



UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI
DI PADOVA

PFAs in Veneto: da sostanze emergenti ad emergenza ambientale

Sara Bogialli

Dipartimento di Scienze Chimiche

e-mail: sara.bogialli@unipd.it



Padova, 7 giugno 2016



Emerging contaminants (ECs)

“sostanze o materiali naturali o sintetici
che evidenziano un qualche fattore di rischio,
o il cui pericolo associato potrà rappresentare
un fattore di rischio
nel futuro per l'uomo o l'ambiente.”

Gli ECs possono essere composti per cui sono stati individuati:

- Una nuova via di esposizione
- Un nuovo pericolo.
- Un aumento della sensibilità nella popolazione umana o animale.

Food additives

Transformation products

Cosmetics and sunscreens

Prions Disinfection by-products

Flame-retardants Musk fragrances Hormones

Drugs of abuse Algal toxins

Brominated compounds Particulate matter

personal care products (PCPs)

Pharmaceuticals Benzotriazoles Artificial sweeteners

Naphthenic acids Ionic liquids

Perfluorinated compounds (PFCs) Nanomaterials

Contaminanti (o sostanze) emergenti nell'ambiente

Se non abbiamo informazioni tossicologiche
si parla di **sostanze emergenti**



Se dati sperimentali robusti
dimostrano la tossicità e un rischio di esposizione,
diventa **un inquinante**.
Vorremmo che non fosse presente nell'ambiente.

concentrazione zero ?





Le acque destinate ad uso potabile: un percorso di legge

La valutazione tossicologica non è sufficiente
per derivare un valore di legge

Concentrazione con rischio accettabile
(ASSENTE NON ESISTE!)

Devo poter misurare la concentrazione
valutata come tossica

Il contaminante deve essere
effettivamente presente nell'acqua

Deve esser possibile ridurre la
concentrazione nell'acqua trattata

Contaminanti emergenti nell'ambiente

Inquinanti non inclusi nei monitoraggi europei di routine, ma che possono rappresentare un rischio potenziale che richieda una regolamentazione.

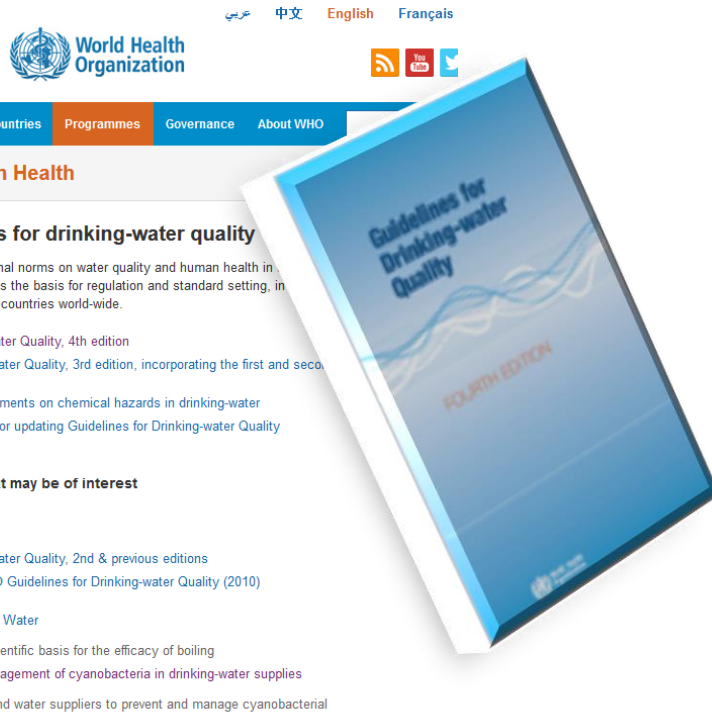


Necessario determinarli alle concentrazioni di interesse

I valori guida (Guideline Values) GV

I valori guida proposti dall'OMS (WHO)
non sono di legge, devono essere adottati dallo specifico stato legiferante:

- ❑ Water Framework Directive 2000/60/EU > **D.lgs. 152/2006**
- ❑ Drinking water 98/83/EC > **D.lgs. 31/2001**



EFSA ha un dossier per gli alimenti.
“TDI for PFOS of 150 ng/kg b.w. per day (UF of 200 to the NOAEL).
The CONTAM Panel noted that the indicative dietary exposure of 60 ng/kg b.w. per day is below the TDI but that the highest exposed people within the general population might slightly exceed this TDI”.

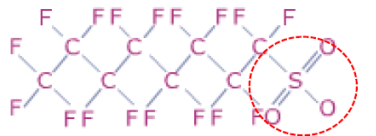
<http://www.efsa.europa.eu/it/efsajournal/pub/653>

Non c'è per
PFAs

Sostanze perfluoroalchiliche (PFAs)

Da perfluorinated
compounds (PFCs)

Perfluoroalchil solfonati	
PFBS	$C_4F_9SO_3^-$
PFHxS	$C_6F_{13}SO_3^-$
PFOS	$C_8F_{17}SO_3^-$



PFOS (Perfluorooctane sulfonate)

Perfluoroalchil carbossilati	
PFBA	C_3F_7COOH
PFPeA	C_4F_9COOH
PFHxA	$C_5F_{11}COOH$
PFHpA	$C_6F_{13}COOH$
PFOA	$C_7F_{15}COOH$
PFNA	$C_8F_{17}COOH$
PFDA	$C_9F_{19}COOH$
PFUnA	$C_{10}F_{21}COOH$
PFDoA	$C_{11}F_{23}COOH$



PFOA (Perfluorooctanoic acid)

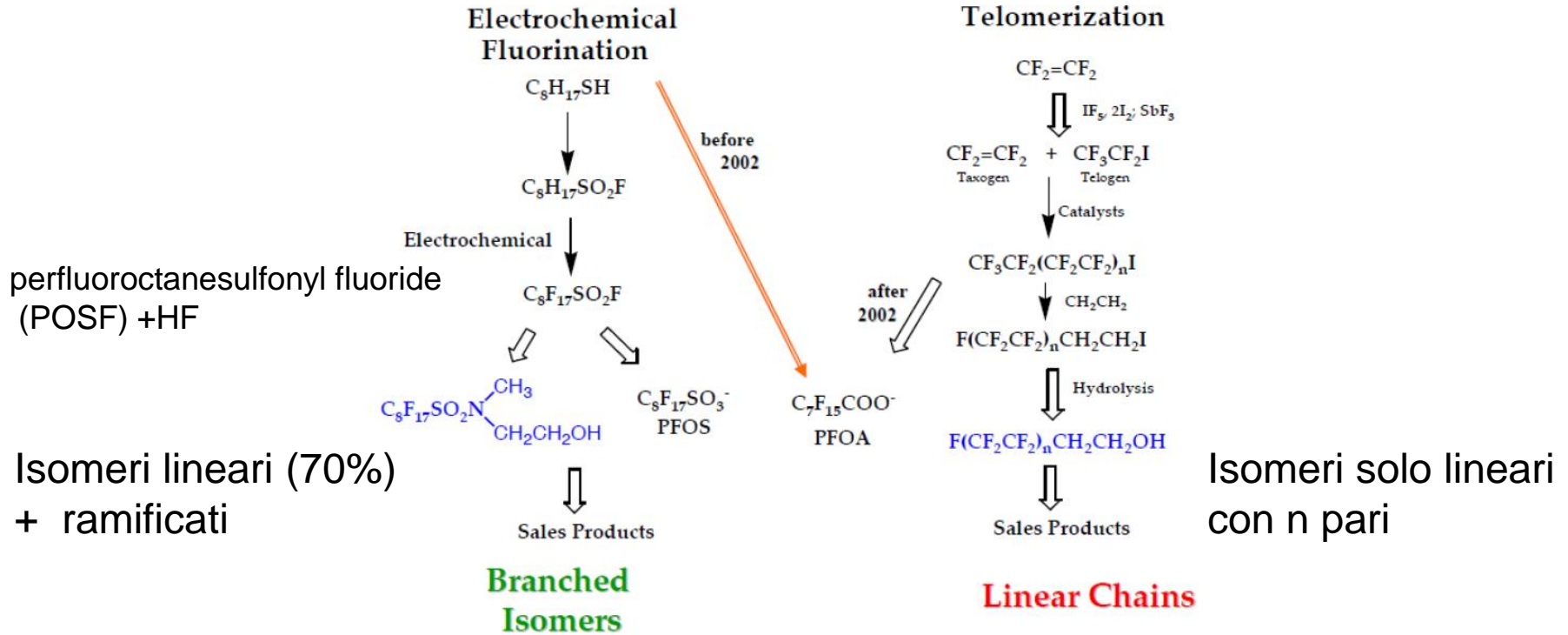
Ci sono anche sulfonamidi, alcoli, esteri e altri derivati, tensioattivi e polimeri organici fluorurati
> perfluoroalkyl substances **PFAs**

Resistenti chimicamente e termicamente: alla fotolisi, idrolisi, ossidazione scarsamente biodegradabili. Bassa tensione superficiale, idro e lipofobici.

I polimeri degradano in PFC più piccoli

Tempi di emivita ca 9 anni per PFOS, 5 per PFOA

Sostanze perfluoroalchiliche (PFAs)



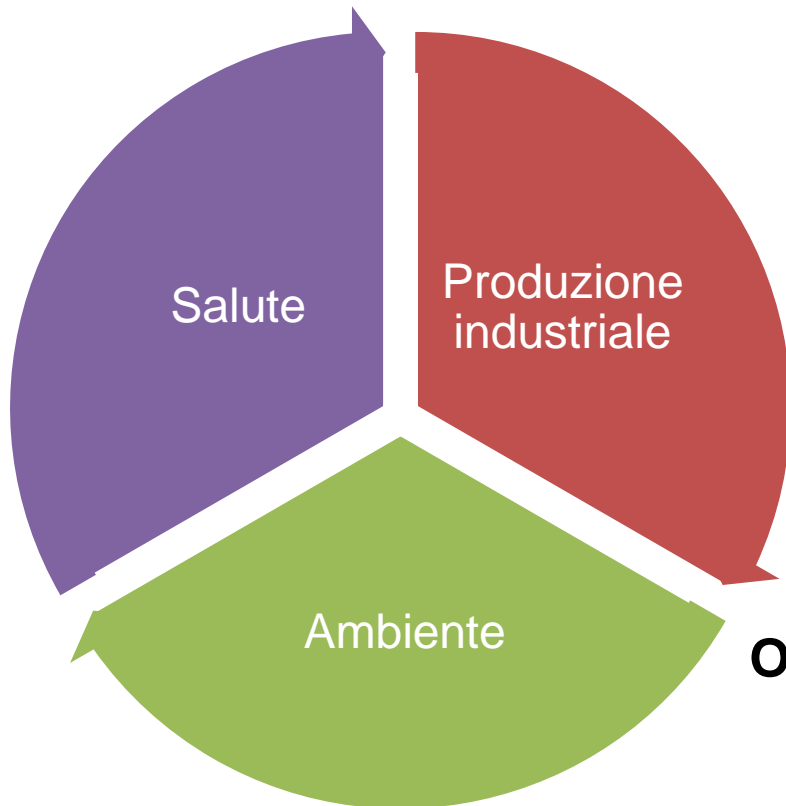
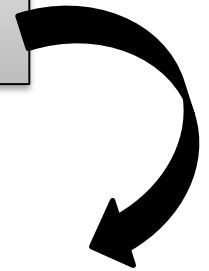
Diffusi nell'ambiente: additivi in prodotti industriali e di consumo: PFOA precursore del Teflon™, Gore-tex™, rivestimenti protettivi per tessuti, trattamenti carta, metallizzazione, prodotti fotografici, prodotti inerti per pesticidi, food packaging, schiume antincendio, sensori, applicazioni biomediche, shampoo, etc.)

PFAs: cominciò così...

DuPont sversamento di PFOA anni '50
[C8 Health project](#) (2005-2013)



La 3M (USA) elimina il
PFOS dalla produzione
dal 2001



**Organisation for Economic Co-operation
and Development ([OECD](#))**

Nel 2000 tavolo di lavoro per risk
assessment di PFOS

Il ciclo normativo degli PFAs

Dec. 2009/543,544,563/CE esclusione dell'attribuzione del marchio ecolabel nei casi di utilizzo di PFOS e PFOA

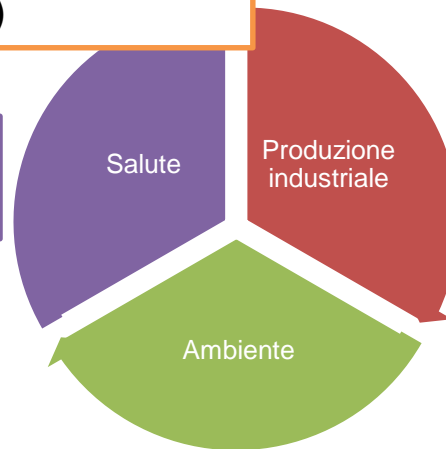
Reg. 944/2013/EU PFOA nella *Candidate List of Substances of Very High Concern for Authorisation (SVHC)* e classificato come tossico per la riproduzione (IB)

2006
Altre 8 grandi compagnie (USA) rinunciano al PFOA

La 3M (USA) elimina il PFOS dalla produzione 2000-2002

Rac. 2010/161/EU sul controllo di PFAs negli alimenti

Reg. 757/2010/EU PFOS nella convenzione di Stoccolma



(OECD)
Nel 2000 informale tavolo di lavoro per risk assessment di PFOS

Dir. 2013/39/EU
PFOS come SQA per acque



PFOS come POPs

REGOLAMENTO (UE) N. 757/2010 DELLA COMMISSIONE

del 24 agosto 2010 recante modifica del regolamento (CE) n. 850/2004 del Parlamento europeo e del Consiglio relativo agli inquinanti organici persistenti per quanto riguarda gli allegati I e III

«La nona sostanza, l'acido perfluorottano sulfonato e i suoi derivati (PFOS), è tuttora ampiamente utilizzata a livello mondiale, sicché la COP4 ha deciso di inserirla nell'allegato B (limitazione) con una serie di deroghe » .

- I. l'uso dei PFOS sia gradualmente abbandonato non appena l'uso di alternative più sicure diventi tecnicamente ed economicamente praticabile;
- II. una deroga possa essere confermata solo per usi essenziali per i quali non esistano alternative più sicure e in relazione ai quali siano state comunicate le iniziative prese per individuare tali alternative;
- III. i rilasci di PFOS nell'ambiente siano limitati al massimo applicando le migliori tecniche disponibili



United States
Environmental Protection
Agency

FACT SHEET PFOA & PFOS Drinking Water Health Advisories

Overview

EPA has established health advisories for PFOA and PFOS based on the agency's assessment of the latest peer-reviewed scientific information, water system operators, and state, tribal and local officials' primary responsibility for overseeing these systems, with the health risks of these chemicals, so they can take the steps necessary to protect their residents. EPA is committed to support water systems as they determine the appropriate steps to take to reduce PFOA and PFOS in drinking water. As science on health risks of these chemicals evolves, EPA will continue to evaluate new information.

Background on PFOA and PFOS

PFOA and PFOS are fluorinated organic chemicals that are part of a group of chemicals referred to as perfluoroalkyl substances (PFAS). PFOA and PFOS have been the most extensively produced and studied of these chemicals. They have been used to make carpets, clothing, fabrics for furniture, paper packaging for food and other materials (e.g., cookware) that are resistant to water, grease or stains. They are also used for firefighting at airfields and in a number of industrial processes.

Because these chemicals have been used in an array of consumer products, most people have been exposed to them. Between 2000 and 2002, PFOS was used in a number of products, including fire-fighting foams.

... produced or used to manufacture other products or an airfield at which they were used for firefighting.

EPA's 2016 Lifetime Health Advisories

EPA develops health advisories to provide information on contaminants that can cause human health effects and are known or anticipated to occur in drinking water. **EPA's health advisories are non-enforceable and non-regulatory** and provide technical information to states agencies and other public health officials on health effects, analytical methodologies, and treatment technologies associated with drinking water contamination. In 2009, EPA published provisional health advisories for PFOA and PFOS based on the evidence available at that time. The science has evolved since then and EPA is now replacing the 2009 provisional advisories with new, lifetime health advisories.

FACT SHEET

PFOA & PFOS Drinking Water Health Advisories

EPA's 2016 Lifetime Health Advisories, continued

To provide Americans, including the most sensitive populations, with a margin of protection from a lifetime of exposure to PFOA and PFOS from drinking water, EPA established the health advisory levels at 70 parts per trillion. When both PFOA and PFOS are found in drinking water, the combined concentrations of PFOA and PFOS should be compared with the 70 parts per trillion health advisory level. This health advisory level offers a margin of protection for all Americans throughout their life from adverse health effects resulting from exposure to PFOA and PFOS in drinking water.

70 ppt (ng/L) come PFOS+PFOA

EPA's health advisory levels were calculated to offer a margin of protection against adverse health effects to the most sensitive populations: fetuses during pregnancy and breastfed infants. The health advisory levels are calculated based on the drinking water intake of lactating women, who drink more water than other people and can pass these chemicals along to nursing infants through breastmilk.

Non è un limite di legge, che EPA (USA) non ha emanato



Come comincio in Italia_ monitoraggi di acque

TABLE 1. Mean Concentrations of PFCAs in European River Water (ng/L)

	PFHxA	PFHpA	PFOA	PFNA
Dalälven	<0.94 ^a	0.36	<0.97	<0.14
Vindelälven	<0.58	0.20	<0.65	0.22
Kalix Älv	<0.58	0.26	<0.85	<0.14
Elbe	15.4	2.7	7.6	0.27
Oder	2.2	0.73	3.8	0.73
Vistula	2.3	0.48	3.0	0.36
Po	19	6.6	200	1.46
Danube	3.0	0.95	16.4	0.27
Daugava	<1.4	0.86	<2.2	0.36
Seine	13.3	3.7	8.9	1.26
Loire	3.4	0.90	3.4	0.43
Thames	32	4.1	23	0.79
Rhine (February 2006)	18.2	1.8	11.6	0.55
Rhine (August 2006)	3.3	3.3	12.3	1.50
Guadalquivir	6.2	1.58	4.6	1.02

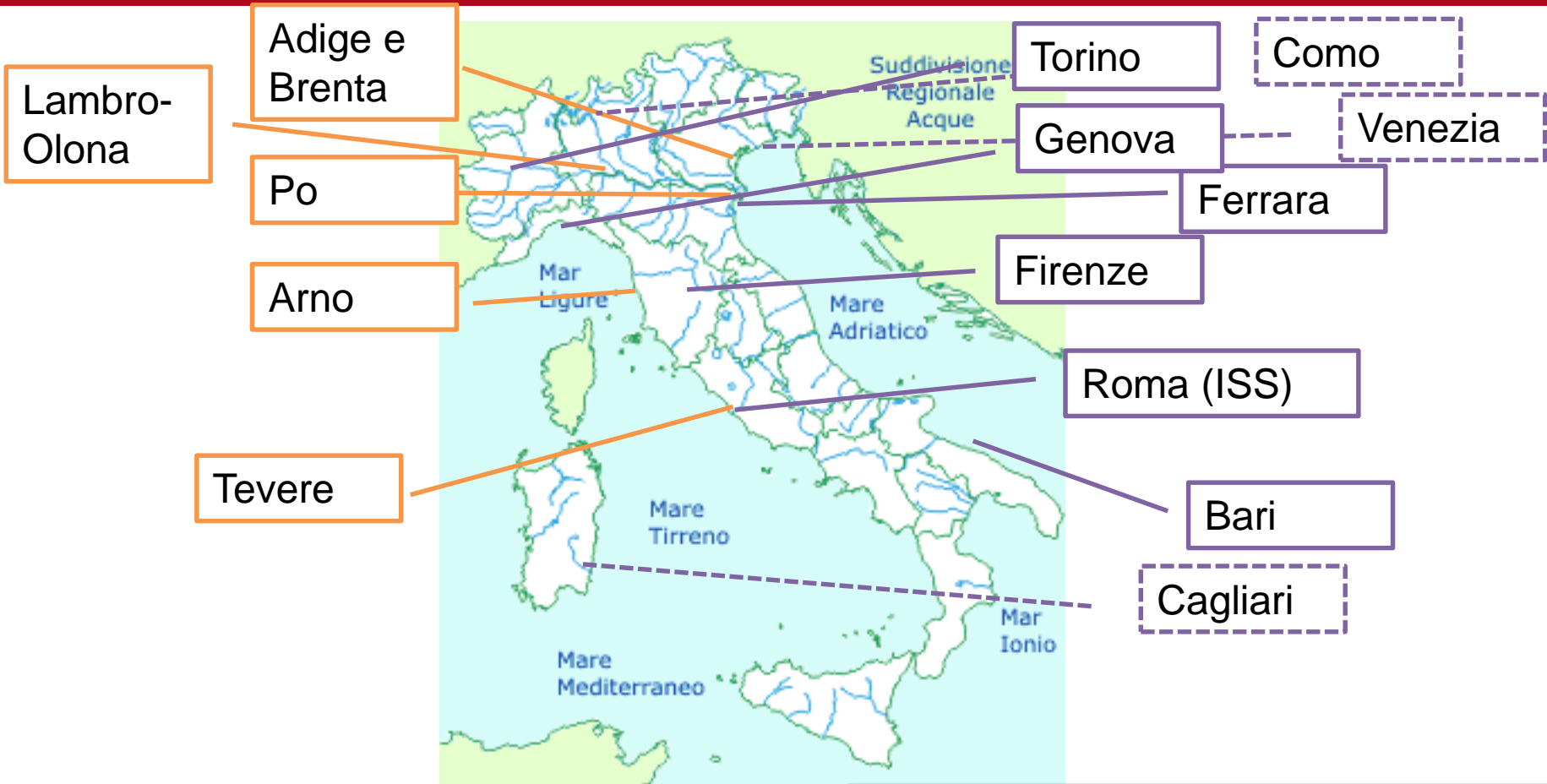
^a "<" denotes values below the MDL

Da: McLachlan et al. (2007) Riverine discharge of per
Environ. Sci. Technol 41, 7260-7265

- EU_progetto PERFORCE_2006 (alte conc. di PFOA nel Po)
- Italia_ progetto pilota AMGA_2009-2011 (acque potabili)
- Italia_progetto Ministero Ambiente_CNR-IRSA 2011-2013



I due monitoraggi significativi





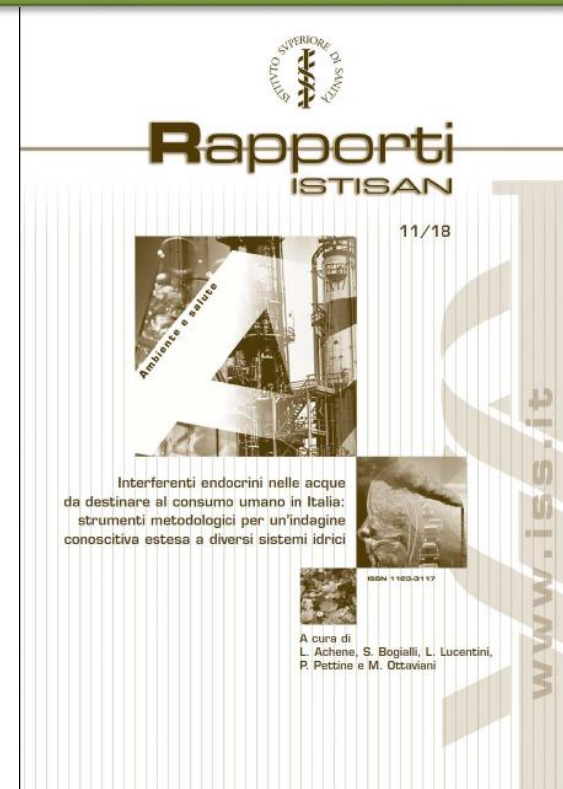
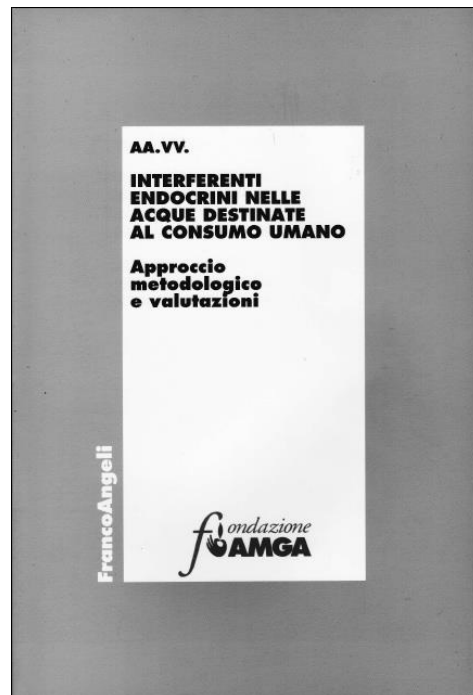
Italia_ prime indagini volontarie_2009-2011



*Per una gestione sostenibile
delle risorse idriche e la tutela dell'ambiente*

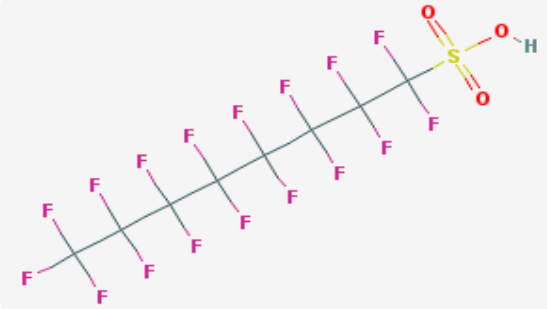
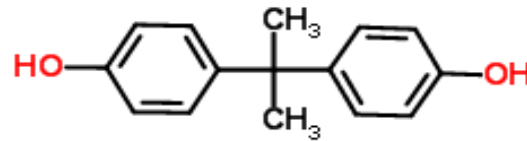
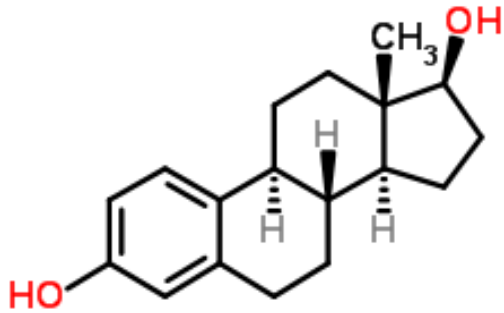


Fondazione AMGA promuove e finanzia uno studio tra alcuni dei maggiori acquedotti italiani prima che ci sia una legislazione in merito



Cosa abbiamo cercato?

Composti selezionati



Ormoni

- β -Estradiolo
- Estrone
- 17α -etinilestradiolo

Sottoprodotti delle plastiche

- Bisfenolo A
- Nonilfenolo
- Tert-octilfenolo

Composti perfluorurati

- PFOS
- PFOA
- 11 PFAs

Livelli di concentrazioni di interesse?

Ricerca

- Ottimizzare il metodo di analisi
- Concentrazioni basse

30-50 nanogrammi/litro (ng/L)



3-5 g circa



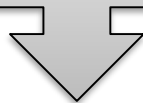
40 piscine olimpioniche
100 milioni di litri!



Quali tecniche analitiche?

Abbiamo bisogno di avere informazioni sulla struttura dei composti

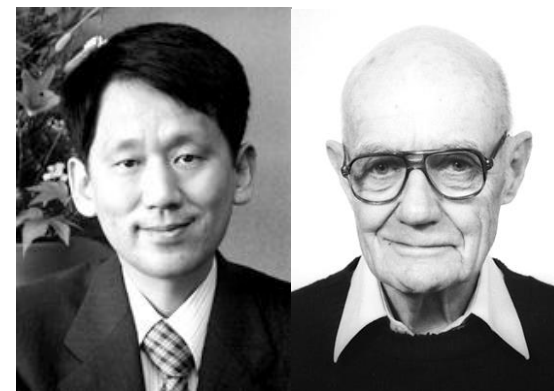
L'analisi chimica è fondamentale.
La tecnica più all'avanguardia per sensibilità e selettività



Cromatografia- Spettrometria di massa

“La spettrometria di massa è l'arte di misurare gli atomi e le molecole per determinare il loro peso molecolare. Tali informazioni sulla massa o sul peso sono qualche volta sufficienti, frequentemente necessarie, e sempre utili per determinare l'identità delle specie”

John B. Fenn, (1/4) Nobel in chemistry_2002



Tanaka (1/4) Fenn (1/4)
(Wüthrich 1/2) ¹⁸

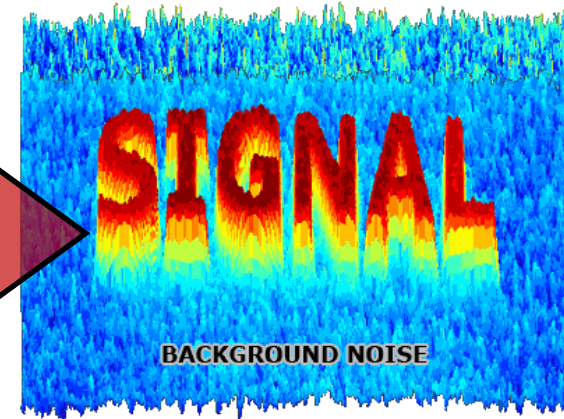
PFAs: sono dappertutto... sono tra noi



- Valutare le contaminazioni
- Ring test

Nelle plastiche, Teflon™,
(recipienti, membrane
dei deionizzatori,
cartucce per estrazione,
tubi di connessione)

Discriminarli dal
“fondo ambientale”



Valore corretto nei campioni ambientali



Se il bianco non è bianco... Limite di Report (LOR)

Composti	LOD (metodo), ng/L	LOR, ng/L
PFPeA	10.0	10
PFBS	0.02	10
PFHxA	0.2	2.0
PFHpA	0.08	20
PFHxS	0.04	10
PFOA	0.04	10
PFNA	0.04	5.0
PFOS	0.06	10
Bisphenol A	0.6	50
PFDA	0.15	3.0
Estrone	0.24	0.3
β-Estradiol	1.8	3.0
17α-Etynylestradiol	1.8	3.0
PFUnDA	0.10	8.0
PFDoA	0.08	10
tert-Octylphenol	1.6	50
Nonylphenol	2.0	50

Se non c'è contaminazione
~ uguali

Se c'è contaminazione
il limite deve tenerne
conto

I valori obiettivo per le acque potabili 5 anni dopo

Parere dell'ISS

Il Ministero della Salute, con nota prot. n. 15565/DGPRE dell'8/07/2013, ha comunicato alla Regione del Veneto il parere dell'Istituto Superiore di Sanità del 7/06/2013, prot. n. 2264, da cui si evince la mancanza di un rischio immediato per la popolazione. Tuttavia, si afferma che la situazione potrebbe comportare un rischio potenziale per la salute umana e, dunque, si consiglia l'adozione di misure di trattamento delle acque potabili per l'abbattimento delle sostanze perfluoroalchiliche e di prevenzione e controllo della filiera idrica sulla contaminazione delle acque destinate al consumo umano nei territori

Composti	LOR, ng/L
PFPeA	10
PFBS	10
PFHxA	2.0
PFHpA	20
PFHxS	10
PFOA	10
PFNA	5.0
PFOS	10
PFDA	3.0
PFUnDA	8.0
PFDoA	10

o per le acque potabili

n. 1584, nel quale ha indicato livelli di *performance* (obiettivo) nei
FOA: $\leq 0,5 \mu\text{g/litro}$; altri PFAS: $\leq 0,5 \mu\text{g/litro}$ ", affermando che tali

PFOS $\leq 30 \text{ ng/L}$
PFOA $\leq 500 \text{ ng/L}$
 $\Sigma\text{PFAS} \leq 500 \text{ ng/L}$

"visorio" te
abile daily
i per l'esp

DGPRE d
assorbimento e/o filtrazione, atte a garantire il rispetto dei suddetti
per la rimozione di PFAS nella filiera di produzione e distribuzione

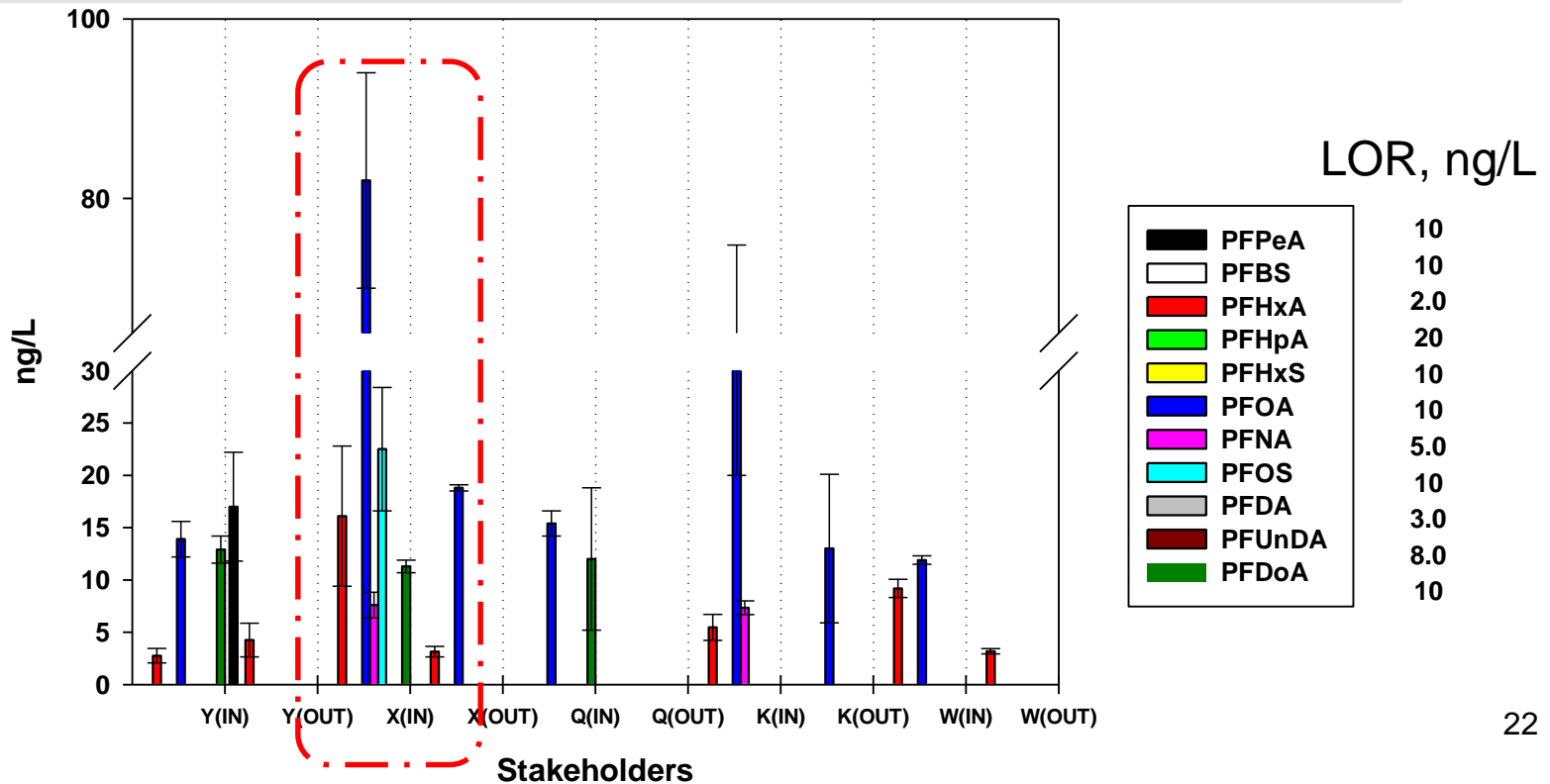


PFAs 2010: i primi dati

EU-wide survey of polar organic persistent pollutants in European river waters

Robert Loos*, Bernd Manfred Gawlik, Giovanni Locoro, Erika Rimaviciute,
Serafino Contini, Giovanni Bidoglio

Chemical	CAS No.	RL [ng/L]	Freq [%]	Max [ng/L]	Average [ng/L]	Med [ng/L]	Per90 [ng/L]	Limit [ng/L]
Perfluorinated acids								
PFHxA; perfluorohexanoate	68259-11-0	1	39	109	4	0	12	30
PFHpA; perfluoroheptanoate	375-85-9	1	64	27	1	1	3	30
PFOA; perfluorooctanoate	335-67-1	1	97	174	12	3	26	30
PFNA; perfluorononanoate	375-95-1	1	70	57	2	1	3	30
PFOS; perfluorooctansulfonate	EDF-508	1	94	1371	39	6	73	30
PFDA; perfluorodecanoate	335-76-2	1	40	7	1	0	1	30
PFUnA; perfluoroundecanoate	2058-94-8	1	26	3	0	0	1	30

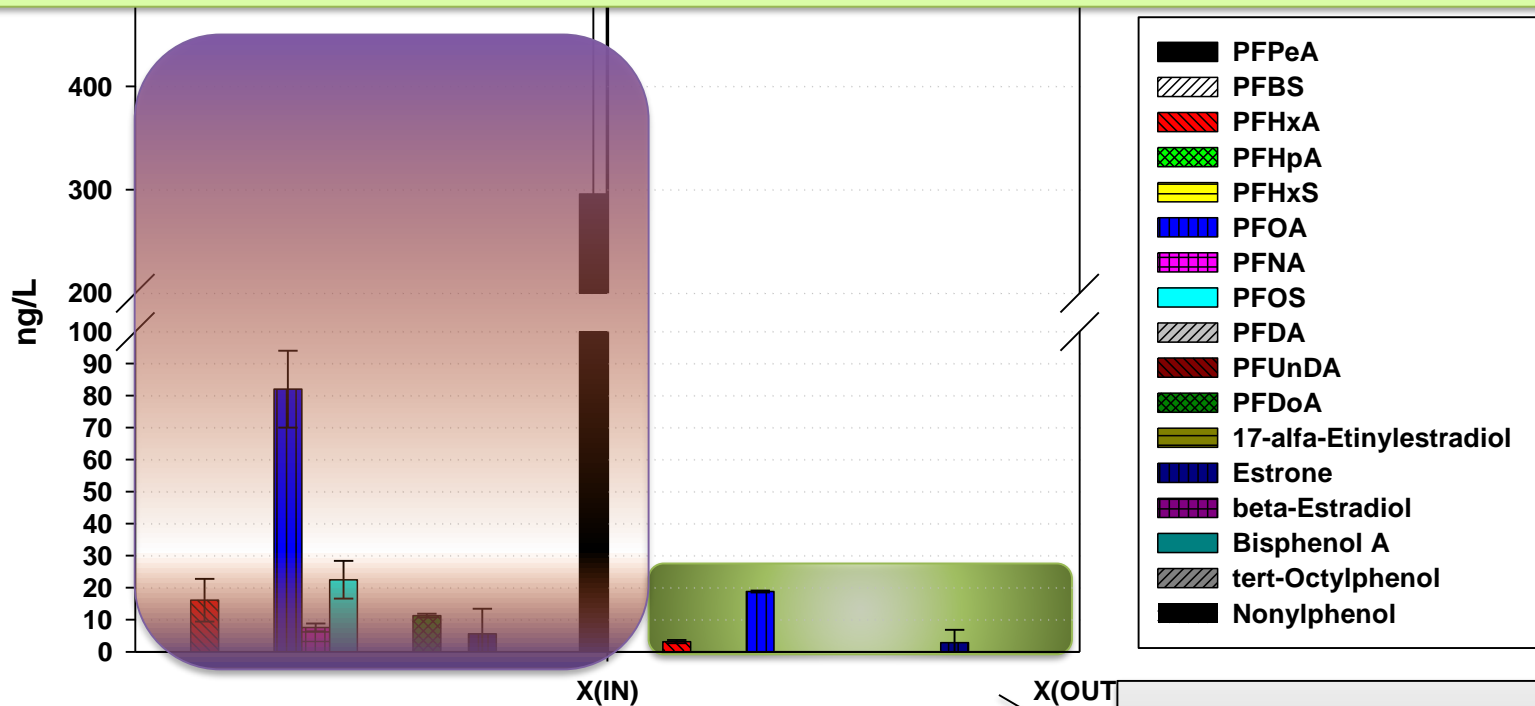


«Worst case»: un caso rappresentativo di abbattimento

nelle campagne effettuate in otto acquedotti italiani

—Quadro di contaminazione delle acque superficiali in linea con dati a livello europeo

—No rischio significativo di esposizione da acque potabili



Stakeholder "X" July 2010

Potabilizzazione

PFOS ≤ 30 ng/L
PFOA ≤ 500 ng/L
ΣPFAS ≤ 500 ng/L²³

Obiettivi futuri (o futuribili?)

- Anticipare le emergenze
- Monitorare preventivamente



Nella Dir. 2000/60/CE questi principi sono già enunciati

Lista sostanze prioritarie

“Watch list”

Allegato X Dir. 2000/60/EC_ Sostanze prioritarie_Dir. 2013/39/UE

45 parametri al posto dei 33 precedenti.
Validi per i piani 2015-2021

(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)	(8)
N.	Denominazione della sostanza	Numero CAS ⁽¹⁾	SQA-AA ⁽²⁾ Acque superficiali interne ⁽³⁾	SQA-AA ⁽²⁾ Altre acque di superficie	SQA-CMA ⁽⁴⁾ Acque superficiali interne ⁽³⁾	SQA-CMA ⁽⁴⁾ Altre acque di superficie	SQA Biota ⁽¹²⁾
(34)	Dicofol	115-32-2	$1,3 \times 10^{-3}$	$3,2 \times 10^{-5}$	non applicabile ⁽¹⁰⁾	non applicabile ⁽¹⁰⁾	33
(35)	Acido perfluorottano solfonico e derivati (PFOS)	1763-23-1	$6,5 \times 10^{-4}$	$1,3 \times 10^{-4}$	36	7,2	9,1
(36)	Chinossifen	124495-18-7	0,15	0,015	2,7	0,54	

Nello stesso documento elenco di controllo

Prossime emergenze?

Si profileranno probabilmente nei prossimi due anni altri casi di emergenza (mediatica) nelle acque

Articolo 8 ter

Elenco di controllo

1. La Commissione stabilisce un elenco di controllo di sostanze per le quali è necessario raccogliere dati di monitoraggio a livello di Unione allo scopo di facilitare i futuri esercizi di definizione delle priorità d'intervento ai sensi dell'articolo 16, paragrafo 2, della direttiva 2000/60/CE, per integrare i dati provenienti, tra l'altro, dalle analisi e dagli esami ai sensi dell'articolo 5 e dai programmi di monitoraggio ai sensi dell'articolo 8 della stessa.

Il primo elenco di controllo contiene un massimo di dieci sostanze o gruppi di sostanze e specifica le matrici per i controlli e i metodi possibili di analisi che non comportino costi eccessivi, per ciascuna sostanza. Secondo la disponibilità di metodi analitici che non comportino costi eccessivi, il numero massimo di sostanze o gruppi di sostanze che alla Commissione è consentito includere nell'elenco aumenta di una ad ogni aggiornamento dell'elenco ai sensi del paragrafo 2 del presente articolo, fino a un massimo di quattordici. Le sostanze da includere nell'elenco di controllo sono selezionate tra quelle che, stando alle informazioni disponibili, potrebbero presentare un rischio significativo a livello di Unione per l'ambiente acquatico o proveniente dall'ambiente acquatico e per le quali i dati di monitoraggio sono insufficienti.

Il Diclofenac (CAS 15307-79-6), il 17-beta-estradiol (E2) (CAS 50-28-2) e il 17-alpha-ethinylestradiol (EE2) (CAS 57-63-6) sono inseriti nel primo elenco di controllo al fine di raccogliere dati di monitoraggio allo scopo di agevolare la determinazione delle misure appropriate per affrontare i rischi presentati da tali sostanze.

COMMISSION IMPLEMENTING DECISION (EU) 2015/495 of 20 March 2015

Watch list of substances for Union-wide monitoring as set out in Article 8b of Directive 2008/105/EC

Name of substance/group of substances	CAS number (1)	EU number (2)	Indicative analytical method (3) (4) (5)	Maximum acceptable method detection limit (ng/l)
17-Alpha-ethinylestradiol (EE2)	57-63-6	200-342-2	Large-volume SPE — LC-MS-MS	0,035
17-Beta-estradiol (E2), Estrone (E1)	50-28-2, 53-16-7	200-023-8	SPE — LC-MS-MS	0,4
Diclofenac	15307-86-5	239-348-5	SPE — LC-MS-MS	10
2,6-Ditert-butyl-4-methylphenol	128-37-0	204-881-4	SPE — GC-MS	3 160
2-Ethylhexyl 4-methoxycinnamate	5466-77-3	226-775-7	SPE — LC-MS-MS or GC-MS	6 000
Macrolide antibiotics (6)			SPE — LC-MS-MS	90
Methiocarb	2032-65-7	217-991-2	SPE — LC-MS-MS or GC-MS	10
Neonicotinoids (7)			SPE — LC-MS-MS	9
Oxadiazon	19666-30-9	243-215-7	LLE/SPE — GC-MS	88
Tri-allate	2303-17-5	218-962-7	LLE/SPE — GC-MS or LC-MS-MS	670



Cassandra (1878)
di Evelyn De Morgan.

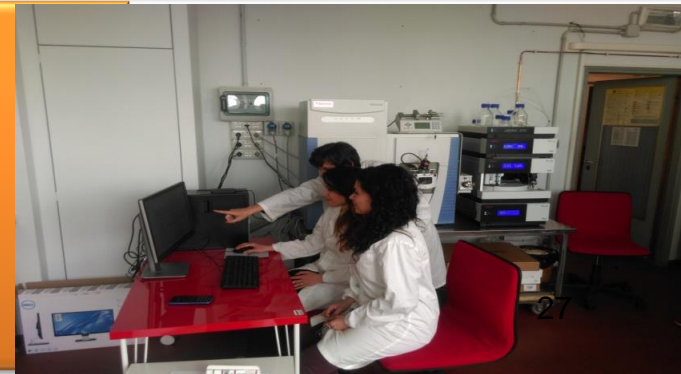
Obiettivi futuri (o futuribili?)

- Anticipare le emergenze
- Monitorare preventivamente
- Cercare anche quello che non si conosce

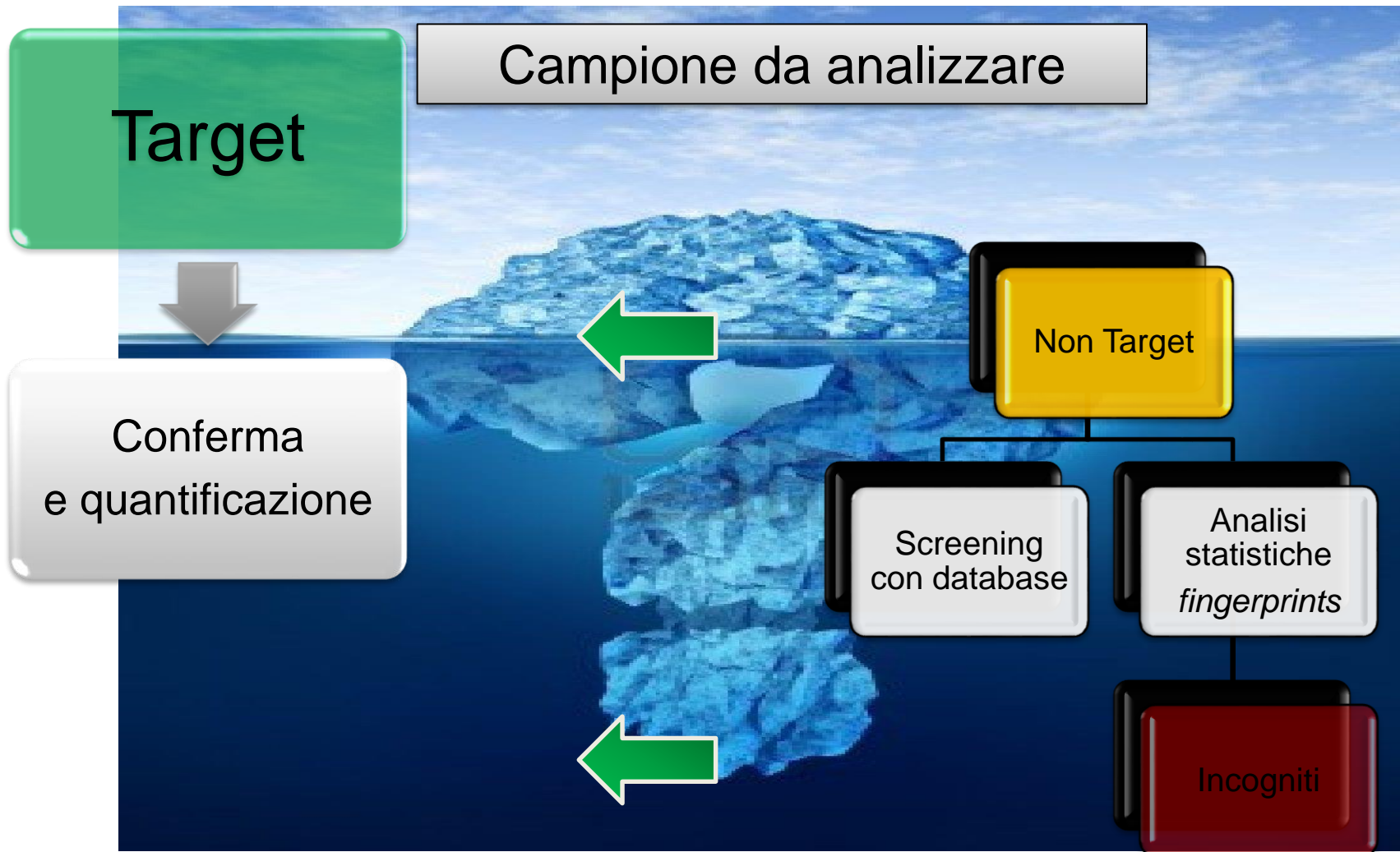


— Identificazione di sostanze incognite (non target)

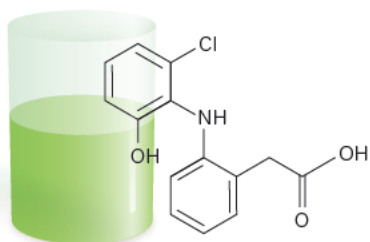
- Strumentazione d'avanguardia
- Progetti mirati
- Collaborazione internazionale



Analisi Target e Non-Target



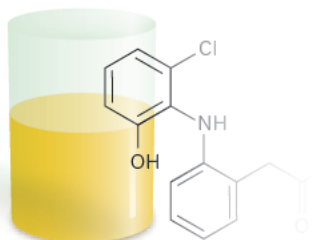
The harmonization of the language



target

Unequivocal identification and exact quantification possible

- Comparison with the reference standard of Retention time (t_R) + Molecular formula (MS) + fragmentation pattern (MSMS)



suspect

Qualitative detection possible

- Comparison with database of Retention time Index (RTI) + Molecular formula (MS) + fragmentation pattern (MSMS)



non target

Assignment of molecular structure often possible

- Data on Retention times + Molecular formula (MS) + eventually fragmentation pattern (MSMS)

Fig. 1: Analytical and data evaluation approaches for comprehensive screening, using liquid chromatography coupled to high-resolution mass spectrometry (LC-HRMS) [1].

All analyses without a pure standard start as non target and could remain unknown 



NORMAN_ intercollaborative trial_2013

NORMAN

Network of reference laboratories, research centres and related organisations for monitoring of emerging environmental substances

Interlaboratory studies

The organisation and initiation of interlaboratory studies is part of the regular activities of the NORMAN network. Three inter-laboratory exercises (NORMAN Case Studies) have been undertaken during the course of the NORMAN project. Based on the identification of needs for specific emerging substances, the NORMAN permanent network will encourage Proficiency Testing (PT) providers and / or partners of the network to organise and conduct such exercises.

List of activities

Topic	Event	Programme	Deadline	Reports
NORMAN Collaborative Trial - Non-target screening of organic substances in river water Organized by: EI (SK), UFZ (DE), IfU (DE), EAWAG (CH), Uni Umea (SE)	<ul style="list-style-type: none"> ➤ Collaborative Trial (1 round) ➤ October 2013 - July 2014 	Description of the CT	Registration: 25 November 2013 Shipment of samples: 10 December 2013 Result submission deadline: 28 February 2014	

- **First** international Collaborative trial for non-target screening of organic compounds:
- **1000 L of river water** (Danube) sampled and extracted- 1.5 L equivalent/test
- **Reports from 18 laboratories**- 7 for GC-MS analysis, 17 for LC-MS analysis
- More than 600 toxic compounds tested
- **More than 23,000 compounds evidenced**

Workshop on Zurich
September , 2014

NORMAN Proposal

Algal toxins Biocide transformation products Biocides Bio-terrorism / Sabotage agents Disinfection by-products (drinking water) Disinfection by-products (drinking water) / biocides Disinfection by-products (drinking water) / Flame retardants Drugs of abuse Flame retardants Food additives	Gasoline additives Industrial chemicals Industrial chemicals / Biocides Industrial chemicals / Flame retardants Lubricants / Flame retardants Moth repellent / Antimicrobial agent Other Perfluoroalkylated substances and their transformation products Personal care products Personal care products	Personal care products / Biocides Personal care products / Food additives Pharmaceuticals Plant protection products Plant protection products / Biocides Plant protection products/Biocides Plasticisers Plasticisers / Flame retardants Surfactants Trace metals and their compounds
---	---	--



Ad oggi 1036 sostanze emergenti

—Ricerca (pubblicazioni)

—Analisi dati

—Raccomandazione EU

ANAL BIOANAL CHEM
DOI 10.1007/s00216-015-8681-7

REVIEW

Non-target screening with high-resolution mass spectrometry: critical review using a collaborative trial on water analysis

Emma L. Schymanski¹ · Heinz P. Singer¹ · Jaroslav Slobodnik² · Ildiko M. Ipolyi² · Peter Oswald² · Martin Krauss³ · Tobias Schulze³ · Peter Haglund⁴ · Thomas Letzel⁵ · Sylvia Grosse⁵ · Nikolaos S. Thomakidis⁶ · Anna Bletsou⁶ · Christian Zwiener⁷ · Maria Ibañez⁸ · Tania Portolés⁸ · Ronald de Boer⁹ · Malcolm J. Reid¹⁰ · Matthias Ongena¹¹ · Uwe Kunkel¹² · Wolfgang Schulz¹³ · Amélie Guillon¹⁴ · Naïke Noyon¹⁴ · Gaëlle Leroy¹⁵ · Philippe Bados¹⁶ · Sara Bogialli¹⁷ · Draženka Stipančević¹⁸ · Paweł Rostkowski¹⁹ · Juliane Hollender^{1,20}

Received: 30 January 2015 / Revised: 2 April 2015 / Accepted: 7 April 2015
© Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2015

Abstract In this article, a dataset from a collaborative non-target screening trial organised by the NORMAN Association is used to review the state-of-the-art and discuss future perspectives of non-target screening using high-resolution mass

spectrometry in water analysis. A total of 18 institutes from 12 European countries analysed an extract of the same water sample collected from the River Danube with either one or both of liquid and gas chromatography coupled with

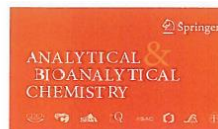
Published in the topical collection *High-Resolution Mass Spectrometry in Food and Environmental Analysis* with guest editor Akko Lagana.

Electronic supplementary material The online version of this article (doi:10.1007/s00216-015-8681-7) contains supplementary material, which is available to authorized users.

✉ Emma L. Schymanski
emma.schymanski@awag.ch
✉ Juliane Hollender
juliane.hollender@awag.ch

- ¹ Eawag, Swiss Federal Institute for Aquatic Science and Technology, Überlandstrasse 133, 8600 Dübendorf, Switzerland
- ² Environmental Institute, s.r.o., Okružná 784/2, 972 41 Koš, Slovak Republic
- ³ Helmholtz Centre for Environmental Research - UFZ, Permoserstraße 15, 04318 Leipzig, Germany
- ⁴ Umeå University, Linneaus väg 6, 90187 Umeå, Sweden
- ⁵ Chair of Urban Water Systems Engineering, Technische Universität München, Am Coulmbwall 8, 85748 Garching, Germany
- ⁶ Department of Chemistry, University of Athens, Panepistimiopolis Zografou, 157 01 Athens, Greece
- ⁷ Environmental Analytical Chemistry, Eberhard Karls University of Tübingen, Hölderlinstr. 12, 72074 Tübingen, Germany
- ⁸ Research Institute for Pesticides and Water, University Jaume I, Avda. Sos Baynat s/n, 12071 Castellón de la Plana, Spain
- ⁹ Ministry of Infrastructure and the Environment (Rijkswaterstaat), Zuiderwegplein 2, 8224 AD Lelystad, Netherlands

- ¹⁰ Norwegian Institute for Water Research (NIVA), Gaustadalveien 21, 0349 Oslo, Norway
- ¹¹ Toxicological Center, University of Antwerp, Universiteitsplein 1, 2610 Wilrijk, Antwerpen, Belgium
- ¹² German Federal Institute of Hydrology (BfG), Am Mainzer Tor 1, 56068 Koblenz, Germany
- ¹³ Betriebs- und Forschungslaboratorium, Zweckverband Landeswasserversorgung, Am Spitzigen Berg 1, 89129 Langensau, Germany
- ¹⁴ Suez Environnement CIRSEE, 38 rue du président Wilson, 78230 Le Pecq, France
- ¹⁵ Veolia Research and Innovation (VERI), 1 Place de Turenne, 94 417 Saint Maurice Cedex, France
- ¹⁶ UR MALY Freshwater Systems, Ecology and Pollutions, Instas, Centre de Lyon-Villeurbanne, 5 rue de la Doua-CS 70077, 69626 Villeurbanne Cedex, France
- ¹⁷ Department of Chemical Sciences, University of Padua, Via Marzolo, 1, 35131 Padua, Italy
- ¹⁸ Croatian Waters, Uluka grada Vukovara 2/20, 10000 Zagreb, Croatia
- ¹⁹ NILU - Norwegian Institute for Air Research, Inntårveien 18, 2007 Kjeller, Norway
- ²⁰ Institute of Biogeochemistry and Pollutant Dynamics, ETH Zurich, 8092 Zurich, Switzerland



Springer-Verlag | P.O. Box 10 52 00 | 69042 Heidelberg | Germany

Dr. Emma Schymanski
Dr. Juliane Hollender
Eawag – Umweltchemie/Environmental Chemistry
Überlandstrasse 133

8600 Dübendorf
Schweiz

Heidelberg, 21-Apr-2016

Subject: ABC Top 10 most downloaded 2015

Dear Dr. Schymanski, dear Dr. Hollender,

Your manuscript

„Non-target screening with high-resolution mass spectrometry: critical review using a collaborative trial on water analysis“

is listed in the top 10 most downloaded articles published in 2015.



Springer-Verlag GmbH
Tiergartenstrasse 17
69121 Heidelberg | Germany
P.O. Box 10 52 00
69042 Heidelberg | Germany
Tel +49 (0)6221/487-8377
Fax +49 (0)6221/487-68377
www.springer.com

Editorial Office "Analytical and Bioanalytical Chemistry"
abc@springer.com
www.springer.com/abc
Stay tuned and follow us on
Twitter: @AnalBioAnalChem



HRMS per lo screening di ECs

“Mass spectrometry is the art of measuring atoms and molecules to determine their molecular weight. Such mass or weight information is sometimes sufficient, frequently necessary, and always useful in determining the identity of a species”

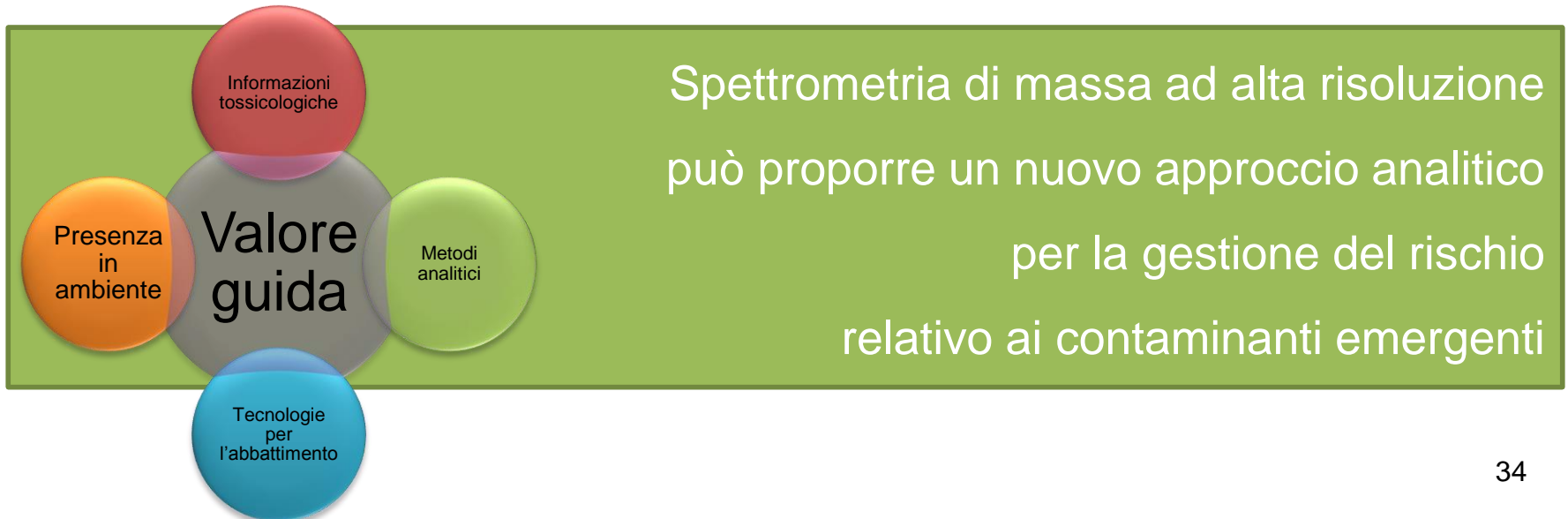
John B. Fenn, Nobel_2002

Metodi di conferma per analisi target di ECs con standard
&
“structural screening” per ECs senza standard.

Protocolli analitici adatti ad una corretta
gestione del rischio

Analisi di acque tramite HRMS

- ✓ Analisi simultanea target e non target a livelli di «tracce»
- ✓ Librerie e database «free» per la comparazione dei dati
- ✓ Informazioni utili sulla presenza di sostanze, anche se incognite
- ✓ Banche dati per analisi retrospettive
- ✓ Scenario complesso di sostanze con potenziali effetti tossici



Comunicazione del rischio

ACQUA ADRIA (ROVIGO) Due giorni senza servizio idrico a Bellombra. Danilo Rigosa dell'amministrazione

Rubinetti a secco senza alcuna comunicazione

Molto si sta facendo sulle tecnologie e sulla formazione degli addetti ai lavori, mentre manca sicuramente un'azione di corretta informazione verso il consumatore, sia in fase di prevenzione sia in fase di emergenza

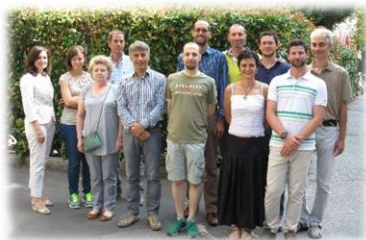
Si parla più
correttamente di
comunicazione
“sul rischio”



Ringraziamenti



REGIONE DEL VENETO



Gruppo Chimica Analitica;
DiSC-Università di Padova



Scuola di Specializzazione in VALUTAZIONE E GESTIONE DEL RISCHIO CHIMICO



Gruppo dott. Lucentini



Gruppo dott. Polesello



Sara Bogialli (Dept. of Chemical Sciences, University of Padua)
e-mail: sara.bogialli@unipd.it
website: <http://www.chimica.unipd.it/sara.bogialli/>