

Att analysera väntade och oväntade kemiska ämnen i dricksvatten

Forskning och innovation för säkert dricksvatten

30 november 2017

Erik Westerberg, Johan Rosén, Emma Eriksson

Kemiavdelningen, Livsmedelsverket

Två MSB-projekt

”Dricksvattenrisker - beslutsstöd för översyn och optimering av dricksvattenberedning”

- Kortnamn **Beredningsprojektet**
- 2016-2019
- Ta fram lättanalyserade (LC-MS) markörer för effektivitetsbedömning av dricksvattenberedning
- Stöd till dricksvattenproducenter för att optimera/komplettera/effektivisera beredningsprocesserna

Två MSB-projekt

”Stärkt förmåga till analys av råvatten och dricksvatten vid oväntad kemisk, mikrobiologisk och radioaktiv förorening i fredskriser, för det civila försvaret och höjd beredskap”

- Kortnamn **Okända vattenprovet**
- 2017-2018
- Förstärkt nationell beredskap och förmåga för ovan nämnda problematik

Strategier

- Riktad analys (Targeted)
 - Ser (endast) de ämnen analysmetoden konstruerats för
 - **Fördelar:** hög känslighet och identifikationsgrad (ref.std, mol.vikt, ret.tid, jonratio)
 - **Nackdelar:** kan ej gå tillbaka och söka nya/andra ämnen i dataseten

Strategier

- Förutsättningslös analys (Non-Targeted)
 - Samlar in data för 'alla' (joniserbara/detekterbara) ämnen
 - **Fördelar:** behöver ej bestämma i förväg vad man letar efter, sök intressanta molekyllvikter efteråt. Klarar extremt många ämnen i en körning.
 - **Nackdelar:** lägre känslighet och identifikationsgrad (ofta saknas ref.std, ret.tid, jonratio)

Non-Target

Mass-spektrometri (MS) med

Time of Flight (TOF) detektor

High Resolution MS (HR-MS)

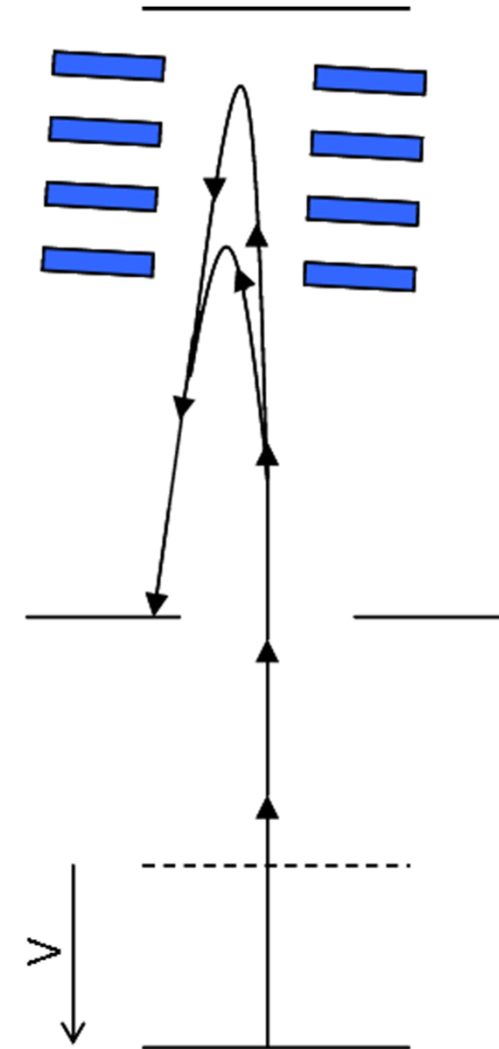
gör att molekylvikt ackurat

kan mätas, och summa-

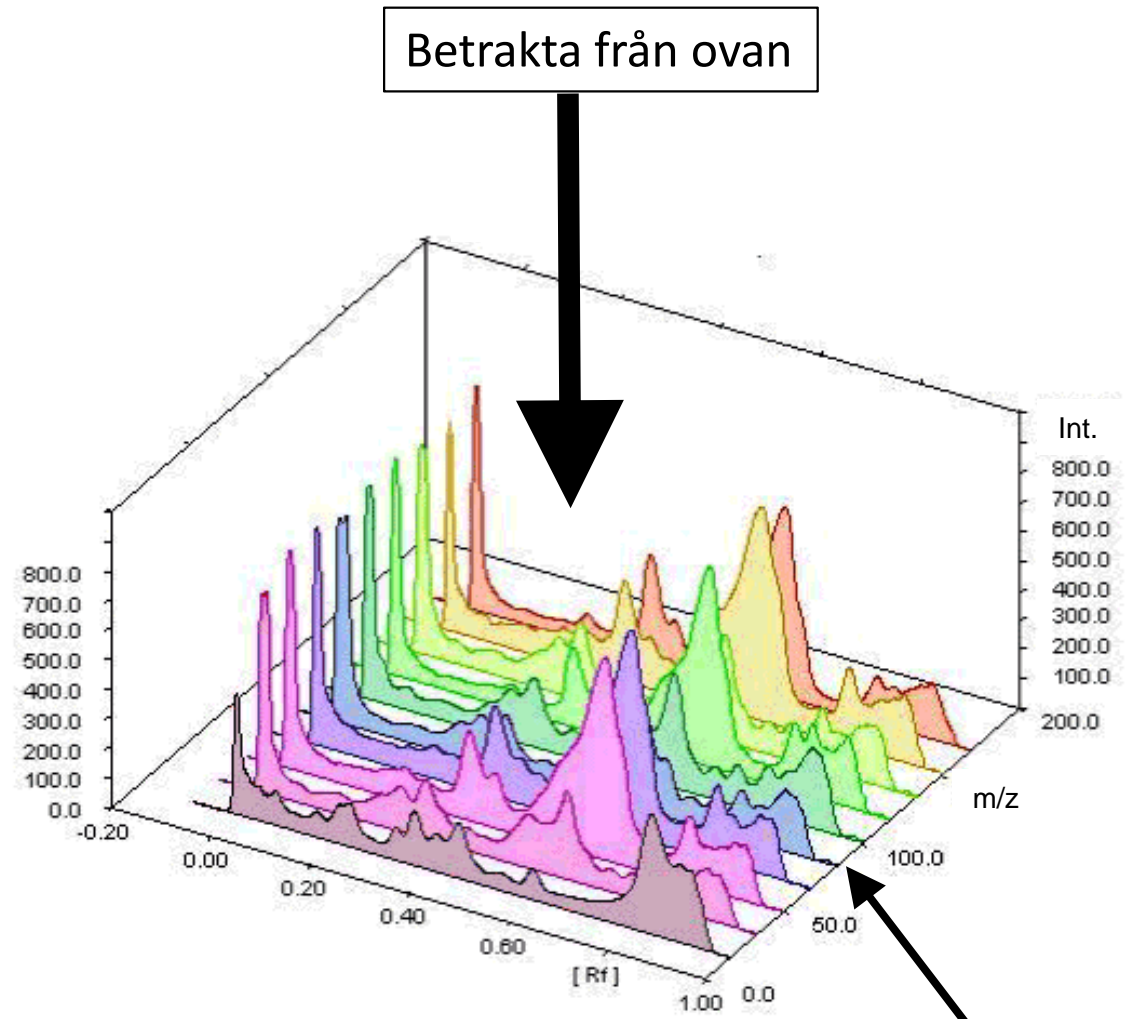
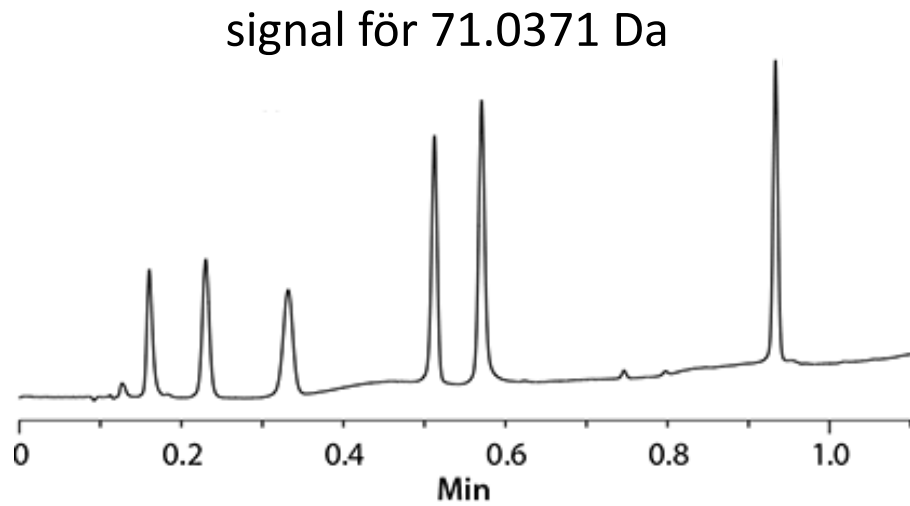
formel kan genereras

(t.ex. motsv. akrylamid)

$C_3H_5NO = 71.0371 \text{ Da}$

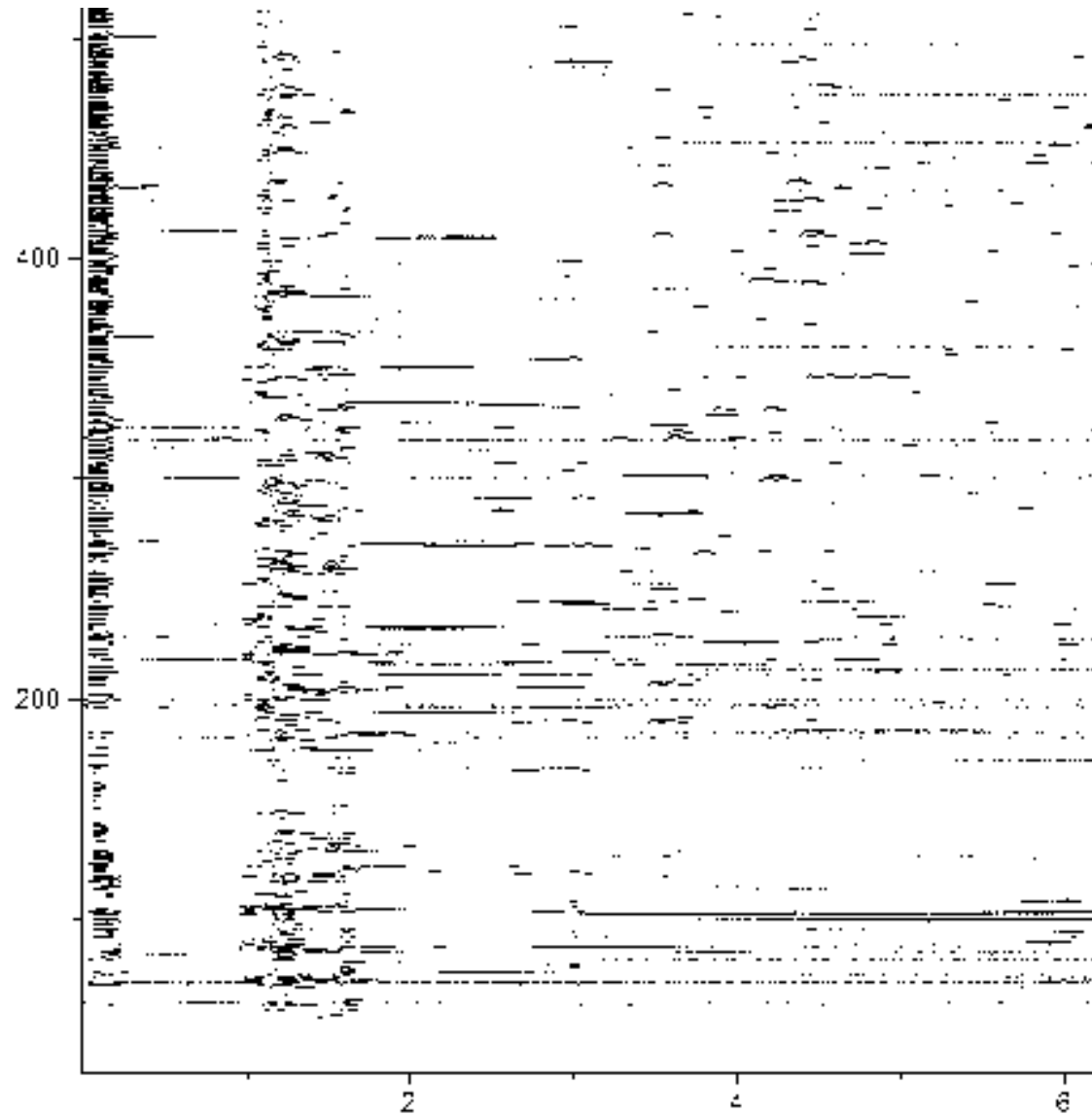


Visualisering Non-Target



signal för 71.0731 Da
(Blå)

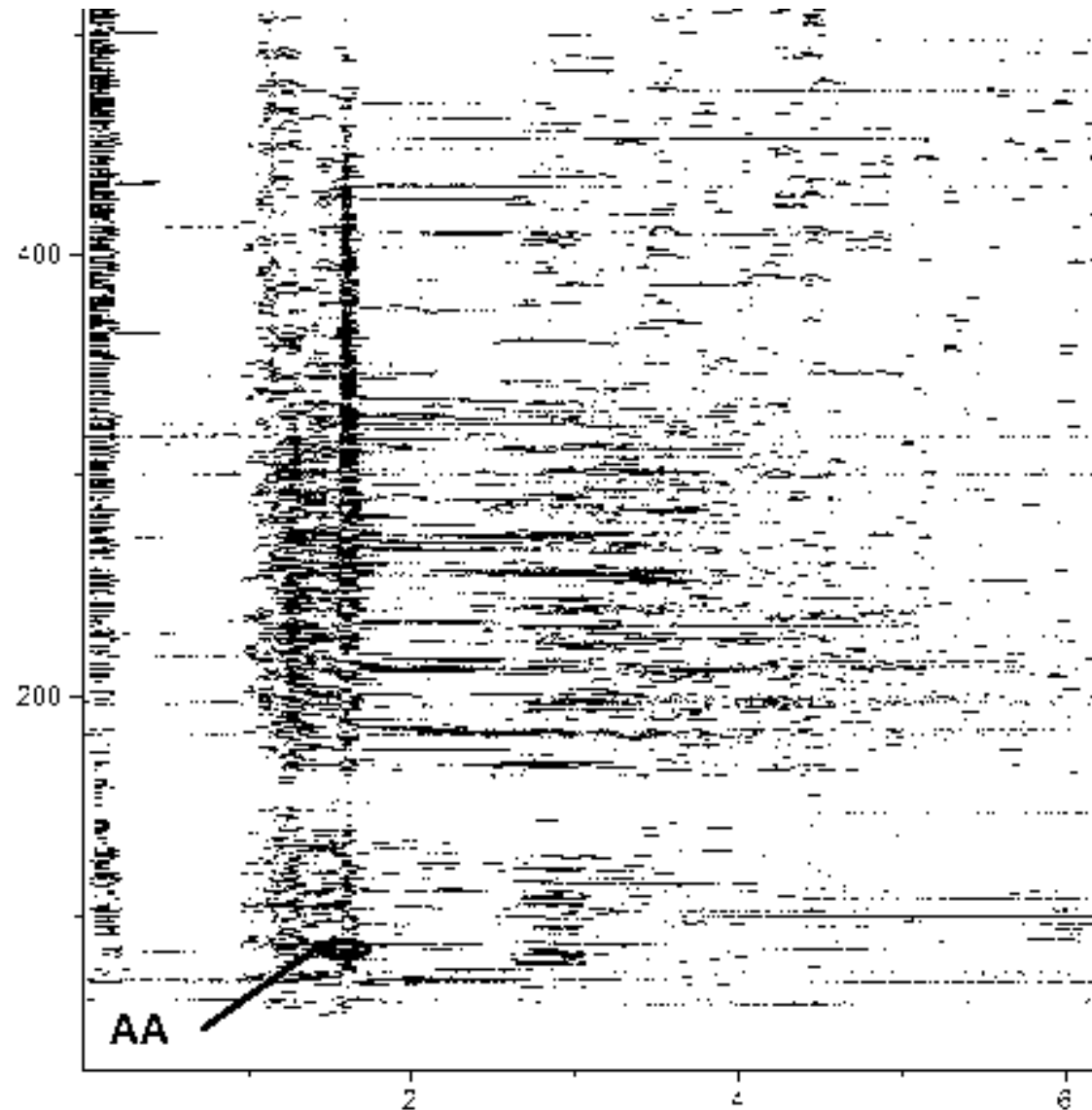
Visualisering Non-Target "Heat Map"



Exempel:

Förutsättningslös
datainsamling av
potatisprov (rått)

Visualisering Non-Target "Heat Map"



Exempel:

Förutsättningslös
datainsamling av
potatisprov (stekt)

*Mjukvara jämför sedan
proverna*

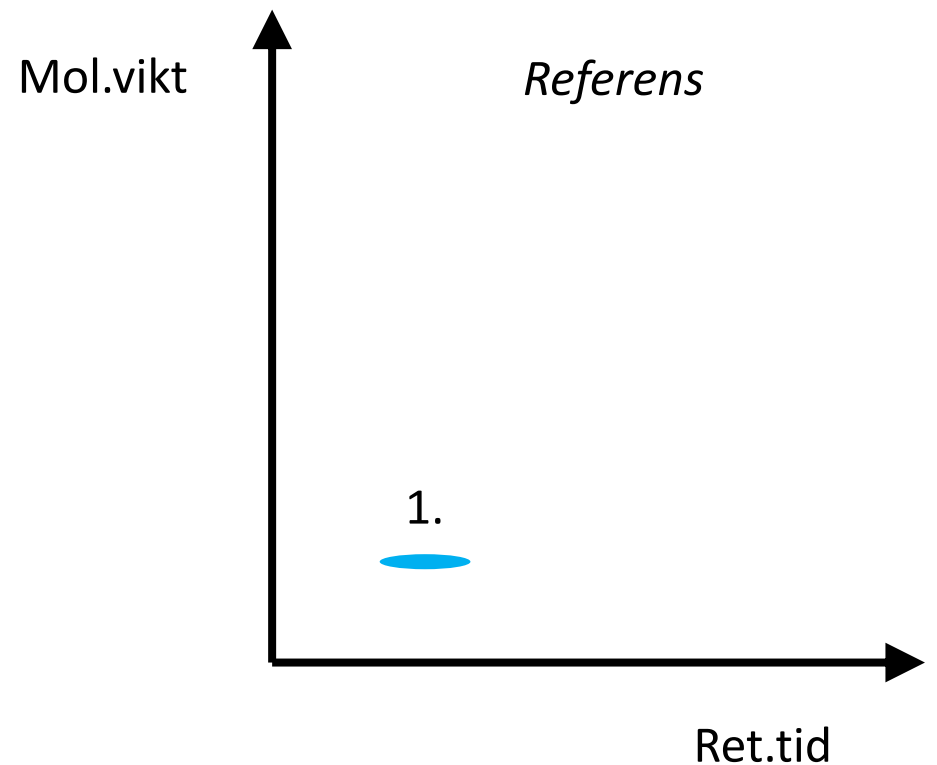
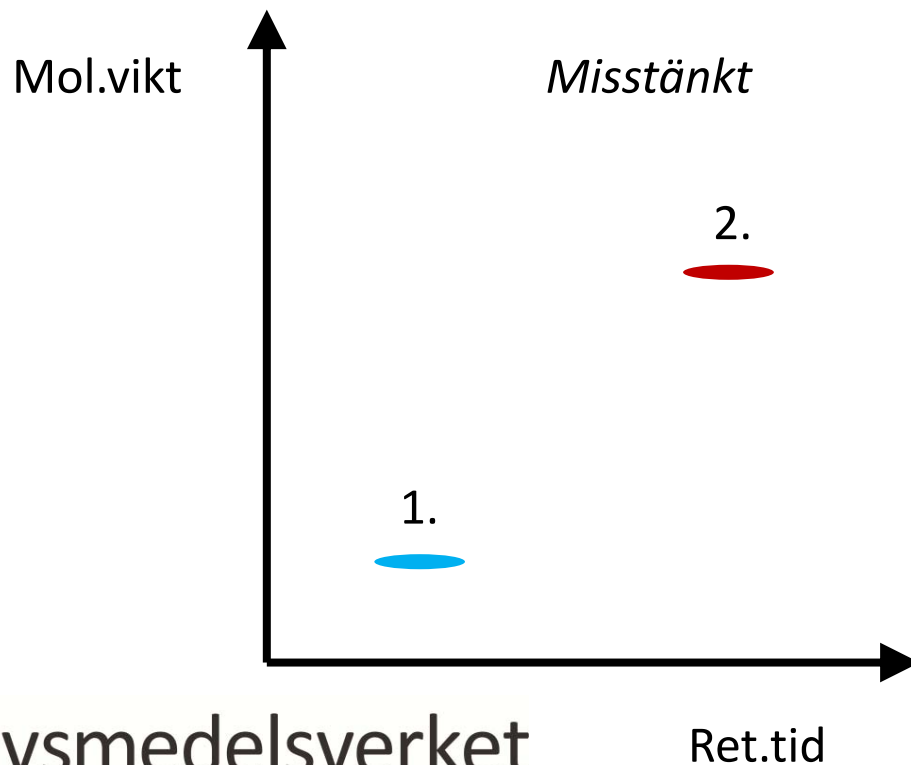
Identifiering Non-Target

- Exempel: största nya signal/topp 71.0371 (± 0.005) Da
- Ger summaformeln C_3H_5NO
- Sökning på C_3H_5NO ger 36 träffar i Chempider (sorterat på antal källor). Vilket av dessa 36 ämnen?
 - Uppmätta symtom?
 - Hur polärt ämne kan uppmätt retentionstid motsvara? In silico retention?
 - Vilken träff är mest sannolik i denna provtyp? Sortera bort orimliga källor (syntesexperiment etc.)
- Kan misstänkt signal fragmenteras (mönster liknande fingeravtryck)?
 - Överensstämmelse med bibliotek/in silico?
- Finns referensstandard?
 - Fastställ retentionstid och jonratio

Användning av Non-Target i projekten

Strategi 1: Fåtal uppenbart utstickande signal(er) – identifiera!

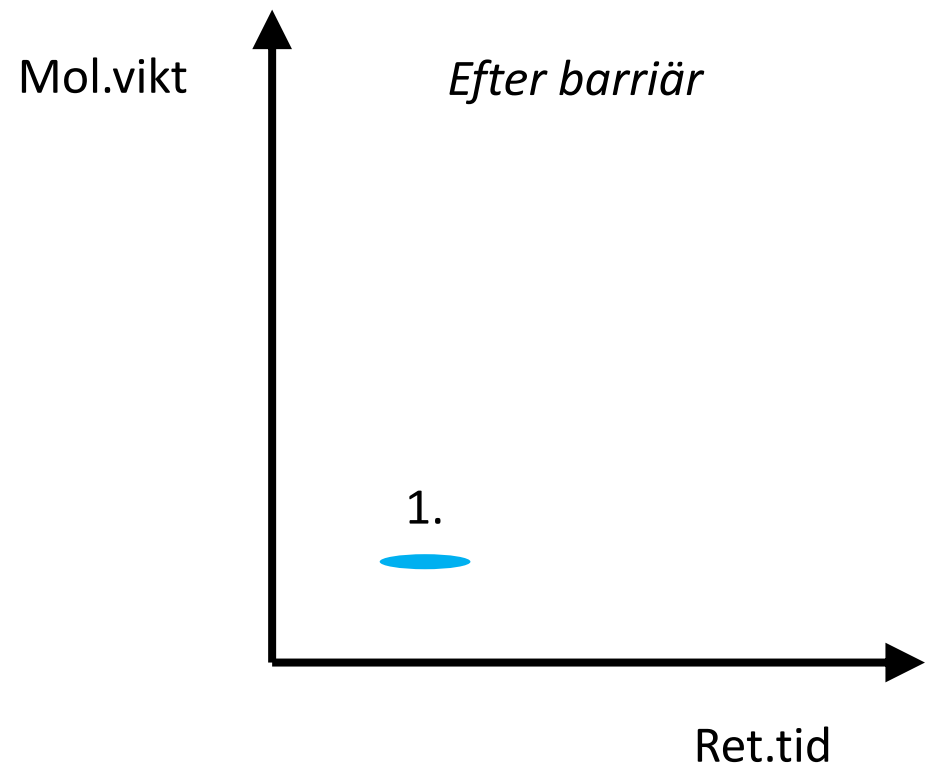
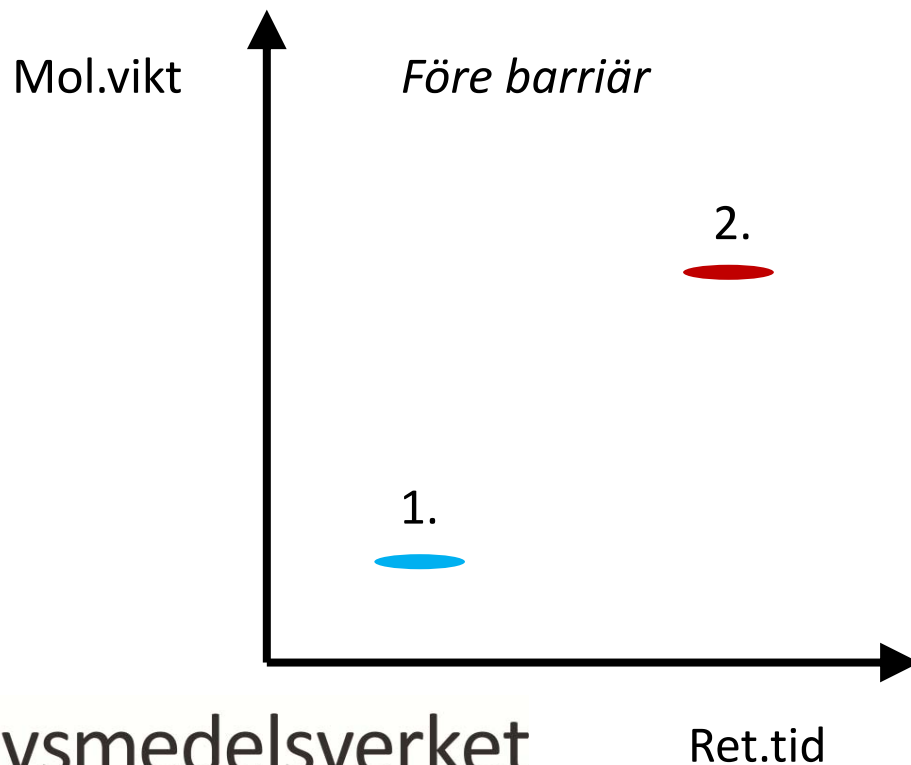
Okända vattenprovet



Användning av Non-Target i projekten

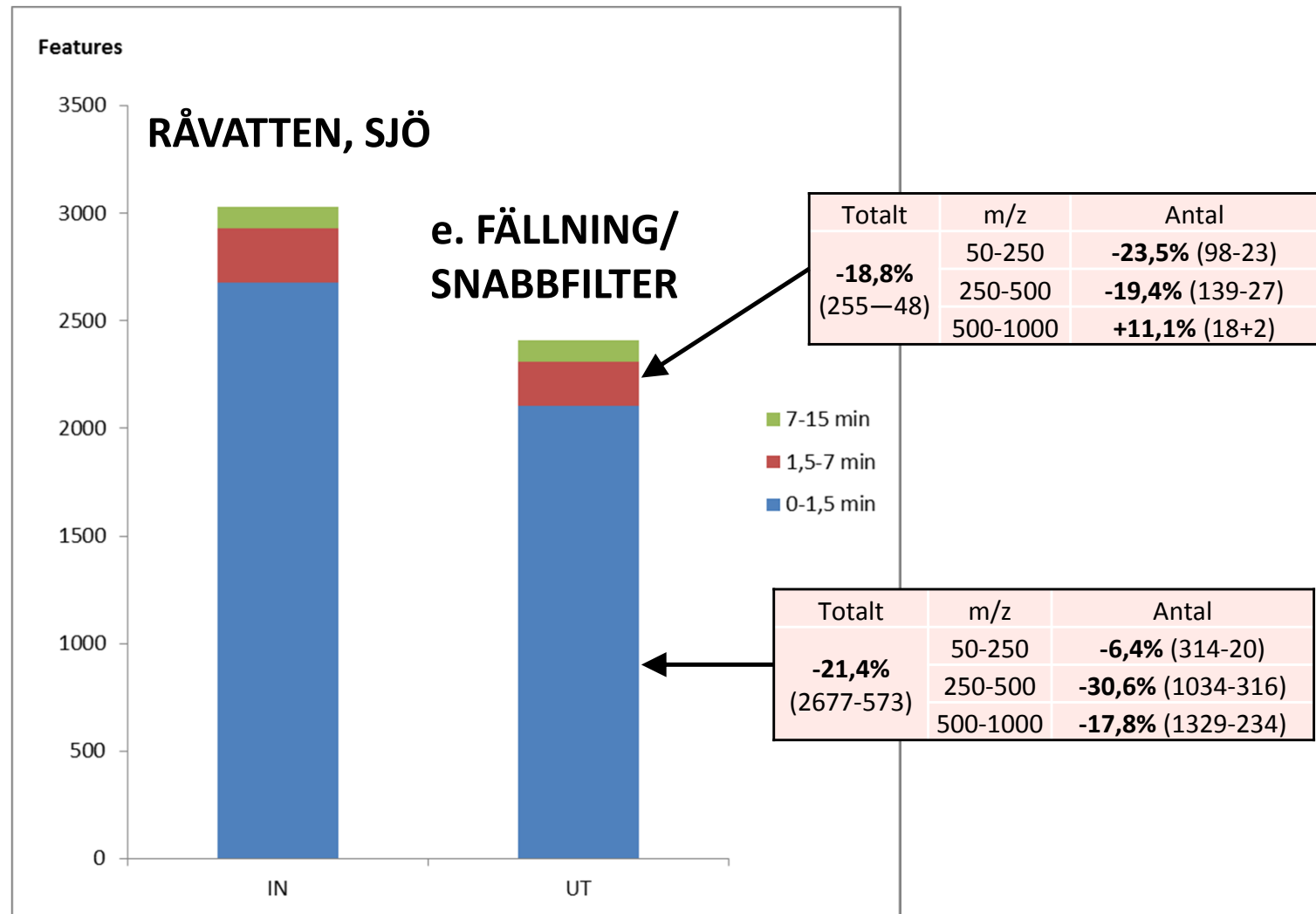
Strategi 1: Fåtal uppenbart utstickande signal(er) – identifiera!

Beredningsprojektet



Användning av Non-Target i projekten

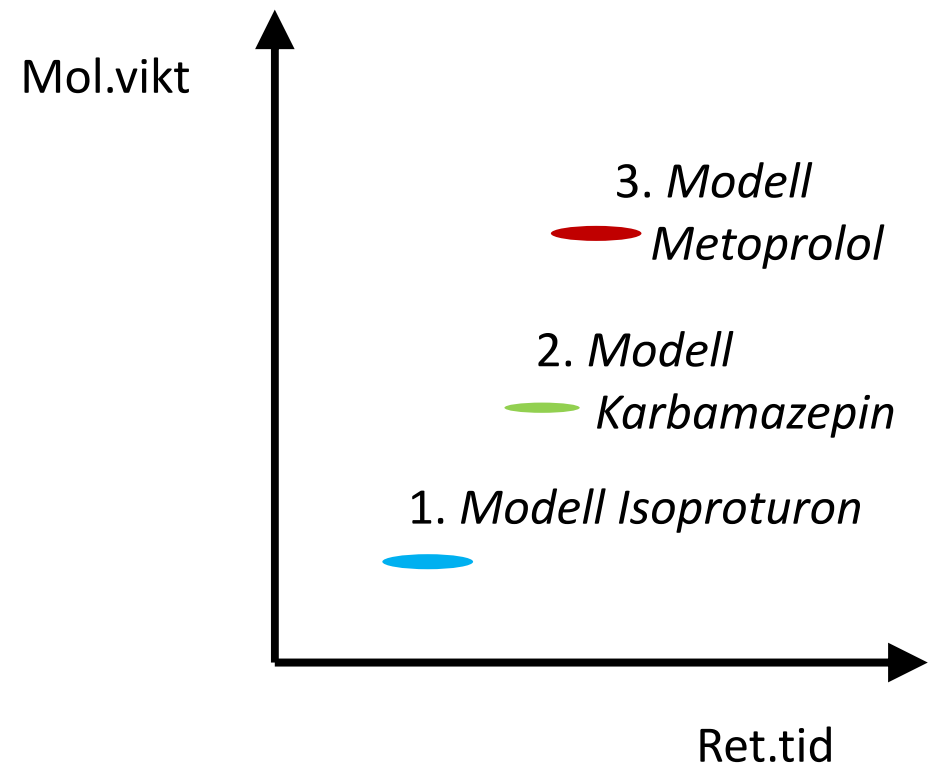
- Strategi 2:
Räkna toppar
- Strategi 3:
Totalarea alt.
Topp-50
före/efter



Användning av Non-Target i projekten

(Beredningsprojektet)

- Strategi 4:
 - Använd utvalda, vanligt förekommande signaler som markörer
 - Med eller utan identifiering
 - Lämpliga kandidater beter sig som kända oönskade ämnen i barriär



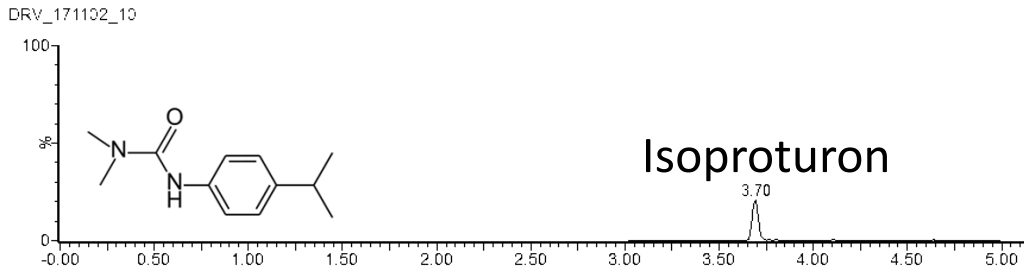
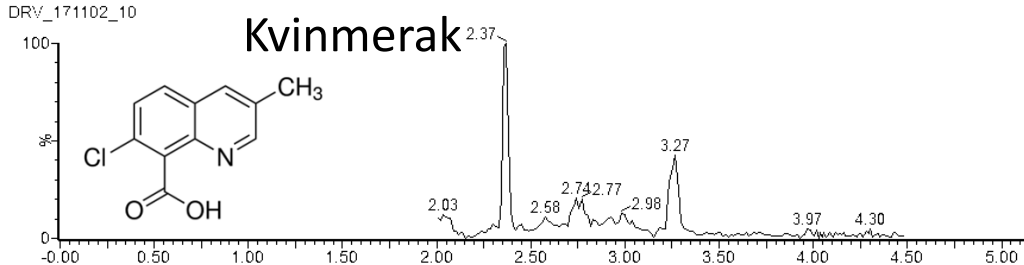
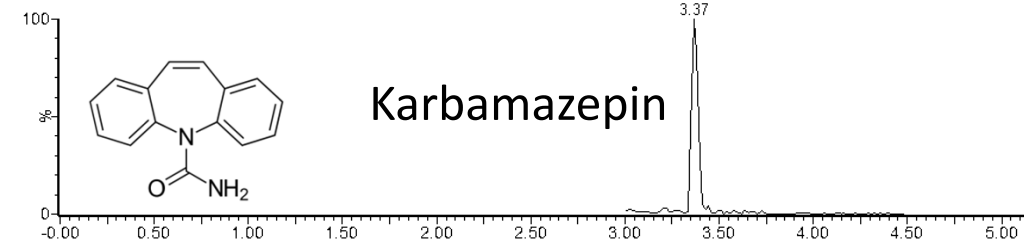
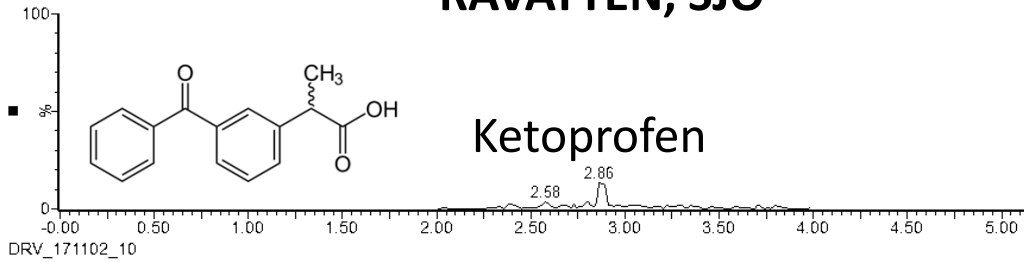
Riktad analys

- 10 ml vattenprov i 15 ml Falconrör
- Thermo Savant SPD2010 SpeedVac
- Temperatur: 65°C
- Vacuum: Auto Run
- Körtid: ca 8h
- Indunstning till 1 ml slutvolym (10x konc.)
- Injicera 100 µl på UHPLC-MS/MS (C₁₈)

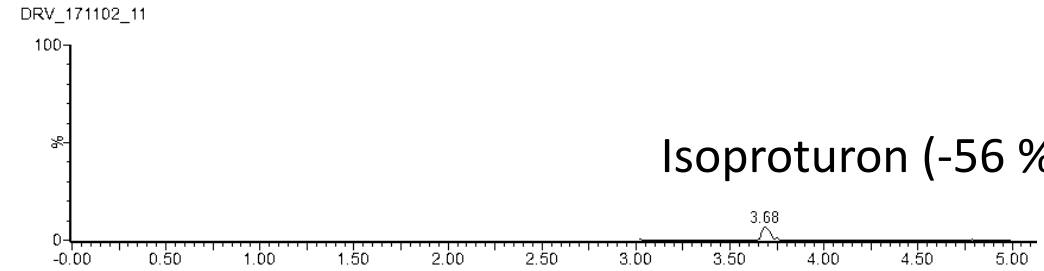
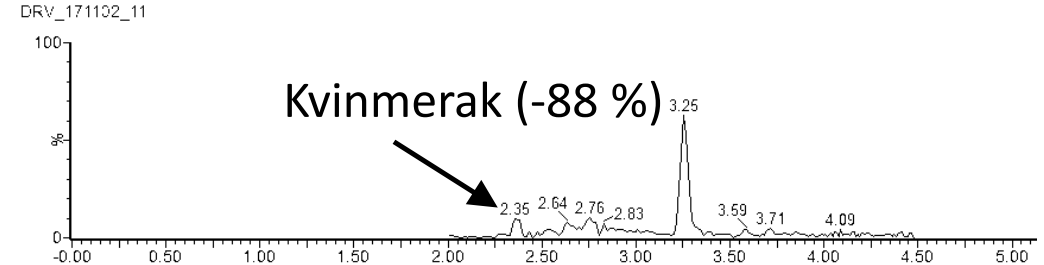
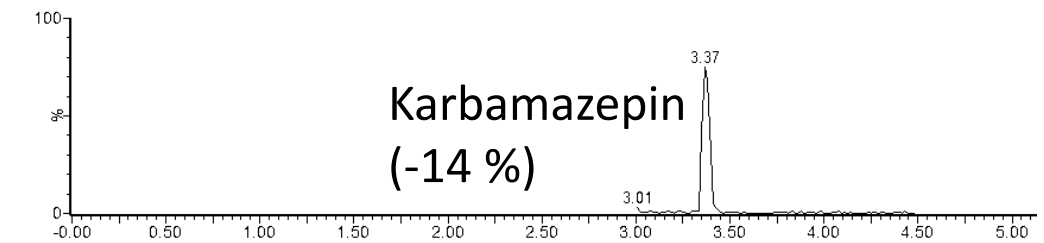
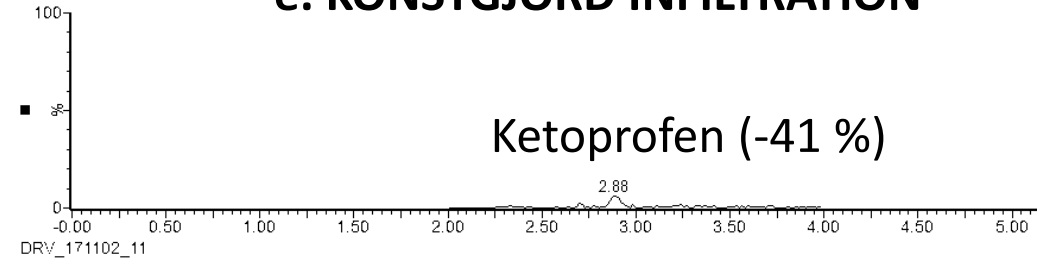


Riktad analys

RÅVATTEN, SJÖ

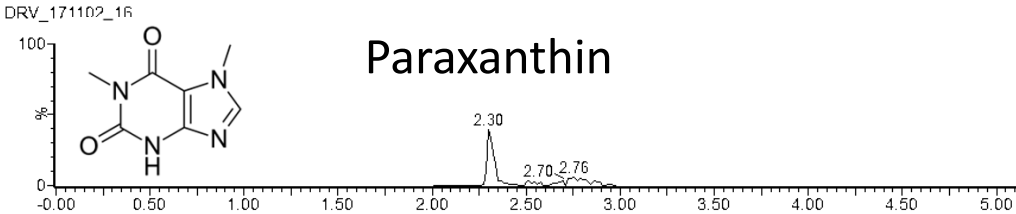
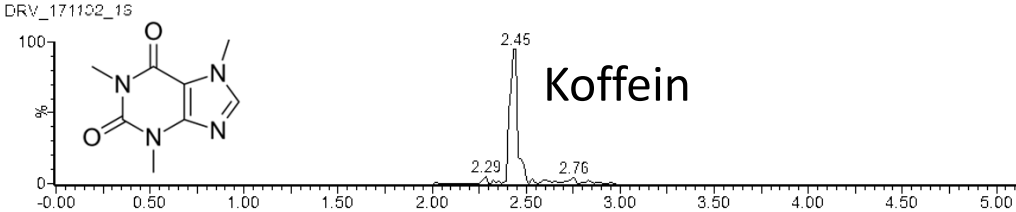
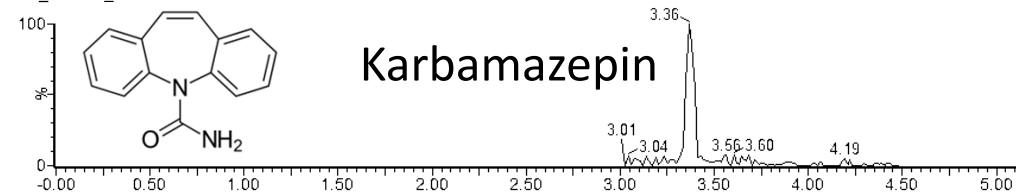
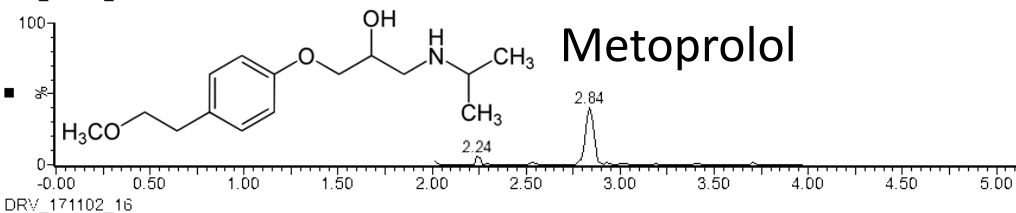
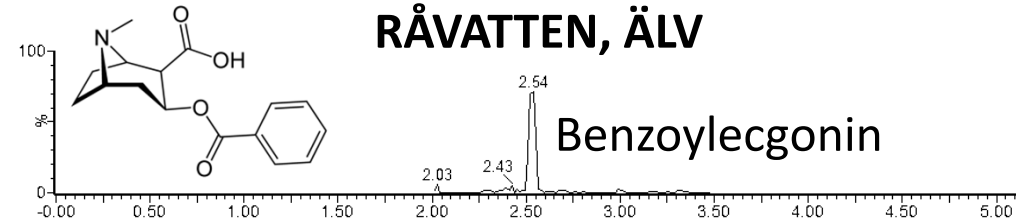


e. KONSTGJORD INFILTRATION

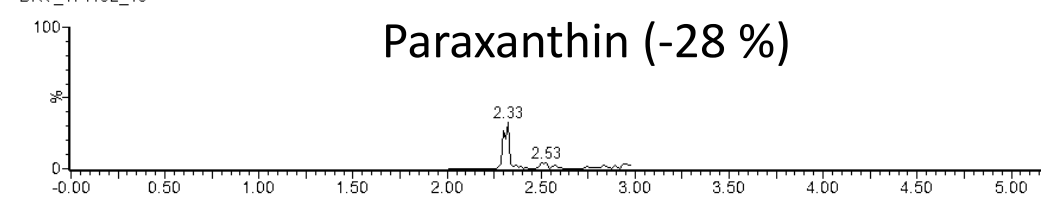
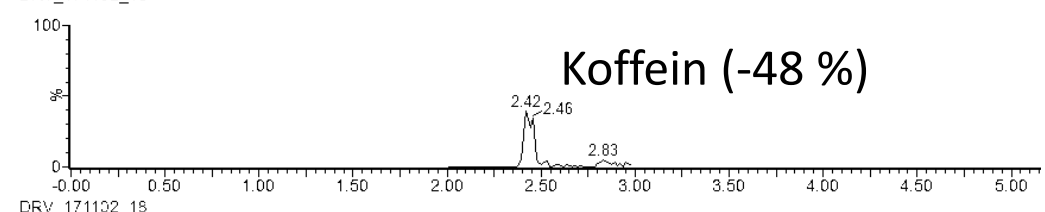
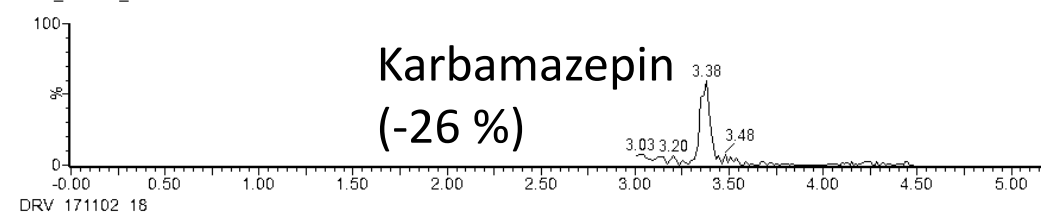
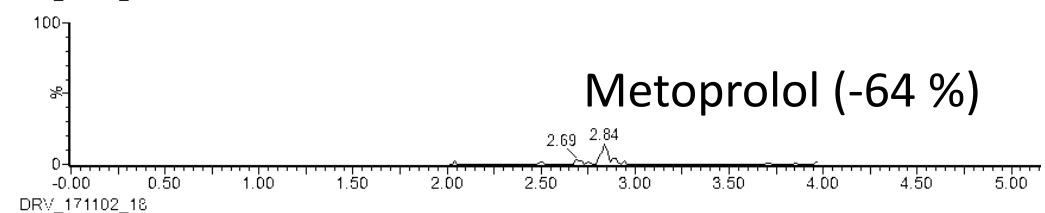
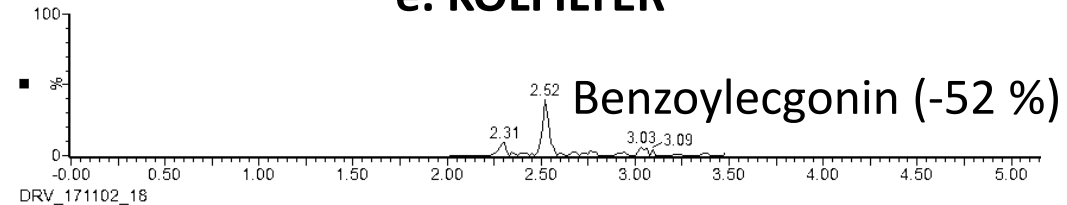


Riktad analys

RÅVATTEN, ÄLV



e. KOLFILTER



Summering

Riktad analys (**Beredningsprojektet**)

- En dussin markörer så här långt med följande spann:
 - Lättanalyserade (enkel upparbetning)
 - Log Kow -1,41 till 3,20 (jmf. metanol -0,77; hexan 3,90)
 - Molekylvikter 176-289 Da
 - Från låg till mycket god avskiljning

Förutsättningslös analys (**Beredningsprojektet; Okända provet**)

- Potentiella tillvägagångsätt framtagna

Tack för er uppmärksamhet!

Frågor?

erik.westerberg@slv.se