

# Høj-opløst massespektrometri (HRMS)

HRMS er på tærsklen til industriel anvendelse inden for miljøanalyser.

Af Nanna Louise Kjærsgaard og Peter Bondgaard Mortensen, Eurofins Miljø A/S

Vi er som samfund blevet mere opmærksomme på, hvilke kemikalier vi indtager og omgiver os med. Derfor kan det være svært at forstå, at vi stadig baserer vores miljømonitorering på spørgsmålet ”er dette stof i vores miljø?” i stedet for spørgsmål som ”hvad er der i vores miljø?”. Det er reelt set det, vi gør, når vi analyserer med konventionelle analysemetoder. Lovgivningen i dag er opbygget således, at man analyserer målrettet for kendte miljøfremmede stoffer, som er udpeget på forhånd. Så selvom vi screener for lange lister af miljøfremmede stoffer, leder vi stadig kun efter de stoffer, vi kender og har mistanke om kunne være i vores miljø. Dette gør, at der er risiko for at overse forurening med stoffer, som potentielt kan være skadelige, simpelthen fordi vi ikke har ledt efter dem. Og det sker.

Et eksempel på dette er en analyse lavet af forskere på Københavns Universitet [1], der viste, at vand, der opbevares i drikkedunke i timevis, opsamlende potentielt sundhedsskadelige kemikalier [2]. Gennem det sidste årti har der løbende været sager med fund af nye stoffer så som PFAS [3] og kemikalier fra bildæk [4] i den danske vandforsyning. Disse fund, samt offentlighedens interesse for at undgå unødige og skadelige stoffer, har været medvirkende til, at efterspørgslen for miljøanalyser er ved at ændre sig. Dermed er der behov for, at nye og forbedrede analyseteknikker bliver implementeret i miljøovervågningen.

## Højere nøjagtighed på massebestemmelsen giver nye muligheder

Med høj-opløst massespektrometri (HRMS) er det nu muligt at komme tættere på at besvare spørgsmålet ”hvad er der i vores miljø?”. Modsat konventionel target-analyse kan man med HRMS-teknikker måle på mange stoffer samtidigt uden at forudbestemme, hvilke stoffer man leder efter. Man kan dermed detektere alle de stoffer i prøven, der passer til den

anvendte analysemetode. Denne såkaldte ”non-target” metode giver et kemisk fingeraftryk af den pågældende prøve. Derudover kan den forbedrede nøjagtighed af massebestemmelsen give en mere sikker identifikation af de påviste stoffer. Denne type massespektrometri kan bruges til at lave analyser på flere niveauer, alt efter hvor bredt man ønsker at søge.

## Paradigmeskifte inden for miljøovervågning

I dag bruges HRMS-analyser mest til forskning, og Dansk Kemi har tidligere bragt flere artikler om emnet [5-6]. Nu er teknikken også ved at gøre sit indtog i industrien. For fem år siden var der ingen kommercielle laboratorier i Danmark, der benyttede HRMS, hvorimod der i dag er få, men et stigende antal laboratorier, der investerer i HRMS. Hos miljølaboratoriet Eurofins Miljø A/S har vi to års erfaring med HRMS-analyse, primært på spildevand. Derudover deltager vi i en række forskningsprojekter på drikkevand/grundvandsområdet med forskellige samarbejdspartnere. Vi oplever, at efterspørgs-

## OTTO – DIGITAL SERVICE FRA BUSCH

OTTO overvåger dine vakuumpumper, overalt, når som helst. Se tilstanden af din proces eller vakuumpumpens med vores digitale service. OTTO sender automatisk beskeder til Busch i tilfældet af forstyrrelser i din proces. **Oplev fordelene af tilstandsovervågning.**

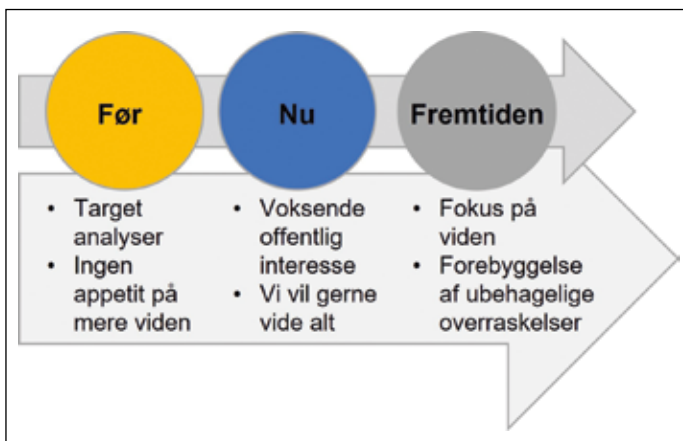
**LABDAYS**

September  
Aarhus

Busch Vakuumenteknik A/S  
87 88 07 77  
info@busch.dk  
www.buschvacuum.com

**BUSCH**

VACUUM SOLUTIONS



Figur 1. Skematisk illustration af udviklingen i efterspørgslen for miljøanalyser.



Foto: Wikimedia

len for miljøanalyser har rykket sig fra, at man kun ville have svar på de obligatoriske test, til at man nu vil vide så meget som muligt, så man undgår overraskelser (figur 1). Der er ved at ske et paradigmeskifte inden for miljøovervågning. Hvor miljølaboratorierne tidligere var "simple" leverandører af analyseresultater (data), vil de fremover blive mere integrerede partnere i løsning af spørgsmål og problemer. Her kan HRMS-analyser komme til at spille en afgørende rolle.

## Anvendelser for HRMS-analyse nu og i fremtiden

HRMS-analyser kan med fordel anvendes i forbindelse med blandt andet monitorering af nye udledninger, undersøgelse af fortidens forurening

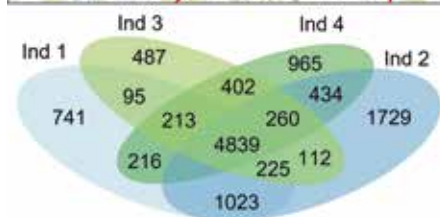
med miljøfremmede stoffer, samt til at danne beslutningsgrundlag for investering i tekniske anlæg som for eksempel renseforanstaltninger.

Metoden har desuden den meget store fordel, at analyserne kan bruges retrospektivt, da det opsamlede rådata kan genbesøges og analyseres på et vilkårligt tidspunkt. Et meget kraftfuldt værktøj til undersøgelse af eksempelvis tidstrends.

I dag bruges HRMS kun til den ikke-regulerede del af miljøovervågningen, men på trods af dette har teknikken allerede fundet anvendelse i flere tilfælde til target-analyser eller suspekt-screening for pesticider, PFAS-stoffer, lægemidler og industrielle kemikalier i blandt andet spildevand og slam.

## Eksempel på anvendelse af HRMS-analyser

Skanderborg Forsyning har anvendt resultatet af LC-HRMS analyser i forbindelse med planlægning af kommende investeringer i spildevandsrensning. Forsyningen undersøger muligheden for at lægge fire spildevandsanlæg sammen til ét. I den forbindelse var Forsyningen interesseret i at vide mere om den kemiske profil af indløbsvandet til de respektive spildevandsanlæg. Indløbsvandet blev derfor analyseret med LC-HRMS med det formål at klarlægge antallet og sammensætningen af stoffer i indløbsvandet til de enkelte anlæg. Venn-diagrammet (figur 2) viser antallet af tilladte kemiske stoffer fundet ved de respektive anlæg. Diagrammet viser, hvor mange stoffer der er unikke for de enkelte anlæg, hvor mange stoffer der blev fundet i indløbsvandet for to eller flere sites (der hvor cirklerne overlapper) og antallet af stoffer, som blev påvist ved alle anlæg.



Figur 2. Kort over placeringen af fire vandforsyninger i Skanderborg Kommune, samt Venn-diagram over antallet af tilladte kemiske stoffer, der blev defekteret ved LC-HRMS analyse for indløbsvandet for de respektive sites.

I alt 4.839 stoffer var fælles for alle anlæg. Indløbsvandet for anlæg 2 (Ind 2) havde overordnet flest stoffer, og også flest unikke stoffer (1.729), der ikke blev påvist ved de andre anlæg. En mere detaljeret analyse af resultaterne afslørede også, at ét anlæg havde en betydelig tilladning af PFAS-forbindelser.

Uden på nogen måde at identificere alle stoffer giver eksemplet et godt billede af, hvad man skal være opmærksom på ved sammenlægning af anlæg. Spildevand er ikke ens fra anlæg til anlæg, og sammensætningen af spildevandet fra de enkelte anlæg kan have stor betydning for fremtidig renseeffektivitet.

Analyse af afløbsvand giver på samme måde viden om anlæggets renseeffektivitet. Med HRMS-analyser er det muligt at fokusere på identifikation af problematiske stoffer. Dette gør det muligt at prioritere ressourcer og bestemme, hvilke tiltag der skal iværksættes for at sikre effektiv rensning af vandet. Når disse analyser er foretaget i planlægningsfasen, som i eksemplet fra Skanderborg Forsyning, kan det bidrage til, at investeringer bliver lavet på et så veloplyst grundlag som muligt. Dermed mindskes risikoen for, at man senere finder problematiske stoffer, som man ikke i første omgang havde taget højde for, og derfor kan blive nødsaget til at foretage nye og fordyrende tiltag.

## Fremtidige anvendelser af HRMS

Ud over de nævnte anvendelser fra vandområdet har HRMS-analyser potentiale for i fremtiden at blive udvidet til anvendelse på alle miljømatricer. Hermed er der potentiale for, at metoden

### ■ HRMS-analyser i flere niveauer

**Target-analyse:** Her analyseres målrettet efter få kendte stoffer og der anvendes en referencestandard for sikker identifikation og kvantificering. Dette svarer til den konventionelle metode, dog med mere præcis massebestemmelse.

**Suspekt screening:** Her analyseres efter en lang række af kendte forbindelser, som for eksempel pesticider, lægemidler, PFAS-stoffer og andre industrielle kemikalier. Der anvendes kun i begrænset omfang referencestandarder.

**Non-target screening:** Her laves en bred analyse for både kendte og ukendte stoffer i en prøve.

kan anvendes til blandt andet monitoring og overvågning af mikroforurenninger i miljøet generelt. Dette kan blandt andet danne grundlag for beslutninger om udledningstilladelser til industrien og kan understøtte finansielle beslutninger i forbindelse med investering i grundvandsbeskyttelse, rensningsteknologier inden for rentvands- og spildevandsområdet, luftemissioner, indeklima m.m.

### Hvad skal der til for fuld udrulning af HRMS i industrien?

Med HRMS-analyser er vi et skridt tættere i jagten på at kunne besvare spørgsmålet ”hvad er der i vores miljø?”. Der ligger dog stadig meget arbejde i udvikling, forbedring og standardisering af metoderne. Selvom HRMS allerede i dag er et værdifuldt redskab, er der en række udfordringer, der skal overvindes for i større grad at implementere HRMS-teknikker i den industrielle miljømonitorering. En af de vigtigste udfordringer bliver at standardisere analysemetoderne, så der skabes robuste og pålidelige data på tværs af laboratorierne. Særligt inden for retrospektive

analyser er det essentielt, at analyserne er udført efter standardiserede protokoller, så prøverne kan sammenlignes. En sådan standardisering af metoderne er også vigtig for udrulningen af HRMS i den regulerede del af miljøovervågningen.

En af udfordringerne er, at metoderne ikke automatisk giver en koncentration af det pågældende stof, da der ikke medanalyseres referencestandarder. En præcis bestemmelse af koncentrationen kræver normalt, at man har et passende referencestof, hvilket selvsagt ikke er muligt, når man ikke på forhånd ved, hvilke stoffer man vil finde. Der forskes imidlertid i disse år intensivt i metoder til at estimere koncentrationer i situationer uden referencestandarder - en såkaldt semikvantificering.

I et samfund der i stigende grad efterspørger at vide ”alt”, er der stort potentiale for, at HRMS-analyser i fremtiden bliver et vigtigt og fuldt implementeret værktøj inden for miljøanalyser.

E-mail:

Nanna Louise Kjærsgaard:  
nannalouisekjaersgaard@eurofins.com

#### Referencer

1. Tisler, S., Christensen, J., Non-target screening for the identification of migrating compounds from reusable plastic bottles into drinking water, *Journal of Hazardous Materials*, 429 (2022) 128331.
2. Ritzau, Drikkedunke til sport afgiver hundredvis af kemikalier, *Jyllands-Posten*, (2023, 10. maj) <https://jyllands-posten.dk/indland/ECE13731145/drikkedunke-til-sport-afgiver-hundredvis-af-kemikalier/>.
3. Gotfredsen, K., Der er PFAS i grundvandet i hver femte kommune - se hvor det er fundet, *nyheder.tv2.dk*, (2022, 23. december) <https://nyheder.tv2.dk/samfund/2022-12-25-der-er-pfas-i-grundvandet-i-hver-femte-kommune-se-hvor-det-er-fundet>.
4. Gotfredsen, K., Kemikalier fra bildæk fundet i drikkevand på Sjælland, *nyheder.tv2.dk*, (2023, 16. april) <https://nyheder.tv2.dk/samfund/2023-04-16-kemikalier-fra-bildaek-fundet-i-drikkevand-paa-sjaelland>.
5. Tisler, S., & Christensen, J.H., Migration af kemikalier fra genanvendelige plastdrikkedunke til drikkevand, *Dansk Kemi*, 103, nr. 6, 2022, side 9-10
6. Jensen, B., Kemiske fingeraftryk afslører ukendt Forurening, *Dansk Kemi*, 102, nr. 1, 2021, side 8-10.

**STRANDMØLLEN** 

## ESSENTIEL NÅR KVALITETEN SKAL TESTES

Hos Strandmøllen får du mere end bare gas. Du får løsninger på dine udfordringer i laboratoriet. Både de daglige og de mere langsigtede – uanset om det drejer sig om gaschromatografi, dokumentation, sporbarhed eller noget helt fjerde. Du møder fagfolk, som med omtanke, erfaring, viden og passion forstår kompleksiteten i din hverdag, og som med den sikreste hånd kan gøre en forskel og give dig den nødvendige kontrol.

STRANDMØLLEN – ESSENTIEL FOR FREMTIDEN

