

AVANSERTE VANNANALYSER

HVILKE SVAR KAN EN FÅ?

Kolbjørn Zahlsen (kolbjorn.zahlsen@sintef.no)

Forskningssjef

Avdeling for Massespektrometri

Sektor for Bioteknologi og Nanomedisin

SINTEF Materialer & Kjemi

VA-Dagene i Midt-Norge, Rica Hell Hotell, Stjørdal, 2013-10-30

AGENDA

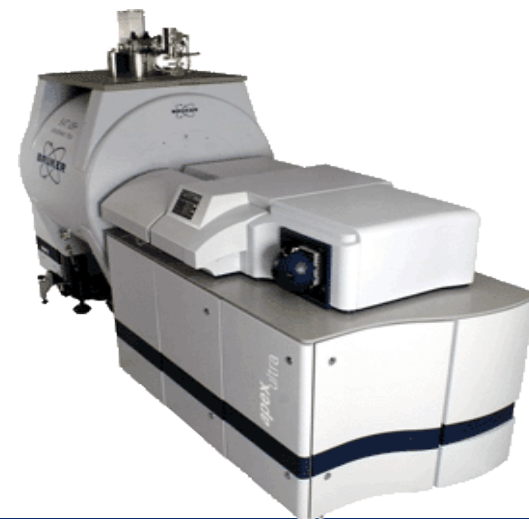
- Bakgrunn
- Analyseteknikker
 - Organiske forbindelser – Mikroforurensninger mm.
 - NOM – "Natural Organic Matter"
 - Nanopartikler
 - Metaller - Grunnstoffer
- Eksempler
- Konklusjoner

AVANSERTE VANNANALYSER – FOKUSOMRÅDER (6/6-12)

- NOM (Natural Organic Matter)
- Mikroforurensninger
 - Industrikjemikalier (PAH)
 - Hormonhermere
 - Legemiddelrester
 - "Personal care products" – Kosmetikk mm.
- Lukt- og smaksstoffer
- Nitrosaminer / nitraminer / aminer
- Nanopartikler
- Identifisering av ukjente forbindelser

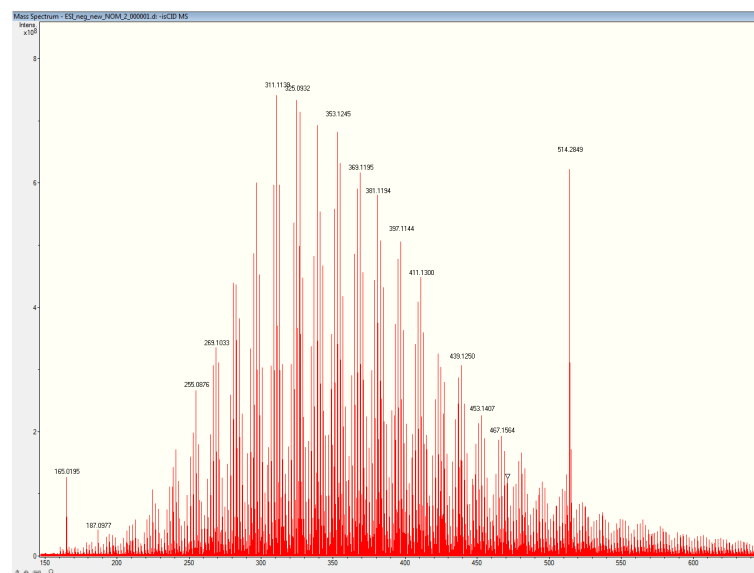
AVANSERTE VANNANALYSER (1)

- **NOM (Natural Organic Matter)**
 - Komplekse blandinger av molekyler med høy molekylvekt
 - Kommer fra nedbrytning av organisk materiale
 - Problem fordi NOM er "mat" for mikroorganismer og setter farge på vann
 - NOM er et økende problem i Nord-Europa
- Det er utviklet et helt ny teknikk for å studere kjemien til NOM
 - FT-ICR (Ultrahøyoppløselig massespektrometri)
- Anvendelsesområder
 - Forstå bakgrunn / mekanismer
 - Forbedre teknikker for fjerning av NOM



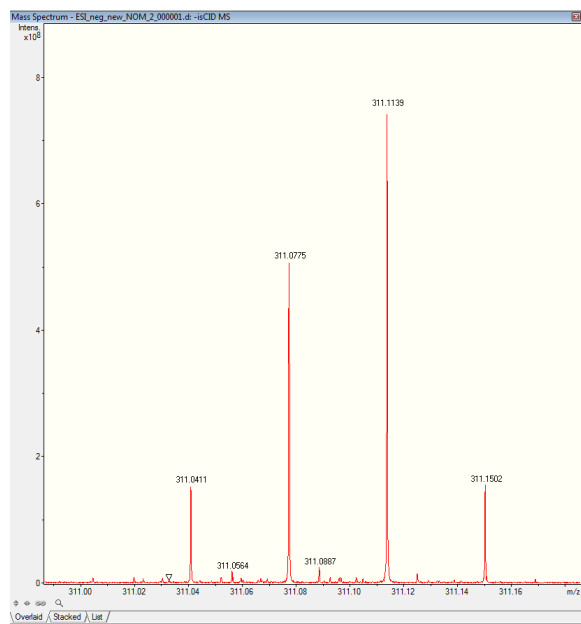
AVANSERTE VANNANALYSER (2)

- **NOM (Natural Organic Matter)**
 - FT-ICR (Ultrahøyoppløselig massespektrometri)
 - Nå operativ i Trondheim
 - Unik metodikk ekstremt kompleks kjemi



AVANSERTE VANNANALYSER (3)

- **NOM (Natural Organic Matter)**
 - FT-ICR (Ultrahøyoppløselig massespektrometri)
 - Kan skille mellom veldig nære masser og bestemme bruttoformel



Meas. m/z	#	Formula	Score	m/z	err [mDa]	err [ppm]	mSigma	rdb	e ⁻ Conf	N-Rule
311.0411	1	C ₁₃ H ₁₁ O ₉	100.00	311.0409	-0.2	-0.7	20.1	8.5	even	ok
	2	C ₁₁ H ₉ N ₃ O ₈	45.22	311.0395	-1.6	-5.1	22.3	9.0	odd	ok
	3	C ₁₄ H ₇ N ₄ O ₅	60.52	311.0422	1.1	3.6	22.6	13.5	even	ok
	4	C ₁₂ H ₅ N ₇ O ₄	85.47	311.0409	-0.2	-0.8	27.0	14.0	odd	ok
	5	C ₁₀ H ₃ N ₁₀ O ₃	40.14	311.0395	-1.6	-5.1	27.4	14.5	even	ok
	6	C ₁₃ H ₁₁ N	48.26	311.0422	1.1	3.5	32.4	19.0	odd	ok
311.0564	1	C ₄ H ₉ N ₉ O ₈	100.00	311.0580	1.6	5.1	45.4	5.0	odd	ok
311.0775	1	C ₁₂ H ₁₃ N ₃ O ₇	48.08	311.0759	-1.6	-5.1	4.7	8.0	odd	ok
	2	C ₁₄ H ₁₅ O ₈	100.00	311.0772	-0.3	-0.8	5.8	7.5	even	ok
	3	C ₁₁ H ₇ N ₁₀ O ₂	46.67	311.0759	-1.6	-5.2	6.2	13.5	even	ok
	4	C ₁₃ H ₉ N ₇ O ₃	87.85	311.0772	-0.3	-0.8	12.7	13.0	odd	ok
	5	C ₁₅ H ₁₁ N ₄ O ₄	52.76	311.0786	1.1	3.5	17.4	12.5	even	ok
311.1139	1	C ₁₂ H ₁₁ N ₁₀ O	49.54	311.1123	-1.6	-5.2	5.6	12.5	even	ok
	2	C ₁₃ H ₁₇ N ₃ O ₆	48.76	311.1123	-1.6	-5.2	6.7	7.0	odd	ok
	3	C ₁₅ H ₁₉ O ₇	100.00	311.1136	-0.3	-0.8	8.6	6.5	even	ok
	4	C ₁₄ H ₁₃ N ₇ O ₂	92.17	311.1136	-0.3	-0.9	12.8	12.0	odd	ok
	5	C ₁₆ H ₁₅ N ₄ O ₃	52.07	311.1150	1.1	3.5	20.5	11.5	even	ok
311.1502	1	C ₁₃ H ₁₅ N ₁₀	50.75	311.1487	-1.6	-5.1	8.3	11.5	even	ok
	2	C ₁₅ H ₁₇ N ₇ O	100.00	311.1500	-0.2	-0.8	11.9	11.0	odd	ok
	3	C ₁₄ H ₂₁ N ₃ O ₅	44.79	311.1487	-1.6	-5.1	15.1	6.0	odd	ok
	4	C ₁₆ H ₂₃ O ₆	93.85	311.1500	-0.2	-0.7	15.3	5.5	even	ok
	5	C ₁₇ H ₁₉ N ₄ O ₂	55.85	311.1513	1.1	3.6	18.7	10.5	even	ok

AVANSERTE VANNANALYSER (4)

- **Mikroforurensninger**

- Industrikjemikalier (PAH)
- Hormonhermere
- Legemiddelrester
- "Personal care products" – Kosmetikk mm.
- Lukt- og smaksstoffer

- Kjente massespektrometriske teknikker

- GC-MS (Gasskromatografi kombinert med massespektrometri)
- LC-MS-MS (Væskeskromatografi kombinert med trippel kvadropol massespektrometri)
- Prøveopparbeidelse er viktig for å få oppkonsentrering
- Ekstreme krav til analysefølsomhet

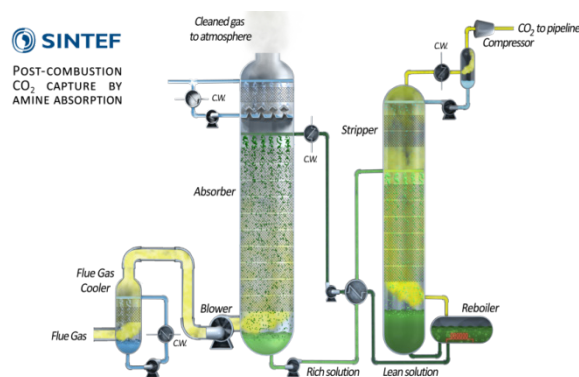
- Anvendelsesområder

- Kartlegging
- Utvikle / forbedre teknologi for fjerning



AVANSERTE VANNANALYSER (5)

- Nitrosaminer / nitraminer / aminer
 - Stoffer det er fokusert sterkt på i forbindelse med karbonfangst
 - Funn av høye aminkonsentrasjoner ferskvann må forklares
- Kjente massespektrometriske teknikker
 - GC-MS og LC-MS-QQQ
 - Prøveopparbeidelse er viktig for å få oppkonsentrering
 - Ekstreme krav til analysefølsomhet
- Anvendelsesområder
 - Kartlegging
 - Fjerning



AVANSERTE VANNANALYSER (6)

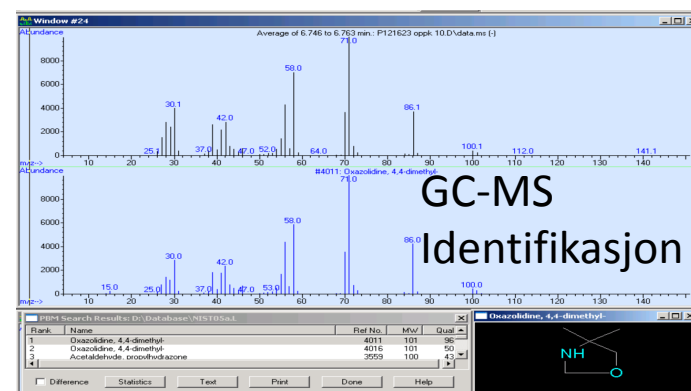
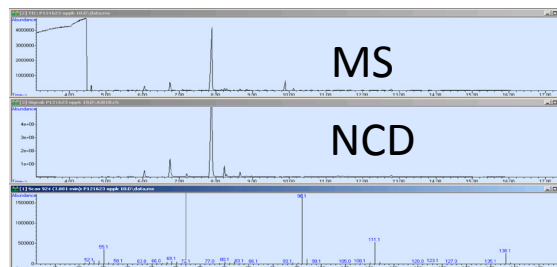
- **Nanopartikler**
 - **Stort spenn i partikkelstørrelse**
 - **MS laboratoriet involvert i karakterisering**
- State-of-the –art teknikker etablert ved SINTEF
 - LC-MS-QTOF (Væskechromatografi kombinert med Time-of-flight massespektrometri)
 - FFF (Field Flow Fractionation)
- Anvendelsesområder
 - Relevans for helse?
 - Kartlegging
 - Annet

FFF separerer partikler
Fra 1 nanometer opp
til 100 mikrometer
Kombineres med en rekke
deteksjonsprinsipper



AVANSERTE VANNANALYSER (7)

- Identifikasjon av helt ukjente forbindelser
 - "Alle slags forbindelser" – giftstoffer, kjemikalier, narkotiske stoffer.....
 - "CSI – Trondheim" (vi har faktisk erfaring fra retts toksikologi ved St. Olavs)
- State-of-the-art teknikker etablert ved SINTEF
 - Bredt spekter av MS-instrumenter
 - GC-MS med søk mot spekterdatabase er viktig
- Anvendelsesområder
 - Avklare konsekvens / fare for helse
 - Avsløre forurensningskilden
 - Annet



AVANSERTE VANNANALYSER (8)

- **Metaller / mineraler**
 - Fjerning av kopper fra vann
 - Nedlagte gruver
- State-of-art teknikk er ICP-MS-MS



Med ICP-MS kan metaller og grunnstoffer måles med svært høy følsomhet



- Anvendelsesområder
 - Forurensset vann fra nedlagte gruver et stort problem verden over
 - Kartlegging
 - Overvåking
 - Måle effekt av tiltak

AVANSERTE ANALYSER UTVIDER MULIGHETSBILDET

ETT EKSEMPEL:

- Analyse av misbruksstoffer, legemidler og "personal care products" i avløpsvann
 - Screening av >30 misbruksstoffer i urin (St. Olavs Hospital)
 - Utvalgte legemidler (SINTEF)
 - Utvalgte personal care products (SINTEF)
- Application areas
 - Overvåking/kartlegging
 - Forskjeller mellom anlegg
 - Annet

KONKLUSJONER

- **Nye avanserte vannanalyser**
 - viktige for kartlegging og beredskap
 - viktige for forskning på området vann
 - viktige for å forstå endringer (f. eks. klimaendringer)
 - viktige for framtidens vannbehandling
 - viktige for å bidra til globalt samarbeid på vann