



**Additiver/ukendte stoffer – er de
nuværende analysemetoder
tilstrækkelige og kan vi allerede
se nogle af stofferne i de gængse
analyser ?**

ATV møde – GEO, Aarhus d. 15. Jan. 2014



- Egentlig ikke, og dog 😊 ?
- Vi anvender stort set kun specifikke metoder idag, i analysearbejdet.
- Analysemetoder består ofte af følgende trin:
 - Forbehandling (filtrering, homogenisering el. andet)
 - Ekstraktion/destruktion (m. opløsningsmiddel, fastfase, HS/ syre)
 - Detektering på GC/FID, GC/MS, LC/MS, ICP, ICP/MS o.s.v.
 - Beregning.

- Metodeprincipperne kan dog bruges i nogle tilfælde, til andre specifikke formål, d.v.s. ekstraktionerne, analyseudstyr, men kræver en specificering.
- Eks. kan ekstraktionen af PAH'er i jord og vand, teoretisk set, anvendes til ekstraktion af andre organiske stoffer. Dermed vil det kun kræve en ny metode på GC/MS'en for at analysere for nogle nye stoffer, såfremt de lader sig ekstraheres og detekteres på GC/MS el. evt. LC/MS.
- Kræver noget metodeudvikling/validering.

Opgaven vedr. ukendte stoffer:

- Der er p.t. registreret 15.000.000 kemiske forbindelser, hvoraf 95 % er organiske, som dækker naturligt forekommende og syntetiske stoffer (Danske Encyclopædi).
- Antallet er støt stigende med ca. 300.000 forbindelser, hvert år !
- DANVA skønner at der anvendes ca. 100.000 kemikalier i Europa, hvoraf de 30.000 anvendes i mængder på 1 ton eller mere, pr. år.

- Det positive er selvfølgelig, at det langt fra er alle stoffer, der er “farlige/giftige”, men det kræver dokumentation at bevise at stoffer er ufarlige eller farlige.
- Hvilken opgave er det så vi står over for ?

- I DK anvender vi metoder der er tilpasset det aktuelle behov for information, d.v.s. metoderne er defineret af f.eks. stoffer og deres afskæringskriterier. Eks. BTEX, chlorerede opl.m. PAH'er, tungmetaller o.s.v. i forskellige prøvematrixer (eks. er "Jordpakken").
- Generelt kan man sige om de eksisterende metoder, at de opfylder det aktuelle behov, men de er ikke fremtidssikret.

Gængse metoder på jord:

- Tungmetaller (Cu, Cr, Cd, Pb, Ni, Zn) - ICP
- PAH (7 stk.) – GC/MS
- Kulbrinter (C6-C35) – GC/FID
- Metoderne er specifikke, og registrerer kun det, der er defineret i metoden (på apparatet).
- Dog kan man se lidt mere på GC/FID, hvis stoffet har en “brændværdi”, og det er chromatograferbart, men man får ikke en identitet v.hj.a. GC/FID.

- Dertil kan der suppleres med GC/MS-scan. Ulempen er at GC/MS har en ringere følsomhed, og små indhold kan være sværere, at identificere nøjagtigt nok.
- En anden ulempe er, at prisen er højere, idet metoden kræver meget manuel databehandling.
- Så hvad gør vi ?

- Den traditionelle metode har altid været, at vores kunder henvender sig til os, for at høre om vi kan analysere dette eller hint. Det undersøger vi så, om vi kan med vores eksisterende udstyr og erfaring. Ud fra den økonomiske ramme, der kan ligge i sådanne opgaver, kan vi så overveje om vi evt. skal investere i nyt udstyr, for at opfylde et nyt behov.
- Eks. En ny LC/MS/MS koster ca. kr. 2 mill.
- En højopløselig ICP/MS koster ca. kr. 2-3 mill.

- **Rambøll har givet disse stoffer som eksempler:**
- Flyafisningsmidler (triazoler)
- Tilsætningsstoffer til kølemidler (Na-ethyl-hexanoat)
- Korrosionsinhibitorer (Na-molybdat dihydrat)
- Tilsætningsstoffer til chlorerede opl.midler (1,4-dioxan)
- Freon-stoffer (F11, F12, F22 m.v.)
- Østrogen og patogener fra f.eks. urin
- Tilsætningsstoffer til pesticider (detergenter som alkylphenol-polyethoxylater, organosilicone, opløsningsmidler)

- **Stofgrupper/stoffer der ender i vores spildevand og derefter i recipienter (eksempler på nuværende viden):**
 - PFOA/PFOS (fra teflon, slipmidler, imprægnering m.v.)
 - PAPS (polyfluoroalkyl fosfate surfactants, bagepapir, muffinsforme)
 - Parfumestoffer (personlig hygiejne, rengøring- og vaskemidler)
 - PBB, PBDE (flammehæmmere i elektronik)
 - Chlorparaffiner (byggematerialer)
 - Siloxaner (kosmetik, tekstiler, byggematerialer)
 - Vaskemidler (nye tensider, optisk hvidt, parfume, blødgørere)
 - Medicinrester (hormoner, smertestillere, regulerende medicin)

- Fælles for alle stofgrupper er, at de kræver specifikke analysemetoder.
Dog kan man opnå noget metode/udstyrs-synergi eks.
- Chlorparaffiner udføres på samme ekstrakt som PCB'er.
- 1,4-dioxan sammen med chl.op.m. på P&T/Headspace.
- Medicinrester sammen med pesticider på LC/MS/MS.
- Mange flere

- Princippet er “Søg og du skal finde”.
- Hvis vi har ubegrænsede ressourcer kan vi i princippet undersøge alt for alt. Dette giver dog ingen mening, da det efterfølgende kræver enormt meget sagsbehandling, som igen vil resultere i så uoverskuelige datamængder, at ingen sandsynligvis kan håndtere det i praksis.
- Tak for jeres tid - Spørgsmål ?