aldurs, kyns, stærðar ofl. atriða. Ljóst er að magn PCB efna í holdi íslenska þorsksins er langt undir þeim hámarksgildum á magni efnanna í fiski og fiskvörum sem eru 170µg/kg. Verkefninu er ekki lokið en eftir á að bæta við fleiri þrávirkum efnunum sem og að mæla einnig lifrar sömu fiska til að skoða samband efnanna í mismunandi vefjum þorsksins.

Pollution in Icelandic cod

PCB (Polychlorinated biphenyls) are persistent organic pollutants and lipid soluble and biomagnify in the food chain. Studies have shown that PCBs can cause toxic effects on humans and other animals, i.e. effects on the liver, cancer promotion, neurological effects and effects on the thyroid gland. There is no information on these compounds in cod on individual basis from Iceland. Cod samples were taken over the last 3 years where the fishes were measured and weighed, and sex and age investigated. ASE (Accelerated Solvent Extraction) was used to extract PCBs with hexane as solvent. The samples were thereafter cleaned with sulfuric acid to remove lipids. PCBs were then analysed with gas chromatograph equipped with electron capture detector (GC-ECD) on two different analytical columns, DB-5 and DB-1701. Marker PCBs (PCB7, 7 different PCB congeners) were analysed. Presently, PCB has been analysed in muscle tissue of 70 cods. Mean concentration PCB7 is 0,496µg/kg where the concentration correlates to the lipid content in the muscle. Statistical analyses were performed to investigate if there is correlation between the PCB concentration and i.e. age, sex, size etc. The PCB concentration is lower than allowed maximum concentration (170µg/kg). This is an ongoing project, were more organic pollutants are to be investigated and also in different tissues of the cod.

1) Háskólinn á Akureyri, Borgir við Norðurslóð, 600 Akureyri, 2) Rannsóknarstofa í lyfja og eiturefnafræði, Haga, Hofsvallagötu 53, 107 Reykjavík, 3) Matís ohf, Skúlagötu 4, 101 Reykjavík

Geothermal CO₂ Bio-mitigation technique by utilizing Cocoid Blue Green Algae

Gregor Maliga – Wroclaw University of Technology

Indra Suryata – Reykjavik University

Halldor Svavarsson – Reykjavik University

Sigurbjörn Einarsson – Blue Lagoon R&D

The aim of this study is to demonstrate the feasibilities of CO₂ sequestration by utilizing Blue Lagoon's microalgae. Because of their size and rapid reproduction, green algae are the optimum choice for use with biological-photosynthesis sequestration. Photobioreactors and artificial lights are used for growing the microalgae. A system has been designed for the reduction process and variables such as pH, temperature, salinity and photoactive radiation levels were varied for optimization.

The study also provides the result of utilizing non-condensable gasses (NCG) from nearby geothermal power plant and its fixation rate by microalgae. Results of this study were encouraging. There was a clear indication that the reduction of CO₂ is not only possible, but a very viable solution to the growing problem of CO₂ in the atmosphere. The design of the reduction process system will also be presented.

Markmið þessarrar rannsóknar var að sýna fram á möguleika á CO₂ bindingu í andrúmslofti með ræktun smápörunga úr Bláa Lóninu. Vegna stærðar sinnar og mikils vaxtarhraða eru slíkir þörungar mjög ákjósanlegir til til slíkra nota með ljóstillifun. Ræktunarkerfi með raflýsingu var notað við ræktunina. Hannað var kerfi þar sem breytur á borð við sýrustig, hitastig, seltu og ljósstyrk voru bestaðar.

Rannsóknin tók einnig til prófana á bindingu CO₂ afgass frá jarðvarmavirkjunum. Niðurstöður voru mjög jákvæðar. Sýnt var fram á að slíkt væri ekki einungis mögulegt heldur beinlínis mjög álitleg lausn á vanda vegna vaxandi CO₂ magni í andrúmslofti. Hönnun ræktunarkerfisins verður einnig kynnt.

Path Finding Techniques and their Usage in Experimental Data Augmentation

Jón Bergmann Maronsson 1, 2, 3, Hannes Jónsson 3, Tejs Vegge 1,2

1 Materials Research Division, National Laboratory for Sustainable Energy, Technical University of Denmark, DK-4000 Roskilde

2 Center for Atomic-scale Materials Design, Technical University of Denmark, DK-2800 Kgs. Lyngby

3 Faculty of Science and Science Institute, University of Iceland, 107 Reykjavík, Iceland

The development of sustainable energy solutions for the future requires new and improved materials. Specifically designed materials properties are needed to solve the grand challenges in energy production, storage and conversion. Hydrogen has been investigated extensively over the last decade as one of the few promising energy carriers which can provide a high energy density without resulting in CO₂ emission by the end user. Finding materials for efficient, reversible hydrogen storage, however, remains challenging and advanced computational methods are needed to speed-up the materials development.

A collaboration between theory and experiments is an essential ingredient in the development of new materials. The theory can predict which materials are worthwhile for experiments and then later help interpret the data obtained from the various experiments.

This work is focused on helping interpret experimental data from Quasi-Elastic Neutron Scattering (QENS) experiments on Ca(BH₄)₂ and Mg(BH₄)₂. Low energy motion was detected in the data and this poster outlines how we have determined which motion this might be using the Nudged Elastic Band Method with Density Functional Theory providing the approximation to the Schrödinger equation.

Tölvuaðferðir og notkun þeirra við túlkun tilraunagagna

Þróun sjálfbærra orkulausna fyrir framtíðina krefst nýrra og bættra efna. Efni með sérhannaða virkni eru nauðsynleg til að leysa helstu vandamálín sem felast í orkuframleiðslu, geymslu og nýtingu. Vetni hefir síðasta áratuginn verið skoðað sem einn vænlegasti orkuberinn. Það getur geymt mikla orku án koltvísýringslosunar. Til að finna efni sem geta geymt vetni á afturkvæman og hagkvæman máta þarf að nýta háþróaðar tölvuaðferðir.

Samvinna á milli fræða og tilrauna er mikilvæg til að þróa ný efni. Fræðarnar geta sagt til um hvaða efni eru áhugaverð til tilrauna og síðar má svo nýta fræðarnar til að hjálpa til við túlkun gagna úr tilraununum.

Hér eru kynntar túlkanir tilraunagagna úr Quasi-Elastic Neutron Scattering (QENS) tilraunum á Ca(BH₄)₂ og Mg(BH₄)₂. Hreyfingar með lága orku fundust í gögnunum og þetta veggspjald fjallar um hvurnig við notuðum Teygjubanda aðferðina (NEB) og Þéttnefellafræði (DFT) til að leiða líkum að hvaða hreyfingar þetta voru.

Fjölljóseindagleypni og massagreining sameinda. Asetýlen sem sýnidæmi.

Kristján Matthíasson, Victor H. Wang og Ágúst Kvaran
*Raunvísindastofnun, Háskóli Íslands, Dunhaga 3,
107 Reykjavík*

Ágrip

Fjölljóseindajónun ("REMPI") er aðferð sem byggir á því að aflmiklum LASER-geisla-blossum er skotið á sameindir í gasfasa. Við það nýtist einhver ákveðinn fjöldi ljóseinda til að örva sameindirnar í orkurík ástönd og ein ljóseind til viðbótar jónar síðan sameindirnar. Gleypiróf sameinda og þyrpinga þeirra fást síðan með massagreiningum jóna í kjölfar kælingar við gasútspýtingu (REMPI-TOF).

Áhrif LASER-tíðni á myndun niðurbrotsjóna asetýlen var skoðuð. Kom í ljós að H^+ , C^+ , C^{2+} and $C_2H_2^+$ jónirnar myndast í misjöfnum hlutföllum með breyttri LASER-tíðni. Út frá þeim gögnum var hægt að meta hvernig niðurbrot asetýlen á sér stað.

Abstract.

Resonance-Enhanced-Multiphoton-Ionisation (REMPI) is a method which uses a high intensity laser to ionize molecules from there excited states. When the molecule is hit by the laser it can absorb a number of photons to be promoted to an excited state from which it is ionised. Molecular spectra where gathered using a Time-of-Flight mass analysis of ions following jet cooling (REMPI-TOF).

Analysis of ion formations as a function of laser excitation frequency for acetylene (C_2H_2) were performed. Resonance transitions via molecular Rydberg states are detected. H^+ , C^+ , C^{2+} and $C_2H_2^+$ ions are formed in different proportions as the LASER frequency alters.

Data analysis allows characterization of Rydberg states by help of quantum simulation calculations. An ionization mechanism is proposed from analysis of the ion formation pattern.

Two-Dimensional REMPI of HCl.

Observation of a new Rydberg state.

Kristján Matthíasson, Victor Huasheng Wang, Ágúst Kvaran
Science Institute, University of Iceland, Dunhagi 3, 107 Reykjavik.

Abstract

Resonance enhanced multiphoton ionization (REMPI) of HCl gas was performed in the center of an ionization chamber. Ions were directed into a time-of-flight tube and detected by MCP to record ion yield as a function of flight time, hence mass, and/or as a function of laser radiation wavenumber.

Mass spectra were recorded for $(2 + n)$ REMPI of HCl as a function of resonance excitation energy in the $82200 - 83000 \text{ cm}^{-1}$ region to obtain two-dimensional REMPI data of a previously unreported state. Various simulations for different spectroscopic constants and Λ values revealed it to be a $\Lambda = 0$ state, which we believe to be the $^3\Sigma^+(1)$ state.

Ágrip

Fjölljóseindajónun á HCl gasi var framkvæmd í jónunarklefa. Jónunum var beint inn í flugtíma túpu og mældar með MCP til að greina jónafjölda sem fall af flugtíma og þannig massa og/eða einnig sem fall af örvunartíðni.

Massróf voru mæld á bylgjutölubílinu $82200-83000 \text{ cm}^{-1}$ til að fá tvívíddar fjölljóseinda róf af áður óþekktu ástandi. Hermanir leiddu í ljós að um var að ræða $\Lambda = 0$ ástand sem við teljum að sé $^3\Sigma^+(1)$ ástand sameindarinnar.

Thermostabilization with proline substitutions

Jóhanna Arnórsdóttir^a, Ásta Rós Sigtryggsdóttir^a, Sigríður H. Thorbjarnadóttir^b and Magnús Már Kristjánsson^{a,*}

^aDepartment of Biochemistry, Science Institute, University of Iceland, Dunhagi 3, 107 Reykjavík, Iceland. ^bInstitute of Biology, University of Iceland, Reykjavík, Iceland

A subtilisin-like serine proteinase from a psychrotrophic *Vibrio* species (VPR) shows distinct cold adapted properties, in comparison with homologous enzymes adapted to higher temperatures. Comparisons of sequences and examination of 3D structural models of VPR and related enzymes of higher temperature origin, suggested that additional prolines in loops may contribute to high temperature adaptation of the thermostable aqualysin I (AQUI) as compared to that of VPR. AQUI has four such Pro residues in loops which are not present in VPR. We previously mutated two of those sites in VPR (N238P and T268P) [1]. These enzymes are produced as pro-enzymes with an N-terminal chaperone sequence for correct folding and a C-terminal signal peptide for secretion, which are subsequently cleaved off by autocatalysis to give the mature enzyme. Interestingly, the mature VPR, has a two residues shorter N-terminus than AQUI and other heat stable enzymes.

In the present study we carried out site directed mutations on VPR to imitate two proline sites in AQUI on a loop close to the N-terminus. A single mutant, I5P, was produced as well as a double mutant N3P/I5P. Both mutants were stabilized with respect to wild-type, especially the double mutant. N-terminal amino acid sequencing revealed that the mutants have, like AQUI, a two residues longer N-terminal sequence than the wild type VPR. We suggest that the proline substitutions shift the site of autocatalysis at the N-terminus by two amino acids, apparently by rigidifying the loop close to the terminus and hence support the formation of a β -sheet that fixes the N-terminus to the main body of the protein.

Hitastöðugleikaaukning próteina samfara prólín stökkbreytingum

Subtilísín-líkur serín próteinasi úr kuldakærri *Vibrio*-tegund (VPR) sýnir eiginleika kuldaaðlögunar í samanburði við samstofna ensím sem aðlöguð eru hærra hitastigi. Samanburður amínósýruraða og þrívíddarbygginga VPR og skyldra hitakærra ensíma, bentu til að aukinn fjöldi prólína í yfirborðslykkjum kynni að stuðla að hitastigsaðlögun, þ.m.t. hitakæra próteinans aqualysins I (AQUI). AQUI hefur fjórar slíkar Pro í lykkjum sem ekki eru til staðar í VPR. Við höfum fyrr framkvæmt stökkbreytingar í tveimur þessara seta í VPR (N238 og T268P) [1]. Þessi ensím eru framleidd í frumum sem forveraprótein, með N-enda forröð sem hjálpar til við rétta svipmótun próteinsins (chaperone) og C-enda forröð sem stuðlar að seytingu próteinanna úr frumum. Þessar forraðir eru rofnar frá ensímunum með sjálfmeltu í seyttum virkum próteinösunum. Það vekur athygli að í samanburði við skyld hitakær ensím s.s. AQUI, er að N-endi virks VPR er styttri sem nemur tveimur amínósýrum.

Í þessum rannsóknum framkvæmdum við markvissar stökkbreytingar á VPR til að líkja eftir yfirborðslykkjum í AQUI með innsetningum á Pro í tveimur setum nálægt N-enda próteinanna. Bæði einfalt, I5P, sem og tvöfalt stökkbrigði, N3P/I5P, voru framleidd af ensíminu og eiginleikar þeirra ákvarðaðir. Báðar stökkbreytingarnar juku hitastöðugleika ensímsins einkum hjá tvöfalda stökkbrigðinu. N-enda raðgreining á stökkbrigðunum sýndi að gagnstætt villigerð VPR, en eins og hjá AQUI, að N-endinn var lengri sem nemur tveimur amínósýrum. Við teljum að Pro stökkbreytingarnar leiði til þess að rofstaður fyrir sjálfmeltu hliðrist um sem nemur þessum tveimur amínósýrum. Það gerist væntanlega vegna þess að lykkjan nærri N-enda verður stífari og leiðir líklega til þess að β -flötur myndast á þessum stað í próteininu, sem dregur mjög úr hreyfanleika N-enda þess.

[1] Arnórsdóttir, J., Helgadóttir, S., Thorbjarnadóttir, S., Eggertsson, G., & Kristjánsson, M. M. (2007) Effect of selected Ser/Ala and Xaa/Pro mutations on the stability and catalytic properties of a cold adapted subtilisin-like serine proteinase. *Biochim. Biophys. Acta* **1774**, 749-755.

* mmk@raunvis.hi.is

The role of the major loop in Vibrio alkaline phosphatase on cold-adaptation.

Manuela Magnúsdóttir and Bjarni Ásgeirsson (bjarni@raunvis.hi.is)
Department of Biochemistry, Science Institute, University of Iceland,
Dunhagi 3, 107 Reykjavik, Iceland.

A prerequisite for life at extreme conditions, such as at high and low temperatures, is that proteins of those organisms work properly in those particular environmental conditions. Cold adapted enzymes are interesting because of their high catalytic activity compared to mesophilic and thermophilic homologues. Alkaline phosphatase (AP) of a psychrophilic marine bacteria, Vibrio sp., catalyzes the hydrolysis of phosphate esters. The enzyme is especially interesting for its diversity in the biosphere. It is a dimer, and in the Vibrio variant each monomer has a surface loop that holds on to the next monomer. Loops are usually found on protein surfaces. In cold adapted enzymes the loops are often found to be longer compared to proteins of mesophilic organisms.

Four mutations were done on the largest surface loop of AP; two point mutations (Y346 and R336L) and two different deletions of residues within the loop. Y346F caused insignificant changes in kinetic rate constants and $T_{50\%}$, as only one hydrogen bond had been broken. Four hydrogens bonds were broken with the R336L mutation, and there was a drastic change in $T_{50\%}$, a decrease by 9°C. R336L also had higher k_{cat} , $40.7 \pm 6.6 \text{ s}^{-1}$ compared with $27.8 \pm 10.5 \text{ s}^{-1}$ for wildtype, and $35.3 \pm 12.0 \text{ s}^{-1}$ for Y346F. No big changes were observed in K_m values. The wildtype K_m was $0.017 \pm 0.004 \text{ mM}$, R336L gave $0.039 \pm 0.012 \text{ mM}$, and Y346F $0.022 \pm 0.002 \text{ mM}$. Heat tolerance of the total conformation was similar for both point mutations and the wildtype enzyme. Thus, the mutations did not make a major difference for global stability of the protein but clearly affected active site integrity. Removing four hydrogen bonds connecting the loop to the protein surface produced higher catalytic activity and shows functional connections between the loop and the active site that are being studied further.

Áhrif lykkjussvæða á kuldaaðlögun alkalísks fosfatasa úr Vibrio örveru.

Líf finnst við ýmsar öfgafullar aðstæður, svo sem mikinn hita eða kulda. Forsenda aðlögunar er sú, að prótein lífveranna starfi við þessar umhverfisaðstæður. Kuldaaðlöguð ensím eru athyglisverð að því leyti, að þau hafa hærri hvötunarvirkni miðað við samsvarandi hitakær ensím. Alkalískur fosfatasi (AP) úr kuldakæri sjávarbakteríu, Vibrio sp., er ensím sem hvatar vatnsrof fosfatestera. Ensímið er sérstaklega athyglisvert, því það finnst í flestum lífverum, oft ólíkt í mismunandi líffærum og gjarnan með ýmiss séreinkenni í hverju tilfalli. AP er tvíliða og hver undireining hefur lykkju á yfirborðinu sem heldur utan um hina eininguna. Lykkjur er oftast að finna á yfirborði próteina. Í kuldavirkum próteinum virðast lykkjurnar vera lengri í samanburði við prótein úr miðlungshitakærum lífverum.

Fjórar stökkbreytingar voru framkvæmdar á stærstu yfirborðslykkju AP; tvær punktbreytingar (Y346F og R336L) og tvær lykkjuútfellingar þar sem hluti yfirborðslykkju var felldur út. Ekki náðist að fá tjáningu eftir aðra útfellinguna, en tjáning hinna tókst vel. Y346F olli litlum breytingum á kinetískum föstum og $T_{50\%}$, en þar hafði eitt vetnistengi verið tekið út. Fjögur vetnistengi voru fjarlægð með R336L stökkbreytingunni. Þar varð lækkun í $T_{50\%}$ hitastigi um 9°C. R336L reyndist einnig vera með hærra gildi fyrir k_{cat} , $40,7 \pm 6,6 \text{ s}^{-1}$ miðað við $27,8 \pm 10,5 \text{ s}^{-1}$ fyrir villigerð, og $35,3 \pm 12,05 \text{ s}^{-1}$ fyrir Y346F. Lítil breyting varð í K_m . Villigerð mældist með $0,017 \pm 0,004 \text{ mM}$, R336L með $0,039 \pm 0,012 \text{ mM}$ og Y346F með $0,022 \pm 0,002 \text{ mM}$. Hitapól heildarbyggingar reyndist vera nokkuð svipað fyrir punktbreytingarnar tvær miðað við villigerð. Breytingarnar hafa því ekki haft mikil áhrif á afmyndun ensímsins í heild. Útfelling fjögurra vetnistengja leiddi til aukinnar hvötunarvirkni og sértækni. Lykkjan virðist halda í undireiningarna þannig saman að áhrifa gætir í virknisetinu.

tert-butyldimethylsilyl protection of chitosan and synthesis of *N*-(2-(*N,N,N*-trialkylammoniumyl)-acyl) derivatives.

Vivek Gaware, Ögmundur V. Rúnarsson, Berglind E. Benediktsdóttir, Mar Másson

*Faculty of Pharmaceutical Sciences, School of Health Sciences, University of Iceland, Reykjavik
Iceland.*

Introduction: Chitosan and chitosan derivatives have been investigated as antibacterial nanomaterials. Low solubility of chitosan in organic solvents is a major limitation for the synthesis of chitosan derivatives. Recently we have demonstrated that the di-3,6-O-tertbutyldimethylsilyl-chitosan (TBDMS-chitosan) is a useful precursor for synthesis that has excellent solubility in organic solvents.

Objective: Aim of the current work was to optimize the reaction conditions for the synthesis of TBDMS-chitosan and use this precursor for efficient synthesis of *N*-(2-(*N,N,N*-trialkylammoniumyl)-acyl)-chitosan and *N*-(2-(*N*-pyridiniumyl)-acyl)-chitosan as potential antibacterial agents.

Results: In the original protocol, chitosan polymer mesylate salt was reacted with 10 fold excess TBDMSCl in DMSO to obtain full silylation of the 6-O and 3-O hydroxyl groups. However it was difficult to reproduce or improve this procedure. Initial investigation different reaction conditions commonly yielded material that was only partially silylated and therefore poorly soluble in organic solvent. A key step in a improved procedure was recrystallization of the mesylate salt and with this starting material it was possible to fully O-silylate chitosan with 2.5 fold excess of TBDMSCl and reduced reaction time. The peaks for the sugar backbone were then fully resolved in H-1 NMR spectra (CDCl₃). Two peaks of equal intensity at 0.890 and 0.903 ppm for the tertbutyl groups and four peaks at 0.047, 0.06, 0.099, 0.125 ppm for the methyl groups, were observed. These results clearly demonstrated that there was 100% substitution of the hydroxyl groups and this was also confirmed by IR.

The fully silylated compound reacted with BrCH₂COBr or ClCH₂COCl in chloroform to obtain the desired fully *N*-acylated product. The acyl product was reacted with trialkylamine and deprotected with conc HCl/EtOH to obtain *N*-(*N,N,N*-trialkylammoniumyl)-acyl)-chitosan. These fully substituted and thoroughly characterized materials are now available for antibacterial studies.

C-6 oxidation of N,N,N-trimethylchitosan (TMC) and.

Vivek Gaware, Ögmundur V. Rúnarsson, Rahel Regli, Jón Guðmundsson, Mar Másson

*Faculty of Pharmaceutical Sciences, School of Health Sciences, University of Iceland, Reykjavik
Iceland.*

Introduction: Trimethylated chitosan (TMC) is an *N*-quaternary chitosan derivative, which has been reported as promising nanomaterial, that can be used as adsorption enhancer for oral, nasal or pulmonary drug delivery. This material also has significant antibacterial activity at pH 7.4, whereas unmodified chitosan is not active under these conditions. However the main limitation of currently used methylation procedure is the lack of selectivity, which leads to mixed *N*- and *O* methylation.

Objective: To develop *N*-selective procedure for synthesis TMC and investigate further modification of these materials by 6-*O*-oxidation and *O*-acylation.

Results: The conventional approach for methylation of chitosan is based on reaction with iodomethane (MeI) in NMP. Two step reaction under these conditions yielded material with > 0.7 degree of *N,N,N*-trimethylation and > 0.5 degree of *O*-methylation. The *O*-methylation reduced the aqueous solubility and thus it is not feasible to produce material with higher degree of trimethylation by this procedure. Changing the solvent system to 50/50 H₂O/DMF dramatically increased *N* selectivity of the reaction but in this case greater excess of MeI was required. Investigation of reaction conditions such as reagent excess, number of additions, reaction temperature and time lead to final optimal conditions that involved four additions of 6 and 3 eq of MeI and NaOH respectively, with 48 hours interval at room temperature. This gave material with 0.81 and 0.88 degree of *N,N,N*-trimethylation without any *O*-methylation. This material was fully characterized by COSY and HSQC NMR. This material is highly soluble in aqueous solution and due to lack of *O*-methylation the 6-*O* hydroxyl groups are available for further modification. We have now shown that 6-*O* oxidation, using the TEMPO reagent, and 6-*O* acylation is possible with highly trimethylated material.

Conclusion: We have developed simple procedure for *N*-selective modification of chitosan. This material is available for further modification and antibacterial studies.

Food safety and added value of Icelandic fish meal Determination of toxic and non-toxic arsenic species in fish meal

Ásta Heiðrún E. Pétursdóttir¹, Hrönn Jörundsdóttir¹, Sasan Rabieh², Helga Gunnlaugsdóttir¹

The aim of this study is to determine total arsenic concentration in Icelandic fish meal and to develop an analytical technique to evaluate the number and quantity of toxic and non-toxic arsenic species in fish meal. Total arsenic concentration was determined in three different Icelandic fish meal types (capelin, herring and blue whiting meal), the concentration differed for each fish meal type ranging from 2,5-16,2 mg As/kg. Total arsenic concentration has been compared for two seasons whereas the difference in concentration is not statistically significant. A sequential extraction method, followed by ICP-MS and HPLC-ICP-MS analysis, was developed for the speciation of arsenic species in fish meal. The extraction method involved three steps which produced three As fractions: lipid-soluble arsenicals (non-polar), water-soluble arsenicals (polar) and the As residue. This method was applied to samples of each fish meal type with recovery rates ranging from 82-111%. Preliminary results of speciation show that arsenobetaine (AB) is the main constituent in the water-soluble fraction and other arsenicals can be found in lesser magnitude.

Fæðuöryggi og aukið verðmæti íslensks fiskmjöls Ákvörðun eitraðs og óeittraðs arsens forma í fiskimjöli

Markmið rannsóknarinnar er að greina heildar magn arsens í íslensku fiskimjöli og þróa greiningartækni til að meta fjölda og magn eitraðra og hættulausra arsen forma í fiskimjöli. Heildar arsen styrkur var ákvarðað í þrem íslenskum fiskimjöltegundum (loðu-, síld- og kolmunnamjöli) og var magnið mismunandi milli tegunda, frá 2,5 – 16,2 mg/kg. Heildar arsen styrkur hefur einnig verið ákvarðaður í tveim árstíðum en munurinn í styrk milli árstíða var ekki tölfræðilega marktækur. Raðbundin úrhlutunaraðferð var þróuð fyrir fiskimjöl þar sem mismunandi arsen form voru að lokum greind með ICP-MS og HPLC-ICP-MS. Úrhlutunaraðferðin byggist á þrem skrefum þar sem þrjár mismunandi lausnir fást fram þar sem arsenformin hafa mismunandi eðliseiginleika: fituleysanleg arsen efni (óskautuð), vatnsleysanleg arsen efni (skautuð) og rest. Þessi aðferð var notuð fyrir allar gerðir fiskmjöls þar sem heimturnar voru á bilinu 82-111%. Frumniðurstöður formgreiningar sýna að arsenobetaine (AB) er ríkjandi í vatnsleysanlega hlutanum og önnur arsen efni í hlutfallslega minna magni.

1: Matís ohf, Skúlagata 4, 104 Reykjavík, Iceland

2: University of Bayreuth, Universitätsstraße 30, 95447 Bayreuth, Germany

Einangrun og lífefnfræðilegir eiginleikar himnufleka úr þarmabeckjufrumum Atlantshafsporsks (*Gadus morhua*).

Gudjón Andri Gylfason¹, Erna Knútsdóttir, and Bjarni Ásgeirsson²

Lífefnfræðistofa, Raunvísindastofnun Háskóla Íslands, Dunhagi 3, 107 Reykjavík, Iceland.

Ágrip

Himnuflekar eru glýkósphingólípíð/kólesteról rík himnuhneppi sem hafa verið rannsökuð með auknum áhuga vísindamanna síðustu tvo áratugi. Hinsvegar, eftir því sem við best vitum hafa engar rannsóknir á himnuflekum verið framkvæmdar á þarmabeckjufrumum geislaugga (*Actionoerygi*). Það var því markmið okkar að einangra og athuga lífefnafræðilega eiginleika himnufleka úr þarmabeckju Atlantshafsporsks (*Gadus morhua*) til að staðfesta tilvist þeirra og hvort þeir sýndu sömu lífefnafræðilegu eiginleika, m.t.t. próteina og lípíða, samanborið við aðrar lífverur. Einangrunarferlið var metið með því mæla virkni áður skilgreindra ensíma ólíkra himnulíffæra m.a. alkalískan fosfatasa (AP) og lúsíne amínópeptíðasa sem bæði eru vel skilgreind burstalagshimnu og himnufleka ensím. Lípíð greining var framkvæmd annars vegar með ³¹P-NMR og hins vegar með TLC (thin layer chromatography) og próteinmengjafræðin var framkvæmd með MALDI-TOF (Matrix-assisted laser desorption/ionization-time of flight) and LC-ESI (Liquid-chromatography electrospray ionization) massagreiningum úr trypsín-meltum próteinböndum sem höfðu verið rafdrengin í SDS-PAGE hlaupi.

Virkni AP sýndi aukningu í bæði burstalagshimnum auk himnufleka, ³¹P-NMR mælingar gáfu til kynna hærra magn sphíngómýelíns og lægra magn fosfatidylkólíns í þessum himnum í samanburði við aðrar lífverur, þar sem sphíngómýelín var algerlega ríkjandi auk kólesteróls. Nokkur prótein hafa verið auðkend úr himnuflekum s.s. amínópeptíðasi-N, prohibitin, beta-actin og villin-2. Með þessum niðurstöðum, sem sýna alla helstu lífefnfræðilega eiginleika sem áður hefa verið birtir, teljum við okkur hafa staðfest tilvist þeirra í burstalagi þarmabeckjufruma Atlantshafsporsks.

Isolation and biochemical characterization of lipid rafts from Atlantic cod (*Gadus morhua*) intestinal enterocytes.

Gudjón Andri Gylfason¹, Erna Knútsdóttir, and Bjarni Ásgeirsson²

Department of Biochemistry, Science Institute, University of Iceland, Dunhagi 3, 107 Reykjavik, Iceland.

Abstract

Membrane lipid rafts are glycosphingolipid/cholesterol-enriched membrane micro-domains that have been extensively studied during the past two decades. However, to the best of our knowledge, no studies have yet been performed on lipid rafts from the intestinal brush border membrane (BBM) of ray-finned fishes (*Actinoerygii*). Our aim was to isolate and perform biochemical characterization of lipid rafts from the BBM of Atlantic cod (*Gadus morhua*) intestinal enterocytes to confirm their existence and if they showed similarity to lipid rafts from other species in terms of lipid and protein content. To validate the isolation process, we assayed marker enzymes for sub-cellular organelles, including alkaline phosphatase (AP) and leucine aminopeptidase, both well-known marker enzymes for BBM and lipid rafts. We also performed lipid analysis on BBM and lipid rafts by thin-layer chromatography and ³¹P-NMR. Proteomics studies were performed by MALDI (Matrix-assisted laser desorption/ionization) and LC-ESI (Liquid-chromatography electrospray ionization) mass spectrometry from trypsin digested SDS-PAGE samples.

All methods showed enrichment of AP in both BBM and lipid rafts fraction, ³¹P-NMR gave higher content of sphingomyelin than previously reported and lower content phosphatidylcholine in the BBM, but sphingomyelin was highly dominant in the lipid rafts together with cholesterol. Various proteins have been associated with our lipid raft preparation such as aminopeptidase-N, prohibitin, beta-actin, and villin 2. The existence of lipid rafts containing previously reported lipid raft proteins has, therefore, been confirmed.

1 gudjongy@hi.is; 2 bjarni@raunvis.hi.is

High-Density Algal Photobioreactors Using Geothermal Supplied Energy and CO₂

Eric Knight, Center for Systems Biology, University of Iceland

eric@hi.is

Every year, geothermal wells in Iceland release hundreds of thousands of tonnes of carbon dioxide into the atmosphere, and is expected to increase in the coming years. The convergence of light-emitting diode(LED) technology, photobioreactor design, algal biotechnology and low energy processing costs make biological fixation of this CO₂ into fine chemicals (pharmaceuticals, cosmetics, coloring agents, food supplements, etc) feasible. With the rapidly dropping cost of LEDs, commercial versions of these LED-based PBRs are a realistic possibility. The conditions that prevail at geothermal power-plants represent especially favorable economic conditions to build a fine chemical industry in Iceland. The goals of our current research are 1) to build, test and optimize the core unit of a new generation of LED-based PBRs, 2) to lay out the subsequent scale-up process, and 3) to examine the spectrum of alga that can be used in the designed system. The establishment of such an industry in Iceland would significantly add to the diversity of industries operating in Iceland, and in addition, would form the basis for globalization of such technology to other areas of the world that will develop geothermal power in the coming years.

Upphaf landnáms lesið með kolefni-14 aldursgreiningum

Páll Theodórsson

Raunvísindastofnun Háskólans

Tímatal landnáms á Íslandi er í uppnámi. Nýtt yfirlit yfir kolefni-14 aldursgreiningar á fornum mannvistarleifum frá ýmsum stöðum á Íslandi sýna að landnám er mun eldra en Ari fróði segir, allt að 200 árum eldra. Þessu er almennt hafnað af íslenskum fræðimönnum. Rætt er hvernig má komast til botns í málinu með mjög nákvæmum mælingum í vökvasindurkerfi. Lýst er hvernig fornum lífrænum mannvistarleifum, viðarkolum og dýrabeinum, er breytt í benzen, sem er mæliefni vökvasindurkerfa, þar sem kolefni-14 geislavirknin er mæld. Kerfið sem oftast er notað nefnist Quantulus. Það kostar um 27 milljónir króna og vegur 1000 kg. Við Raunvísindastofnun Háskólans hefur síðustu ár verið hannað og prófað mun einfaldara vökvasindurkerfi, ICELS, sem er sérsniðið fyrir aldursgreiningar, vegur 30 kg og kostar í framleiðslu innan við 0,5 milljónir króna. Rannsóknasjóður Rannís hefur veitt 3ja ára styrk til að rannsaka frumbyggð á Íslandi og hopun skóga með því að aldursgreina fornar kolagrafir. Síðar verða bein húsdýra úr fornum ruslahaugum væntanlega aldursgreind. Vegna yfirburðakosta ICELS er líklegt að selja megi þessi tæki erlendum rannsóknarstofum og að íslensk aldursgreiningastofa geti skilað góðum hagnaði af nákvæmum aldursgreiningum fyrir erlenda vísindamenn.

Sveigjanleiki kulda- og hitakærra subtilisin-líkra serín próteinasa metinn með flúrljómunarbælingu

Ásta Rós Sigtryggisdóttir, Jóhanna Arnórsdóttir og Magnús Már Kristjánsson*
Lífefnafræðistofa, Raunvísindastofnun Háskólans, Háskóli Íslands, Dunhagi 3, 107 Reykjavík, Ísland

Talið er að byggingarlegar forsendur hitastigsaðlögunar próteina feli í sér aðlögun á sameindasveigjanleika þeirra. Af þessum sökum er talið að hærri hvötunarvirkni kuldaaðlagaðra ensíma í samanburði við samstofna hitaaðlögðu ensím sé vegna þess að þau búi yfir meiri byggingarlegum sveigjanleika. Til þess að meta mögulegan breytileika á heildar sveigjanleika milli tveggja samstofna subtilisín-líkra serín próteinasa úr örverum af mismunandi uppruna m.t.t. umhverfishita; VPR úr kuldakærri *Vibrio* tegund og aqualysin I (AQUI) úr hitakærri örveru, höfum við mælt Trp flúrljómunarbælingu þeirra með akrýlamíði við mismunandi hitastig.

Samanburður á aminósýruröðum og þrívíddarbyggingum af VPR og AQUI sýndu að þrjár af fjórum Trp aminósýrum í VPR eru á samsvarandi stöðum í byggingu AQUI. Fyrir frekari samanburð var fjórða samsvarandi setinu í AQUI stökkbreytt yfir í Trp (AQUI-Y191W). Ennfremur var framkölluð stökkbreyting á VPR (VPR Δ C), þar sem C-endinn var stuttur til líkingar við AQUI. Stöðugleiki og hvötunareiginleikar vegna þessara stökkbreytinga voru metnir. Mælingarnar sýndu tiltölulega litla breytingu á stöðugleika og hvötunareiginleikum stökkbreytinganna í samanburði við samsvarandi villigerð ensímanna. Niðurstöðurnar benda til þess að stökkbrigðin séu góðir fulltrúar fyrir upprunalegu ensímin til mælinga á flúrljómunarbælingu. Tilraunirnar á flúrljómunarbælingu voru framkallaðar á hitastigsbilinu 10 – 55 °C. Niðurstöðurnar sýndu minni áhrif bælingar af völdum akrýlamíðs á AQUI-Y191W við öll hitastigin, sem gefur til kynna stífari myndbyggingu heldur en hjá VPR Δ C. Þessar niðurstöður eru í samræmi við þær tilgátur um að hitastöðug ensím úr hitakærum örverum hafa stífari myndbyggingu en samsvarandi prótein úr kuldakærum lífverum.

Flexibility of cold and heat adapted subtilisin-like serine proteinases evaluated with fluorescence quenching

Ásta Rós Sigtryggisdóttir, Jóhanna Arnórsdóttir and Magnús Már Kristjánsson*
Department of Biochemistry, Science Institute, University of Iceland, Dunhagi 3, 107 Reykjavík, Iceland

It is proposed that molecular mechanisms of temperature adaptation of proteins involve adjustment of their molecular flexibility. Thus, the higher catalytic activity usually observed for cold adapted enzymes when compared to homologs from thermophiles is believed to reflect their higher molecular flexibility. To assess a potential difference in global flexibility between two homologous subtilisin-like proteinases of different temperature origins; VPR from a psychrophilic *Vibrio* sp. and aqualysin I (AQUI) from a thermophile, we have measured their Trp fluorescence quenching by acrylamide at different temperatures. Comparisons of sequences and 3D structural models of VPR and AQUI showed that of the four Trp residues in VPR, three are at corresponding sites in the structure of AQUI. To aid in the comparison, the fourth corresponding site on AQUI was mutated to Trp (AQUI-Y191W). Furthermore, a truncated mutant of VPR (VPR Δ C) was produced, deleting an extended C-terminal sequence, not present in the active form of AQUI. Stability and kinetic properties of these mutants were determined. These measurements showed relatively little changes in catalytic properties and stability resulting from the mutations compared to the corresponding wild type enzymes. The results suggest that the mutants are good representatives for the native enzymes in the fluorescence quenching experiments. The fluorescence quenching experiments were carried out at temperatures between 10-55 °C. The results demonstrate a lower quenching effect of acrylamide on AQUI-Y191W at all temperatures, indicating that it may have a more rigid structure than the VPR Δ C. These results are in line with the hypothesis that heat stable enzymes from thermophiles have more rigid structure than the corresponding proteins from psychrophilic organisms.

* mmk@raunvis.hi.is

Kítínafleiður og kalsíumfosföt til beingræðslu

Chitin derivatives and calcium phosphates for bone regeneration

Gissur Örlygsson¹, Mariam Darai¹, C.-H. Ng², Jón M. Einarsson², Benedikt Helgason³, Eggert Gunnarsson⁴, Atli Dagbjartsson⁵, Sigurbergur Kárason^{5,6}, Elín H. Laxdal^{5,6,7}, Ólafur E. Sigurjónsson^{8,9}, Ramona Lieder^{1,8}, Halldór Jónsson jr.^{4,6},

Jóhannes Gíslason²

¹Nýsköpunarmiðstöð Íslands, Keldnaholt, 112 Reykjavík, gissuro@nmi.is, ²Genís ehf., Vatnagarðar 18, 104 Reykjavík, ³Institute for Surgical Technology and Biomechanics, University of Bern, Switzerland, ⁴Tilraunastöð Háskóla Íslands í meinafræði, Keldum, 112 Reykjavík, ⁵Landspítali-Háskólasjúkrahús, Fossvogi, 108 Reykjavík, ⁶Læknadeild Háskóla Íslands, Reykjavík, ⁷Department of Surgical Sciences, University of Bergen, Bergen, Norway, ⁸Blóðbankinn, Snorrabraut 60, 105 Reykjavík, ⁹Tækni- og verkfræðideild, Háskólinn í Reykjavík, Ofanleiti 2, 103 Reykjavík

Ágrip

Amínó fjölsykran kítín er önnur algengasta fjölliðan í náttúrunni á eftir sellulósa. Úr kítíni má vinna ýmsar tegundir amínó fjöl- og fásýkra. Komið hefur í ljós að ákveðnar amínó fásýkrur örva beinmyndun [1]. Hugsanlegt er að þær hafi áhrif á sérstök prótein, kítínasalík prótein (CLP), sem síðan hafi áhrif á frumur til nýmyndunar beins. Þessi virkni amínó fásýkranna er nýtt í þróun á efnum til beinalækninga sem og til þróunar á húðum fyrir málmígæðlinga. Í samsettum efnum er lífvirkum amínó fásýkrum fléttað saman við amínó fjölsýkrur og blöndur kalsíumfosfatefna. Samspil amínó fásýkranna og kalsíumfosfatefnanna á smásæjum skala, ásamt efnahvörfum kalsíumfosfatefnanna sem leiða að endingu til myndunar hýdroxýapatíts, segja fyrir um efnisfræðilega eiginleika efnisins. Þannig eru bæði lífvirkni og fjölliðueiginleikar kítínafleiðanna notuð á virkan hátt, sem og efnahvörf og eiginleikar kalsíumfosfatefnanna. Þessi samsettu efni má framleiða til innspýtingar með sprautu, sem einskonar sparsl, eða sem formaða ígræðlinga, allt eftir þörfum. Gert er ráð fyrir að efnin víki smátt og smátt fyrir náttúrulegu beini í líkamanum. Í húðun á málmígæðlingum er leitast við að nýta lífvirkni amínó fásýkranna til að hraða því að bein vaxi upp að ígræðlingi og festi hann. Húðunarefnið er amínó fjölsýkra sem myndar filmu á málmyfirborðinu. Filman leysist svo upp samhliða því sem bein vex uppáð málminum. Í erindinu verður skýrt frá nokkrum verkefnum þar sem kítínafleiður og kalsíumfosföt og blöndur þeirra eru þróuð til notkunar í beingræðslu.

Abstract

The polysaccharide chitin is, after cellulose, the second most abundant organic polymer in nature. Many different types of aminopoly- and oligosaccharides can be processed from chitin. Certain specific amino oligosaccharides have been found to modulate bone regeneration [1]. In bone tissue, their mode of action is believed to be mediated through chitinase like proteins (CLPs), which in turn stimulate cells involved in bone regeneration. This effect of the oligomeric aminosugars is utilized in the development of new composite materials for bone healing as well as new coatings for metallic implants. In composite materials the bioactivity of the oligomeric aminosugars is combined with polymeric aminosugars and a mixture of different calcium phosphates. Nanoscale interactions of the aminosugars and the calcium phosphate materials, as well as the chemical reactions of the calcium phosphates to hydroxyapatite, dictate the macroscopic properties of the materials. In this way the bioactivity and the polymeric properties of the chitin derivatives, as well as the chemical reactions of the calcium phosphates, is used in an active manner. The composite materials can be injected, applied as pastes or formed to implants, depending on the planned application. After implantation, the composites are gradually absorbed by the organism and replaced by natural bone. The aim of coating metallic implants is to utilize the bioactivity of the chitooligosaccharides to speed up the fixation of implants in bone. The coating material is a polymeric aminosugar that forms a film on the metallic surface after application. The film is then absorbed as new bone grows around the implant. The presentation will describe some projects where chitin derivatives, calcium phosphates and their mixtures are developed for use in bone regenerative implants.

[1] R.A.A. Muzzarelli. Chitins and chitosans for the repair of wounded skin, nerve, cartilage and bone. *Carbohydrate Polymers* 76 (2009) 167-182.

Chemoenzymatic Synthesis of Enantiopure Structured Triacylglycerols Containing DHA at the Mid Position

Rakel Sæmundsdóttir, Björn Kristinsson and Guðmundur G. Haraldsson Science Institute, University of Iceland, Dunhaga 3, 107 Reykjavík, Iceland

Abstract

Structured triacylglycerols (TAG) constituting saturated medium chain fatty acids (MCFA) at the outer positions and a long-chain biologically active polyunsaturated fatty acid (PUFA) at the mid-position of the glycerol backbone have gained increased attention of scientists as dietary and health supplements. Recently, we have described a highly efficient synthesis of structured MLM type (medium-long-medium) TAG comprising EPA or DHA at the mid position by a two-step chemoenzymatic process using immobilized *Candida antarctica* lipase (CAL). A six step chemoenzymatic process has been developed for synthesis of ABC type (MLM') TAG starting from enantiopure solketal: a benzyl ether protection of the hydroxyl group, deprotection of the isopropylidene moiety, introduction of a pure stearic acid to the primary hydroxyl group of the resulting 1-O-benzylglycerol by CAL, and a catalytic hydrogenation of the benzyl protective group to afford a regioisomerically pure 1-MAG. A subsequent introduction of a second different saturated FA (varying from acetic acid to palmitic acid) exclusively to the vacant primary hydroxyl group by CAL provided a non-symmetric regioisomerically pure 1,3-DAG that was finally acylated at the mid position by pure DHA by the EDCI coupling reaction. Both antipodes of enantiopure TAG described above have been synthesised. All products and intermediates were isolated in good to excellent yields and fully characterised by traditional organic synthesis methods.

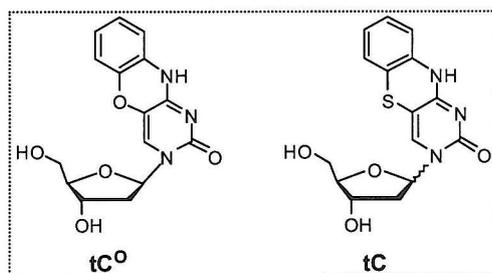
Ágrip

Undanfarið hafa stöðubundin þríglýseríð sett mettuðum miðlungslöngum fitusýrum í endastöðum og löngum lífvirkum fjörlómettuðum fitusýrum í miðstöðu vakið aukna athygli fyrir notkunarmöguleika þeirra sem heilsusamleg fæðubótarefni. Áður höfum við birt niðurstöður mjög skilvirkar tveggja skrefa efnasmíðar á samhverfum stöðubundnum þríglýseríðum af MLM gerð (miðlungs-langar-miðlungs) með EPA og DHA í miðstöðu þar sem notast var við kyrrsettan *Candida antarctica* lípasa (CAL). Sex skrefa efnasmíð, sem byggir bæði á hefðbundnum lífrænum aðferðum og ensímhvötuðum, hefur nú verið þróuð til að smíða ósamhverf þríglýseríð af ABC gerð (MLM'). Byrjað var á að smíða hendið 1-O-bensýlglyseról úr handhverfuhreinu

sólketali, á endastæða hýdroxýlhópurinn var svo sett sterínsýra með aðstoð CAL og bensýlhópurinn fjarlægður með hvataðri vetnun til myndunar á hendnu 1-mónóglýseríði. Því næst var önnur frábrugðin mettuð fitusýra (allt frá ediksýru til palmitínsýru) sett inn á lausa endastæða hýdroxýlhópurinn með CAL til myndunar á ósamhverfu hendnu 1,3-díglýseríði sem var svo asýlað í miðstöðu með hreinu DHA með EDCI kúplunarharfi. Báðar handhverfur þeirra þríglýseríða sem hér hefur verið lýst hafa verið smíðaðar. Öll myndefni og milliefni voru einangruð í góðum til frábærum heimtum og hefur bygging þeirra verið staðfest með hefðbundnum aðferðum.

Samanburður á flúrljómandi núkleósíðum og áhrif α/β -víxlhverfa á flúrljómun SNP-nema

Haraldur Garðarsson og Snorri Þór Sigurðsson
Raunvísindastofnun, Háskóli Íslands, Dunhagi 3, 107 Reykjavík



Flúrljómandi kirnisleifin (flúrorósíðið) tC^O er forveri ζ^f , flúrosíðs sem þegar hefur verið lýst. Fyrst að pyrrolidine hringur ζ^f er ekki tengdur inn í arómatíska kerfi basans, ætti því að vera mögulegt að nota flúrljómun phenoxazine (tC^O) á sama hátt og ζ^f . Það myndi einfalda efnasmíð gríðarlega, þar sem mikil vinna er fólgin í því að tengja pyrrolidine hringinn inn á phenoxazine grindina, við smíði á ζ^f . Því var tC^O innleitt inn í tvíþátta kjarnsýru (DNA) og áhrif hliðstæðra basa á misþörunar greiningu athuguð. Í ljós kom að hliðstæðir basar hafa mikil áhrif á flúrljómun flúrosíðsins líkt og í tilfalli ζ^f . Einnig kom í ljós að tC^O er mun lakari SNP-nemi en ζ^f , þar sem að í mörgum basaröðum gat phenoxazine ekki greint hvaða basi var á mótstrendingnum. Í kjölfar þess var ákveðið að athuga hvernig flúrljómun phenothiazine (β - tC), sem er náskyld flúrorósíð, myndi breytast með tilliti til hliðstæðra basa. Við smíðar á phenothiazine er einangrun α - og β -víxlhverfa nauðsynlegt skref (β er náttúrulega form núkleósíða í DNA). Við ákváðum að innleiða báðar víxlhverfur inn í DNA og athuga flúrljómun þeirra. Þar sem basin á α -víxlhverfunni ætti ekki að staflast inn í tvíþætt DNA, var fyrirfram ekki búist við því að hliðstæðir basar hefðu nokkur áhrif á flúrljómun. Sömuleiðis, vegna stöðu basans, var ekki búist við því að α -víxlhverfan myndi mynda vetnistengi við mótstæða strendingin og þar af leiðandi gæti víxlhverfan ekki greint í sundur um hvaða mótstæða basa væri um að ræða.

Comparison of fluorescent nucleosides as SNP probes and the effects of α/β -anomerism

The fluorescent nucleoside phenoxazine (tC^O) is a precursor for the previously described ζ^f . Since the pyrrolidine ring of ζ^f is not conjugated into the aromatic system of the nucleobase, we hypothesized, that we could utilize the fluorescence of phenoxazine and thereby simplify the synthetic effort needed to afford ζ^f . We therefore incorporated tC^O into DNA and examined the effects of flanking sequence on mismatch detection. We found that not only does the flanking sequence have a large effect on the emission properties of phenoxazine, but that it is an inferior SNP probe to ζ^f as there are many flanking sequences in which tC^O is unable to identify its base-pairing partner. We subsequently examined, using a smaller subset of oligos, whether or not the closely related phenothiazine (β - tC) nucleoside would show similar results as phenoxazine. During the synthesis of phenothiazine, the α and β anomers (β is the natural form in DNA) are separated. We

incorporated both anomers into DNA and examined the fluorescence. The α -anomer is not stacked into the DNA duplex and the emission spectrum is therefore not expected to change in accordance with the flanking sequence. Furthermore, the α -anomer, due to the position of the base, is not expected to form hydrogen bonds with the counterstrand, and should therefore not be able to distinguish its base-pairing partner.

Smíði tilraunabúnaður í eðlisefnafræði - til auðkenningar á sameindum fyrir rafeindastýrða örprentun

Elías. H. Bjarnason, Benedikt Ómarsson, Oddur Ingólfsson
*Raunvísindadeild Háskólans, Efnafræðistofa,
Dunhaga 3, 107 Reykjavík, Ísland*

Rafeindastýrð örprentun sameinda (e. Electron controlled chemical lithography; ECCL) byggir á eiginleika rafeinda með mjög lága hreyfiorku til að koma af stað valvísu niðurbroti og/eða endurröðun sameinda. Valvísinni er stýrt með hreyfiorku rafeindanna á nokkurra rafeindavolta bili eða með vali á virkum hópum ætlaðrar sameindar. Eitt dæmi um ECCL er myndun tengja milli sameinda og yfirborðs með smjúgandi rafeindum frá oddi smugsjár (e. scanning tunneling microscope) sem mynda þá mynstur með tiltekna efnafræðilega og eðlisfræðilega eiginleika.

Við kynnum hér hönnun á tækjabúnaði, nú þegar í smíðum, sem þjónar þeim tilgangi að auðkenna heppilegar sameindir fyrir ECCL. Slíkar sameindir þurfa að búa yfir góðri valvísi og mjög góðri skilvirkni m.t.t. rofa tengja sem virkjuð eru af rjúfandi rafeindaálagningu (e. dissociative electron attachment) ásamt því að viðhalda valvísinni og skilvirkninni í návist við þéttefnis-klasa eða við aðloðun yfirborða.

Tækjabúnaðurinn samanstendur af sérsmiðuðum lofttæmiklefa. Hönnunin byggir á hefðbundinni tilrauna aðferð, þar sem rafeindageisla er beint hornrétt á sameindageisla, sem veldur því að sameindirnar jónast. Í framhaldi af því er jónum beint í flugtíma massagreini. Orkubil rafeindageislans mun vera frá 0 til 20 eV með 100 meV upplausn. Sameindageislinn mun getað innihaldið hreinar sameindir eða sameindir sem komið er fyrir í einsleitum eða misleitum sameindaklasa. Sameindir með lágan gufunarþrýsting og með allt að 100 kDa sameindamassa munu koma til greina. Jafnframt er ætlunin að bæta við sérsmiðuðum búnaði í massagreinin sem mun bæta möguleika á því að mæla líftíma jóna.

Construction of an instrument to identify suitable molecules for ECCL – work in progress

E. H. Bjarnason, B. Ómarsson, Oddur Ingólfsson
*Science Institute - University of Iceland, Chemistry Division,
Dunhaga 3, 107 Reykjavik, Iceland*

Electron controlled chemical lithography (ECCL) is based on the ability of low energy electrons to initiate and effectively drive selective bond cleavage processes in molecular systems. The selectivity is being controlled by the kinetic energy of the electron within the range of few electron-volts or by the choice of functional groups of the target molecule. An example of an ECCL process, is where molecules are linked to a substrate by chemical reactions induced by injecting tunneling electrons from a STM tip, resulting in microscopically patterned surfaces with specific chemical or physical properties.

We present a design of an instrument, currently under construction, that serves the purpose of identifying, in an efficient way, suitable molecular targets for use in ECCL. Such candidates need to show high selectivity and high efficiency with regards to bond rupture induced by dissociative electron

attachment, and should maintain that selectivity and efficiency when coupled to an environment in clusters, in condensed phase or adsorbed on surfaces.

The instrument comprises a custom designed differentially pumped high vacuum chamber. Its design is based on a typical crossed electron- and molecular beam electron attachment ionization process combined with time-of-flight mass spectrometer (TOF-MS), with electron-beam energy range of 0 to 20 eV with sub 100 meV resolution. Molecules may be introduced in different environments: isolated or embedded in homogeneous- or heterogeneous molecular clusters and large low vapor pressure molecules with molecular mass up to 100 kDa. Furthermore, a *transferable ion optics system* in the TOF-chamber, will measure the lifetime of ions.

Veirudrepandi áhrif Pensíms gegn Herpes Simplex Veiru típu 1.

Hilmar Hilmarsson¹, Bjarki Stefánsson¹, Jón Bragi Bjarnason.^{1,2} og Ágústa Guðmundsdóttir^{1,3}

¹Lífefnafræðistofa Raunvísindastofnunar. (Science Institute, Biochemistry Department)

²Raunvísindadeild, Verkfræði- og náttúruvísindasviðs H.Í.

³Matvæla-og næringarfræðideild Heilbrigðisvísindasviðs H.Í.

Ágrip.

Fyrri rannsóknir hafa sýnt að Pensím, sýrustigstillt glýserol-vatnslausn með trypsíni úr þorski, eins og PENZIM Lotion varan, hefur veirudrepandi virkni gegn influensu A veirum bæði í tilraunaglösnum og á húð. Í þessari rannsókn var veirudrepandi virkni Pensíms könnuð gegn herpes simplex veiru típu 1 (HSV-1). Sýking af völdum HSV-1 er ólæknanleg og leggst veiran í dvala í taugahnoðum í líkamanum. Algengasti kvillin sem veiran veldur eru frunsur, en einnig getur veiran valdið alvarlegum augnsýkingum og heilabólgu. Hægt er að halda veirunni í skefjum með acyclovir lyfjaafbrigðum, en í dag eru komnir fram ónæmir stofnar sem veirulyf vinna ekki á. Í rannsókninni var könnuð veirudrepandi áhrif Pensíms m.t.t. styrks og tíma gegn HSV-1 í tilraunaglösnum. Pensími í ákveðnum styrk var blandað við veirulausn og veirudrepandi virkni könnuð í mismunandi styrk og í mislangan tíma við 37°C. Veirutíter var fundinn með því að sá tífoldum þynningum af blöndum á Vero frumur. Títer (\log_{10}) á veirulausnum sem voru meðhöndlaðar með Pensími var dreginn frá títer viðmiðunarlausna og þannig fengin út veirudrepandi virkni. Niðurstöður sýna að Pensím er virkt gegn HSV-1 og sem dæmi fæst u.þ.b. milljón-föld lækun á veirutíter eftir 10 mínútna meðhöndlum með 90 U / ml af Pensími við 37°C.

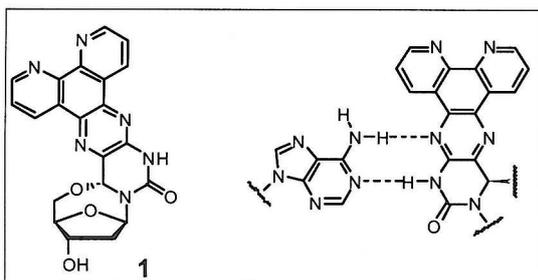
Summary.

Previous studies have shown that Penzyme, a pH controlled glycerol-water solution of cod trypsin, much like the PENZIM Lotion consumer product, has virucidal activities on influenza A viruses, both *in vitro* and on skin tissue. In this study the virucidal activities of Penzyme was further tested against herpes simplex virus type 1 (HSV-1) *in vitro*. Infection by HSV-1 is incurable and the virus becomes latent in neural ganglia in the human body. Cold sores (blisters) is the most common herpes disease symptoms, but the virus can also cause severe infections in eyes and encephalitis. Infections by HSV-1 can be controlled by antiviral drugs, usually acyclovir derived drugs that can reduce the viral load in the body, but today a drug resistance HSV-1 strains have emerged. In this study the virucidal activity of Penzyme, in different concentration and at variable incubation times, was tested against HSV-1 *in vitro*. Penzyme was mixed with virus, and the mixtures incubated at 37°C. Samples were titrated in 10-fold dilutions on Vero cells. The titers (\log_{10} CCID₅₀) of the mixtures were subtracted from the titer of the control mixture and the difference used as a measure of the virucidal activity of the Penzyme. The results show that Penzyme is active against HSV-1 and for example, 1 million-fold reduction in virus titer was seen after 10 min incubation at 37°C with 90 U / ml of Penzyme.

Stíf, 5'-6 tengd fenanþrólin kirnisleif: efnasmíði og innleiðing í DNA

Kristmann Gíslason* og Snorri Þór Sigurðsson

Raunvísindastofnun, Háskóli Íslands, Dunhagi 3, 107 Reykjavík, Ísland.



Innleiðing málm-komplexa sem nema í kjarnsýrur hefur opnað margvíslega möguleika, bæði á sviði kjarnsýrurannsókna og örtækni. Hingað til hafa komplexarnir verið tengdir við kjarnsýrurnar með hreyfanlegum eða hálfhreyfanlegum tengjum, sem dregur úr næmni nemans við breytingar í hreyfingu og byggingu kjarnsýrurnar. Stífur nemi, þar sem

einn tengill er fastur hluti kirnisleifarinnar sem hann er tengdur við, gæti því haft ákveðna kosti.

Við höfum smíðað stífu málmbindandi kirnisleifina 1, sem hefur fenanþrólin tengihluta (sjá mynd). Í kirnisleifinni er eter tengi milli 5'-kolefnis sykrunar og 6'-kolefnis basans sem veldur því að aðeins er hægt að nota hana til merkingar á 5'-enda kjarnsýra. Á hinn bóginn, þar sem enginn 5'-hýdroxíl hópur er til staðar, er engin þörf fyrir 5'- trýtíl verndun sem einfaldar smíði á fosfóramidíð byggingareiningunni fyrir sjálfvirka kjarnsýruefnasmíði. Stífa kirnisleifin er afleiða af T og ætti að basaparast við A líkt og náttúrulega kirnið (sjá mynd). Hringskautunar róf, T_m mælingar og sameindahermanir hafa sýnt fram á að kirnisleifin veldur ekki sýnilegri röskun á byggingu DNA tvístrendings.

A rigid phenanthroline nucleoside containing a 5'-6 ether linkage: synthesis and incorporation into DNA

The introduction of metal-complexes as probes into nucleic acids has opened a number of possibilities, both in the field of nucleic acid research and in the field nanotechnology. Until now, the metal-complexes have been attached to the nucleic acids with flexible or semi-flexible linkers decreasing the sensitivity of the probe to changes in the dynamics and structure of the nucleic acid to which it is attached. A rigid probe where a ligand is fused to the nucleoside to which it is attached might therefore provide advantages.

We have synthesized the rigid metal-chelating nucleoside **1**, containing a phenanthroline ligand moiety (see picture). The nucleoside contains an ether linkage between the 5'-carbon on the sugar and the 6-carbon on the base which means it is only applicable to 5'-end labelling. However, without a 5'-hydroxyl group there is no need for 5'-trityl protection making synthesis of the phosphoramidite building block for automated oligonucleotide synthesis simpler. The rigid nucleoside is a T derivative and should be able to base-pair to A similar to the natural nucleoside (see picture). Circular dichroism-, melting- and modelling- studies have shown that the nucleoside is accommodated on the end of DNA helices without causing any noticeable distortion of the helix structure.

Theoretical approach to predict metastable dissociation of deprotonated anions in gas phase

Flosadóttir HD, Ingólfsson O., Jónsson, H

Science Institute, University of Iceland, Dunhagi 3, 107 Reykjavík, Iceland

We have measured the metastable dissociation of the deprotonated nucleosides guanosine and deoxyguanosine, using matrix assisted laser desorption ionisation time of flight mass spectrometry (MALDI TOF MS). Complicated molecules such as nucleosides have many possible deprotonation sites, and thus a possibility to form more than one anion via deprotonation. When the nucleosides are deprotonated they can undergo further dissociation leading to smaller fragments, each fragment only formed selectively from one specific deprotonation site.

To identify the selective fragmentation, dependent upon the deprotonation site we have modified guanosine to block selectively different deprotonation sites and thus observe the fragmentation channels available from each anion formed.

In addition to the measurements we have simulated the metastable dissociation of 2'-deoxyguanosine using the same method as we used successfully on the amino acid L-Valine[1] which showed excellent agreement with our measurements. Now we have proceeded with these calculations towards larger and more complicated molecules such as the nucleosides. These simulations show exactly the same bond ruptures as observed from metastable dissociation measured in MALDI, from the same deprotonation sites as observed when measuring the modified compounds. We have thus been able to predict the metastable fragmentation of each anion of the guanosine by means of DFT and molecular dynamics calculations.

Fræðileg nálgun á niðurbroti afprótóneraðra anjóna í gasfasa

Flosadóttir HD, Ingólfsson O., Jónsson, H

Raunvísindastofnun, Háskóli Íslands, Dunhagi 3, 107 Reykjavík, Ísland

Við höfum mælt hálfstöðugt niðurbrot afprótóneraðra kirnisleifanna gúanósín og 2'-deoxy gúanósín með MALDI-TOF massagreini. Flóknar sameindir eins og kirnisleifar hafa margar "súrar" prótónur þ.e. prótónur sem eru bundnar laust við sameindina. Ein slík sameind getur þá myndað margar mismunandi afprótóneraðar anjónir. Þegar kirnisleif er afprótónuð er hún hálfstöðug og getur því sundrast frekar í smærri jónir og brot. Þetta niðurbrot er háð upphafsjóninni, og þar með einnig staðsetningu prótónunnar sem er fjarlægð.

Til þess að þekkja vundni niðurbrots samkvæmt staðsetningu afprótóneringar höfum við breytt kirnisleifinni gúanósín og skipt út prótonum fyrir methýlhópa og isopropyl hópa og þannig lokað fyrir niðurbrotsleiðir.

Þar að auki höfum við einnig hermt niðurbrot jónanna með density functional theory reikningum. Þá aðferð höfum við notað áður til þess að herma niðurbrot afprótóneraðrar aminosýrunnar L-Valine[1]. Þessi hermun á kirnisleifunum sýnir nákvæmlega sömu tengjarof, við niðurbrot sömu tegund afprótóneraðra anjóna og sjást við massamælingar. Þannig getum við sagt til um vundni niðurbrots sameinda með hjálp DFT reikninga.

1. Flosadottir, H.D., S. Denifl, F. Zappa, N. Wendt, A. Mauracher, A. Bacher, H. Jonsson, T.D. Mark, P. Scheier, and O. Ingolfsson, *Combined experimental and theoretical study on the nature and the metastable decay pathways of the amino acid ion fragment [M-H]*. *Angewandte Chemie-International Edition*, 2007. **46**(42): p. 8057-8059.

Characterization of membrane lipid rafts isolated from the basolateral membrane of Atlantic cod (*Gadus morhua*) intestinal enterocytes.

Erna Knútsdóttir, Guðjón Andri Gylfason and Bjarni Ásgeirsson.*

Department of Biochemistry, Science Institute, University of Iceland, Dunhaga 3, 107 Reykjavik, Iceland.

To the best of our knowledge, no studies have yet been performed on lipid rafts from the intestinal basolateral membrane (BLM) of ray-finned fishes (*Actinopterygii*). Our aim was to isolate and characterize lipid rafts from the basolateral membrane of Atlantic cod (*Gadus morhua*) intestinal enterocytes to confirm their existence and determine if they showed similarity to lipid rafts from other species.

We improved previously described method to isolate BLM part of the intestinal enterocytes from other membrane fractions. Furthermore, we were interested in defining the protein and lipid content of the BLM fraction. To our surprise, the conventional membrane phospholipids content was not observed in our samples. Cod intestinal BLM had only a low amount of phosphatidylcholine, but correspondingly high amounts of sphingomyelin. Protein analyses were performed with antibodies, but in the BLM fraction they have recognised proteins such as Na⁺K⁺ATPase, caveolin and flotillin.

Lipid rafts were isolated from the BLM fraction, but they showed similar characteristics as lipid rafts in other species. That is, high cholesterol/protein ratio, high sphingolipid content, and different protein composition compared to the higher density membrane fractions. GM₁ (monosialotetrahexosylganglioside), a known lipid raft marker, also showed enrichment in the low-density fractions on dotblots. Our research group has special interest in learning more about the physiological role *in vivo* of a GPI anchored protein called alkaline phosphatase. Some enrichment in activity was observed in the lipid raft fraction, but the activity was low compared to lipid rafts on the brush border membrane side.

Our findings show that we have successfully separated BLMs from other membrane fractions. The lipid content of cod intestinal BLMs is very different from the expected. Here, we have also for the first time isolated lipid rafts from the intestinal BLM of a ray-finned fish (Atlantic cod).

* bjarni@raunvis.hi.is

Einangrun og auðkenning á himnuflekum úr „basolateral“ himnu þarmaþekjufrumna úr Atlantshafs þorski (*Gadus morhua*).

Erna Knútsdóttir, Guðjón Andri Gylfason and Bjarni Ásgeirsson.*

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

Eftir því sem við komumst næst, þá hafa engar rannsóknir verið gerðar á himnuflekum „basolateral“ himnu (BLM) þarmaþekjufrumna geislaugga (*Actinopterygii*). Markmið okkar var að einangra og auðkenna himnufleka úr BLM hluta þarmaþekjufrumna úr Atlantshafs þorski (*Gadus morhua*) til að staðfesta tilvist þeirra og athuga hvort samsetning þeirra væri svipuð og himnufleka annarra tegunda.

Við betrubættum áður birta aðferð við einangrun á BLM himnu þarmaþekjufrumna frá öðrum himnuhlutum. Í framhaldinu höfðu við áhuga á að skoða prótein- og lípið samsetningu BLM. Það kom okkur á óvart að BLM hluti þarmaþekjufrumu í þorski hafði ekki hina hefðbundnu fosfólípiðasamsetningu. Heldur hafði hátt hlutfall af sphingómýelíni, á móti lágu hlutfall af fosfatdýlkólíni. Próteingreining hefur verið framkvæmd með mótetnum, en þau hafa meðal annars borið kennsl á Na⁺K⁺ATPasa, caveolin og flotillin.

Himnuflekar voru einangraðir frá BLM, en þeir sýna lífefnafræðileg einkenni himnufleka annarra tegunda. Það er, hátt kólesteról/prótein hlutfall, hátt sphingólípið hlutfall, og mismunandi prótein samsetningu miða við skammta úr eðlisþyngri hluta stigulsins. GM₁ (monosialotetrahexosylganglioside) er þekkt merki fyrir himnufleka, en það hefur einnig sýnt aukningu í eðlisléttari hluta stigulsins með þerriblettun. Rannsóknarhópur okkar hefur sérstakan áhuga á lífeðlisfræðilegu hlutverki alkalísk fosfatasa. Eðlisvirkni þess jókst aðeins í himnufleka hluta stigulsins, en ekkert miða við virkni þess í himnuflekum burstalags megin.

Niðurstöður okkar sýna að okkur hefur tekist að einangra BLM frá öðrum himnuhlutum. Lípið innihald BLM þarmaþekjufrumna þorsks er frábrugðið því sem búist var við. Einnig höfum við nú sýnt frammá í fyrsta skipti einangrun á himnuflekum frá BLM himnu þarmaþekjufrumna geislaugga (Atlantshafs þorsk).
