

Avancerede analysemetoder giver detaljeret kemisk indsigt i miljø prøver

Oskar Munk Kronik, Københavns Universitet

Vores forbrug påvirker miljøet

Hvor kommer toilettets vand hen, når du skyller ud? Og hvad er der egentlig i det rensede spildevand, når det har været igennem spildevandsrensningsanlæggene? Når naturen kalder efter din morgenrutine bestående af en bolle med ost og en stor kop kaffe, kan vi uden videre skylle ud i toilettet og sende vandet ud på en rejse til spildevandsrensningsanlægget, hvor det renses for fosfor og kvælstof, inden det udledes til vandløb eller havet. Ude af syn, ude af sind.

I det vand, der netop er skyllet ud af toilettet, gemmer der sig information om dine rygevaner, medicinforbrug osv. Det står derfor klart, at vores personlige forbrug påvirker den kemiske sammensætning af indløbsvandet til spildevandsrensningsanlægget og dermed også udløbsvandet. Udover det personlige forbrug har industrielle aktiviteter og overfladeafstrømning fra veje også en markant indvirkning på vandets kemiske sammensætning. Med de mange og meget forskellige kilder kan man nemt forestille sig, hvordan hundredvis af kemiske stoffer kan ende i rensningsanlægget.

Dog analyserer man typisk for langt færre stoffer, blandt andet på grund af de analysemæssige udfordringer ved at undersøge et så stort antal kemiske forbindelser i spildevand. Et studie viser, at kun en brøkdel (cirka 5 %) af den samlede giftighed af spildevandet kan forklares ved de analyserede stoffer. Det betyder, at vi kun har en begrænset idé om, hvad der bidrager til giftigheden i udløbsspildevandet, og at det derfor er udfordrende at udforme den nødvendige lovgivning for at beskytte vandkvaliteten.

Hvor vi i Danmark indtil videre har været så heldige at kunne drikke vores grundvand urensat, drikker store dele af verden overfladevand, som er langt mere udsat for påvirkning fra spildevand. Det er derfor vigtigt at udbygge vores forståelse af, hvilke kemikalier der findes i spildevandet, og hvilke der bidrager til giftigheden – for vores egen og miljøets skyld.

Af den grund har fokus flyttet sig fra udelukkende at analysere et antal forudbestemte stoffer til i stedet at forsøge at analysere alle kemiske stoffer i en spildevandsprøve. Man kan forestille sig, at målrettede analysemetoder er som at tage et par solbriller på med et blåligt filter. Hele verden ses da gennem solbrillerne i blå nuancer, men som Lis Sørensen engang sang, så er *“Verden i farver”*. Sådan er det også med kemisk analyse: Man ser kun det, man kigger efter. Derfor forsøger man i stigende grad at analysere hele det kemiske spænd i en prøve.

Mit ph.d.-projekt undersøgte, hvordan man kunne analysere en større palet af “farver”. Grundet det høje antal kemiske stoffer i spildevand har vi brug for specialiserede analysemetoder for at kunne identificere ukendte stoffer.

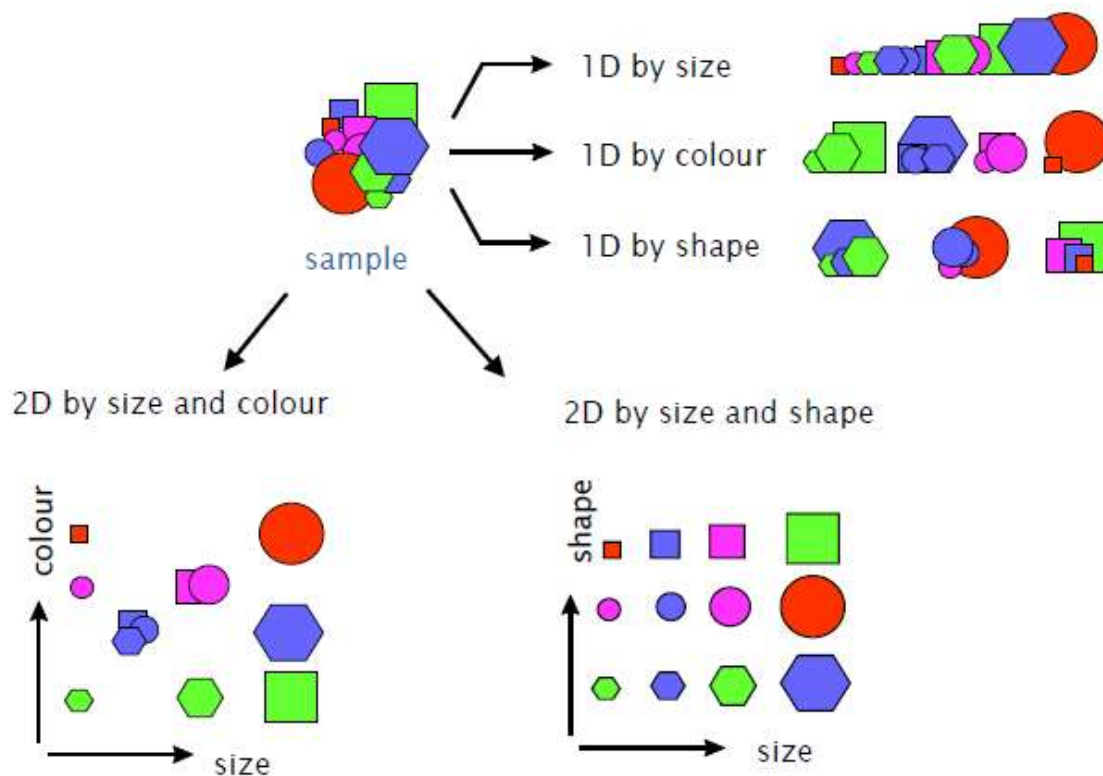
Avancerede analysemetoder giver større indsigt

Mit ph.d.-projekt havde som hovedformål at bidrage til udviklingen af kraftfulde analysemetoder til identifikation af ukendte kemikalier i komplekse prøver såsom spildevand. Kemisk analyse af vandprøver foretages hovedsageligt ved hjælp af to teknikker, som har til hensigt først at adskille (kromatografi) de kemiske stoffer i en prøve på baggrund af deres kemiske egenskaber, såsom fedtopløselighed, og derefter at måle deres masse eller mere præcist deres masse-til-ladning-ratio (massespektrometri). Denne kombination forkortes i fagkredse til LC-HRMS.

Ved at sammenholde et kemisk stofs kromatografiske data og molekylvægt kan man komme tættere på identiteten af et ukendt stof. LC-HRMS har været en af de mest banebrydende teknikker til analyse af komplekse miljøprøver med flere hundrede eller tusinder af stoffer. Metoden har dog en umiddelbar begrænsning: Hvad gør man, hvis to stoffer enten vejer det samme eller har identiske kromatografiske data? I så fald kan man ikke adskille dem hverken kromatografisk ved hjælp af et kemisk parameter eller ved massespektrometri.

Dette er en situation, man ofte ender i, når man undersøger mange kemiske stoffer, og netop dette problem adresserer min ph.d. I sådanne tilfælde er det nødvendigt at anvende flere kemiske parametre for at kunne adskille stofferne og dermed blive mere sikker på deres kemiske identitet. I mit ph.d.-projekt har jeg anvendt todimensionel væskechromatografi (LC×LC)-HRMS, som netop bruger to kemiske parametre til at adskille prøvens kemiske stoffer.

I figur 1 ses en konceptuel illustration af motivationen bag og fordelene ved at anvende LC×LC. Figuren viser en blanding af former, størrelser og farver. Ingen af disse parametre kan alene adskille klodserne (sample), så de ikke overlapper i nogen af kategorierne – dette svarer til LC-HRMS. Når man derimod vælger to parametre med omhu, kan man adskille klodserne, så der ikke er overlap vha. størrelse og form. Det samme gør sig gældende i LC×LC, hvis de kemiske parametre vælges korrekt.



Figur 1. Illustration af det underliggende princip i LC×LC. Tak til Asger B. Hansen for lån af figur.

Når man først har valgt sine to kemiske parametre med omhu, kan man analysere spildevandsprøverne. Her opstår den næste udfordring: Datafilerne kan variere i størrelse fra 5 til 14 GB. Ønsker man at analysere mange prøver, f.eks. 100, kræver det meget kraftige computere at behandle så store datamængder. I starten af min ph.d. fandtes sådanne data-workflows ikke, og det var derfor ikke muligt at udnytte det fulde potentiale af de indsamlede data.

Gennem mit ph.d.-arbejde har jeg programmeret et workflow, som er flere hundrede gange hurtigere end sammenlignelige algoritmer og samtidig udnytter den todimensionelle datastruktur. Jeg har kaldt dette workflow *Mosaic*, da LC×LC-HRMS-data visuelt minder om en mosaik. Udnyttelsen af den todimensionelle datastruktur øger kvaliteten af de resultater, man får fra workflowet, blandt andet gennem bedre støjfiltrering. Dermed styrkes grundlaget for identifikation af ukendte stoffer, og vi kan have større tillid til de konklusioner, vi drager.

Perspektiver

Min ph.d. har gennem seks peer-reviewede artikler bidraget med anbefalinger til valg af analysemetoder til komplekse miljø- og biologiske prøver, udviklet data-workflows og udfordret

eksisterende teori inden for både kemiske analysemetoder og databehandling. For den bredere offentlighed kan ph.d.-arbejdet ses som et skridt på vejen væk fra kun at kigge på én farve ad gangen og i stedet se verden, som den er – nemlig *i farver*.

I fremtiden vil risikovurderinger af spildevandets giftighed kunne forbedres ved hjælp af mere avancerede analysemetoder. Forhåbentlig kan dette pege i retning af et renere miljø og renere vand til alle.