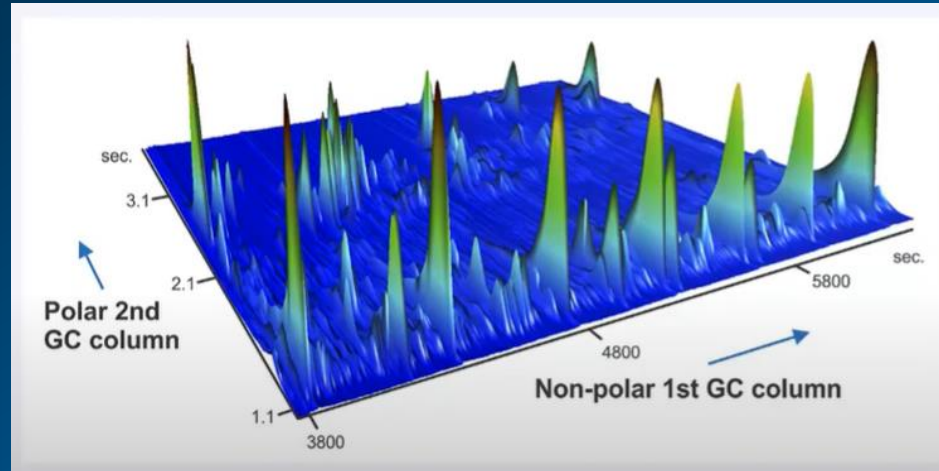




SINTEF



Kjemiske screeningmetoder for miljøundersøkelser

Bjørn Henrik Hansen

Lisbet Sørensen, Raymond Nepstad, Amaia Igartua, Anders Brunsvik,
Mari Creese, Andy Booth, Astrid Hyldbakk & Trond Størseth

FHF Dialogmøte 25/08/2026

Bakgrunn

- Havbruksnæringen skal ha kunnskap om egne utslipp.
- Pålegg om å analysere bestemte miljøfarlige stoffer som har relevans i forhold til egne utslipp, primært fra fôr, antibegroingsmidler og legemidler.
- HI's risikorapport peker i hovedsak på kobber, men også nye stoffer med ny usikkerhet (bl.a. tralopyril).
- Hvilke stoffer som måles bestemmes i regelverket, og i dialog med fôrleverandør, konsulent og myndigheter.
- Målekampanjer kan avdekke tilstedeværelsen av stoffer som ikke nødvendigvis kommer fra det spesifikke anlegget.
- Miljøet kan også inneholde miljøgifter som kan tas opp i og påvirke laksen.

Svar på tre spørsmål

- Hva er non-target screening (NTS)?
- Hvorfor er NTS nyttig for havbruk og andre havindustrier?
- Kan/bør NTS inkluderes i NS9410: 202X?

Instrumenter og målemetoder



GC-MS/MS



LC-MS/MS



LC-HRMS



GCxGC-HRMS

Sensitive target analysis

Legacy contaminants

(PAHs, PCBs, PBDEs,
HCB, phenols,
organophosphates)
Taste and odor
compounds
Plastic additives

Pharmaceuticals
Veterinary drugs
Biocides
Personal care products
Flocculants
Amines
Metabolites
Pigments

Explorative analysis/-omics approaches

Lipidomics
Metabolomics
Proteins/Peptides

**Non target and
suspect screening of
organic pollutants in
environmental
samples**



Micro- and nanoplastic analysis

Synthetic and natural polymers
Nano- (and micro-) plastic

GC: Upolare organiske forbindelser
LC: Polare organiske forbindelser
ICP: Metaller

Pyrolysis and thermal desorption GC-MS, μ Raman

Kjemisk non-target screening for miljøgifter

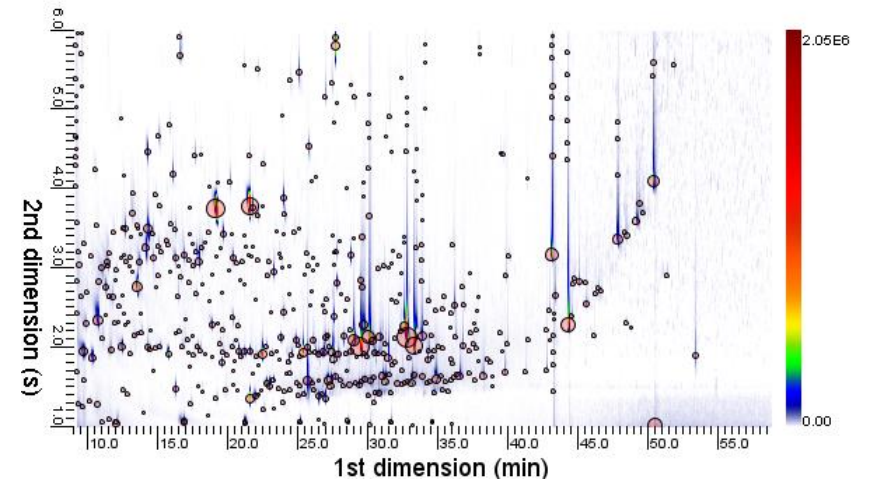
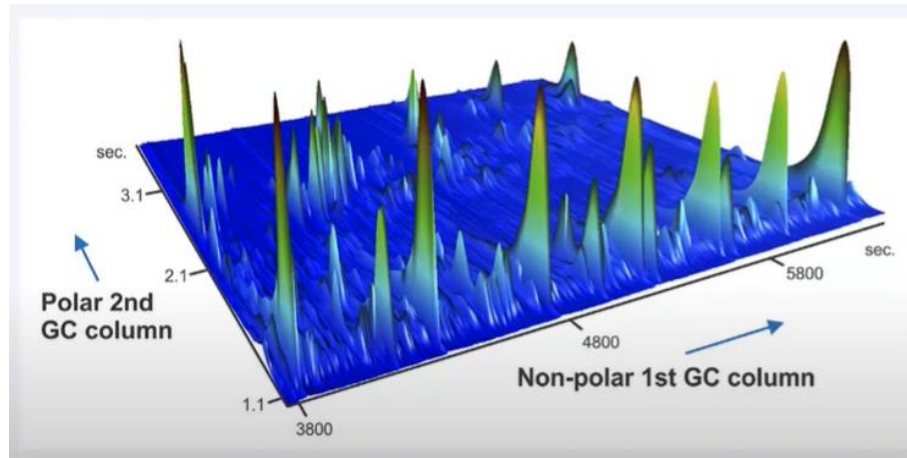
En kjemisk analyse som har til hensikt
å oppdage og identifisere kjemiske
forbindelser i en prøve uten
forhåndskunnskap om deres
tilstedeværelse.



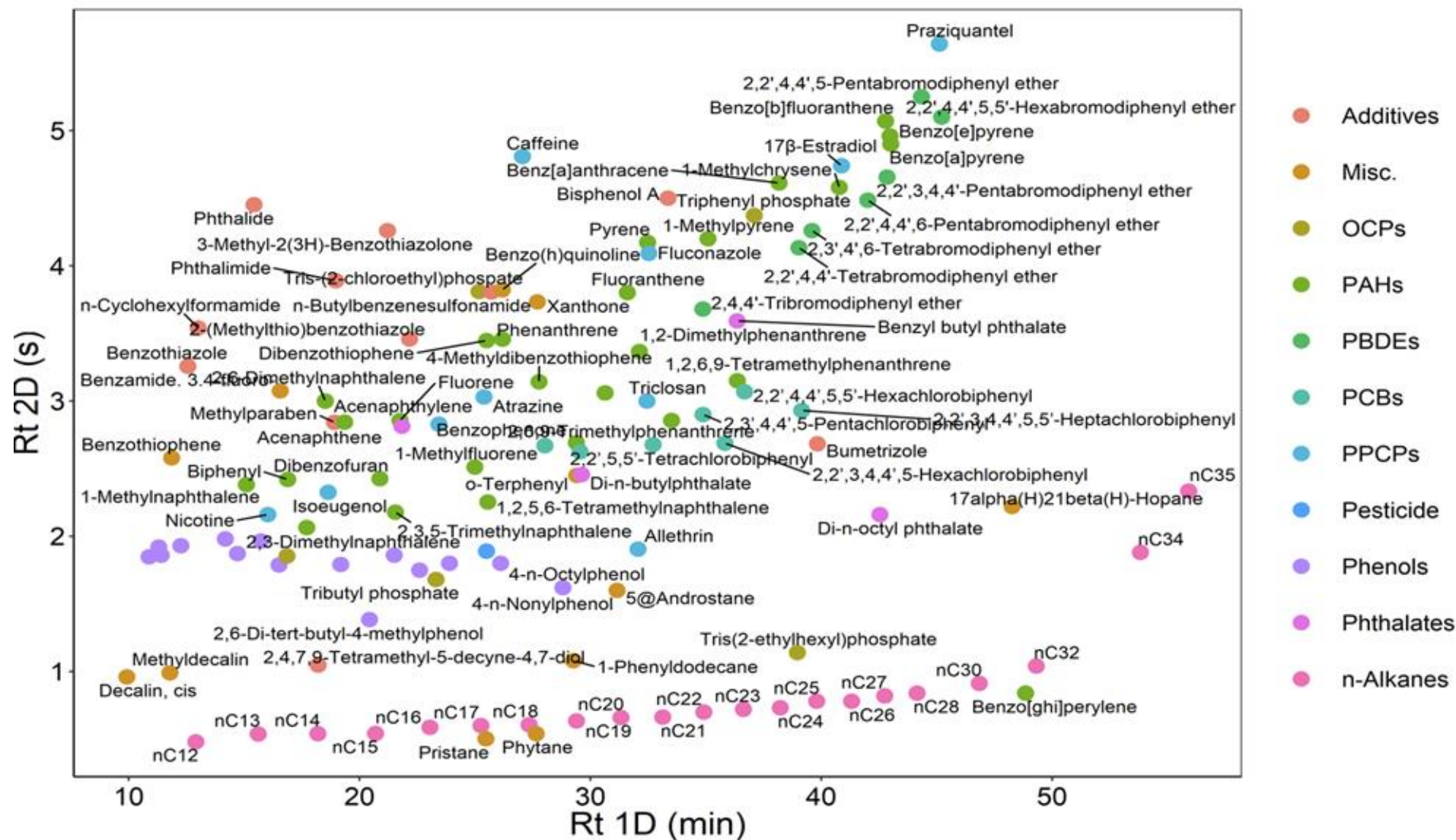
GCxGC-HRMS ved SINTEF Sealab

GC×GC-qToF

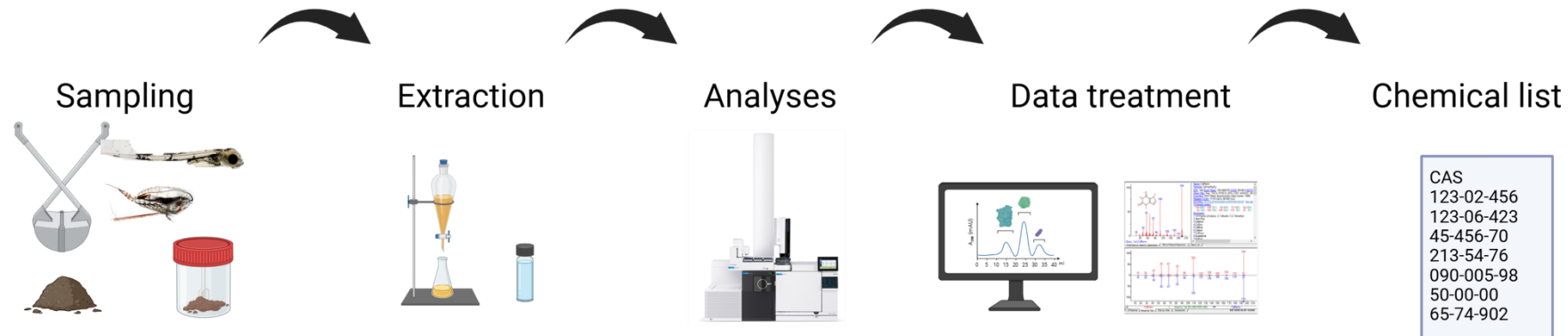
- Kromatografisk separasjon i to dimensjoner (kokepunkt og polaritet)
- Massespektrometri-analyse
- Identifisering av enkeltkomponenter i en prøve



GC×GC-qToF



Arbeidsflyt Non-target screening



- Standardisert prøvetaking
- Type prøver kan variere
- Lagring
- Feltblankprøver

- Ekstraksjon og opprensning
- Metodikk må ikke ekskludere kjemikalier av interesse
- Ta høyde for mulig kontaminering

- GCxGC-qToF
- Upolare organiske forbindelser
- Kromatografisk separasjon i to dimensjoner (kokepunkt og polaritet)
- Massespektrometri-analyse
- Identifisering og kvalitetssikring

- Liste av (tentativt) identifiserte molekyler
- Chemical Abstracts Service (CAS) nummer
- Relative konsentrasjoner

CAS
123-02-456
123-06-423
45-456-70
213-54-76
090-005-98
50-00-00
65-74-902

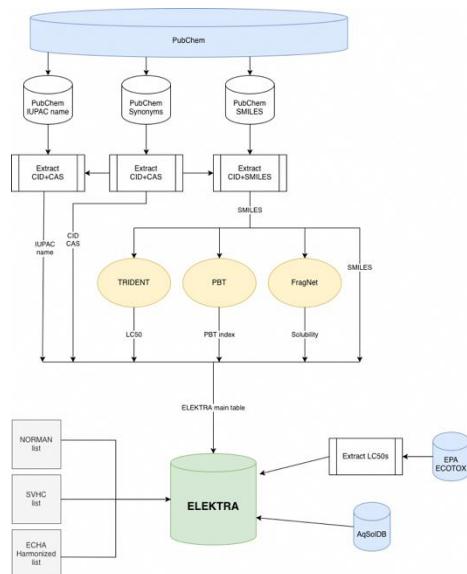
CAS list

- Identifikasjon av veldig mange forbindelser, typisk > 500 i en prøve
- Er de miljøgifter?
- Har forbindelsene egenskaper som gir grunn til bekymring?

Compound Name	Match Factor	Best Hit	Formula	CAS#	Component Area
52.48 24-Noroleana-3,12-diene	83.80	TRUE	C29H46	201358-24-9	2884506
52.58 Olean-12-en-3-ol, acetate, (3.beta.)-	89.02	TRUE	C32H52O2	1616-93-9	1168823
52.38 Germanicol acetate	83.36	TRUE	C32H52O2	10483-91-7	769814
49.66 5-Cholestene-3-ol, 24-methyl-	82.46	TRUE	C28H48O	1010214-17-4	712705
50.77 26,26-Dimethyl-5,24(28)-ergostadien-3.beta.-ol	76.75	TRUE	C30H50O	1000105-16-5	457592
54.71 (3S,6aR,6bR,8aS,12S,14bR)-4,4,6a,6b,8a,11,12,14b-octamethyl-	84.70	TRUE	C32H52O2	1000441-99-9	427978
51.26 Lanosta-8,24-dien-3-ol, acetate, (3.beta.)-	84.93	TRUE	C32H52O2	2671-68-3	423172
51.08 .beta.-Amyrone	86.32	TRUE	C30H48O	638-97-1	414445
51.17 9,19-Cyclolanost-24-en-3-ol, (3.beta.)-	77.67	TRUE	C30H50O	469-38-5	341692
50.16 Obtusifoliol	87.27	TRUE	C30H50O	16910-32-0	339413
49.86 Stigmasterol	83.43	TRUE	C29H48O	83-48-7	309748
48.05 dl-.alpha.-Tocopherol	85.98	TRUE	C29H50O2	10191-41-0	225814
24.15 Pyrrolo[1,2-a]pyrazine-1,4-dione, hexahydro-	94.25	TRUE	C7H10N2O2	19179-12-5	161179
21.81 2,5-Piperazinedione, 3-methyl-6-(1-methylethyl)-	93.73	TRUE	C8H14N2O2	22160-42-5	159866
24.00 2,5-Piperazinedione, 3-methyl-6-(1-methylpropyl)-	92.43	TRUE	C9H16N2O2	90821-99-1	121839
51.38 4,22-Stigmastadiene-3-one	81.87	TRUE	C29H46O	20817-72-5	109776
54.39 9,19-Cyclolanostan-3-ol, 24-methylene-, acetate, (3.beta.)-	80.23	TRUE	C33H54O2	1259-94-5	95754
28.48 Ethyl p-acetamidobenzoate	95.22	TRUE	C11H13NO3	5338-44-3	90888
36.24 2-((8Z,11Z)-Heptadeca-8,11-dien-1-yl)-4,5-dihydrooxazole	94.02	TRUE	C20H35NO	220556-75-2	80620
31.93 2,5-Piperazinedione, 3-methyl-6-(phenylmethyl)-	82.92	TRUE	C12H14N2O2	14474-78-3	79450
46.74 Stigmastane	88.57	TRUE	C29H52	601-58-1	79135
47.75 Qionasterol acetate	85.05	TRUE	C31H52O2	4651-54-1	79050
23.90 Cyclo(alanylleucyl)	90.09	TRUE	C9H16N2O2	1803-60-7	61820
16.53 2,4(1H,3H)-Pyrimidinedione, dihydro-	93.81	TRUE	C4H6N2O2	504-07-4	59955
46.55 Campesterol, acetate	82.70	TRUE	C30H50O2	1000419-55-2	50365
32.64 9,11-Octadecadienoic acid, methyl ester, (E,E)-	94.45	TRUE	C19H34O2	13038-47-6	47857
33.53 3,7,11-Trimethyl-1-dodecyn-3-ol, Ac derivative	82.22	TRUE	C17H30O2	1000543-20-0	44426
43.44 Cholest-5-en-3-ol (3.beta.)-, carbonochloridate	87.46	TRUE	C28H45ClO2	03.08.7144	41250
32.83 6-Octadecenoic acid, methyl ester, (Z)-	93.77	TRUE	C19H36O2	2777-58-4	39846
39.23 13-Docosen-1-ol, (Z)-	92.84	TRUE	C22H44O	629-98-1	33929
32.25 2,5-Piperazinedione, 3-(phenylmethyl)-	89.97	TRUE	C11H12N2O2	5037-75-2	31196
36.92 Octyl tetracosyl ether	75.94	TRUE	C32H66O	1000406-39-0	30082
39.83 Heptacosane	83.42	TRUE	C27H56	593-49-7	28309
35.83 Eicosen-1-ol, cis-9-	93.08	TRUE	C20H40O	112248-30-3	27641
36.03 11-Eicosenol	93.46	TRUE	C20H40O	1010424-20-3	27102
47.73 15-Nonacosanone	79.95	TRUE	C29H58O	2764-73-0	25264
39.43 (Z)-14-Tricosenyl formate	79.19	TRUE	C24H46O2	77899-10-6	24661
36.13 11-Dodecen-1-yl acetate	89.30	TRUE	C14H26O2	35153-10-7	24131
12.95 2-Propanamine, N,N'-1,2-ethanediyldienebis-	81.72	TRUE	C8H16N2	24764-90-7	23296
38.23 Carbonic acid, eicosyl vinyl ester	84.20	TRUE	C23H44O3	1000382-54-3	20986
20.74 1-Methyl-4-(4-methylpent-3-en-1-yl)cyclohex-3-enecarbaldehyd	83.53	TRUE	C14H22O	1000522-25-6	19840
39.13 11-Hexadecen-1-ol, (Z)-	90.44	TRUE	C16H32O	56683-54-6	18499
37.44 2,6,10,14-Hexadecatetraen-1-ol, 3,7,11,15-tetramethyl-, acetate,	81.60	TRUE	C22H36O2	61691-98-3	18489
24.59 3,6-Diisopropylpiperazin-2,5-dione	92.40	TRUE	C10H18N2O2	5625-44-5	16916
16.63 10-Undecenal	86.38	TRUE	C11H20O	112-45-8	16725
9.65 4-Azaspiro[2.5]octane, N-acetyl-	78.22	TRUE	C9H15NO	1000521-92-0	16670
36.03 Sulfurous acid, butyl heptadecyl ester	76.44	TRUE	C21H44O3S	1000309-18-4	15585
15.85 Triacetin	82.75	TRUE	C9H14O6	102-76-1	15478
39.73 3-Ethyl-2,6,10-trimethylundecane	79.58	TRUE	C16H34	1000432-25-9	15440
15.95 4-Nonanone, 7-ethyl-	76.73	TRUE	C11H22O	40237-88-5	13965
36.34 Oxazole, 2-(8Z)-8-heptadecen-1-yl-4,5-dihydro-	78.96	TRUE	C20H37NO	34900-26-0	13555

ELEKTRA: Informasjon om identifiserte kjemikalier

SCERIPPy: Screening Chemicals for Environmental Risk Information Pipeline in Python.

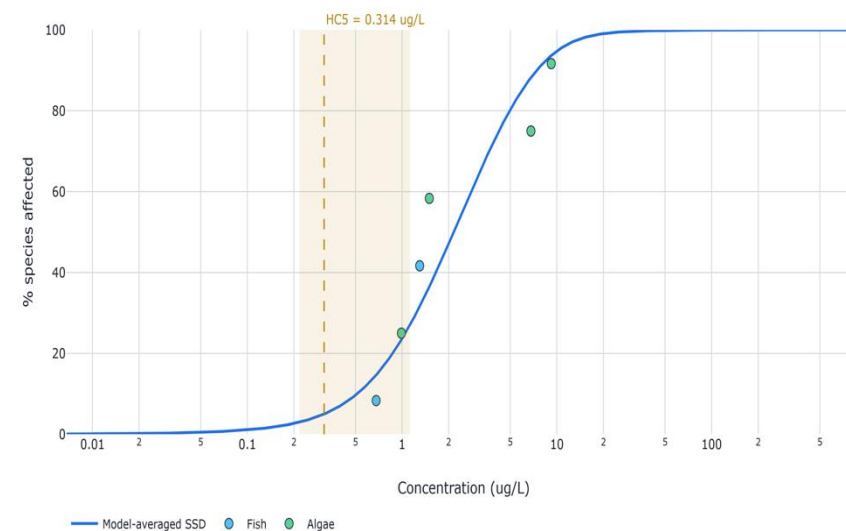


Etablert ELEKTRA-databasen som inneholder informasjon om ca. 4 millioner kjemikalier:

- Struktur og fysisk/kjemiske egenskaper
- Persistens, bioakkumulerbarhet, mobilitet og toksisitet
- Miljørisiko
- Regulatorisk status
- Kjente applikasjonsområder og produksjonsvolum

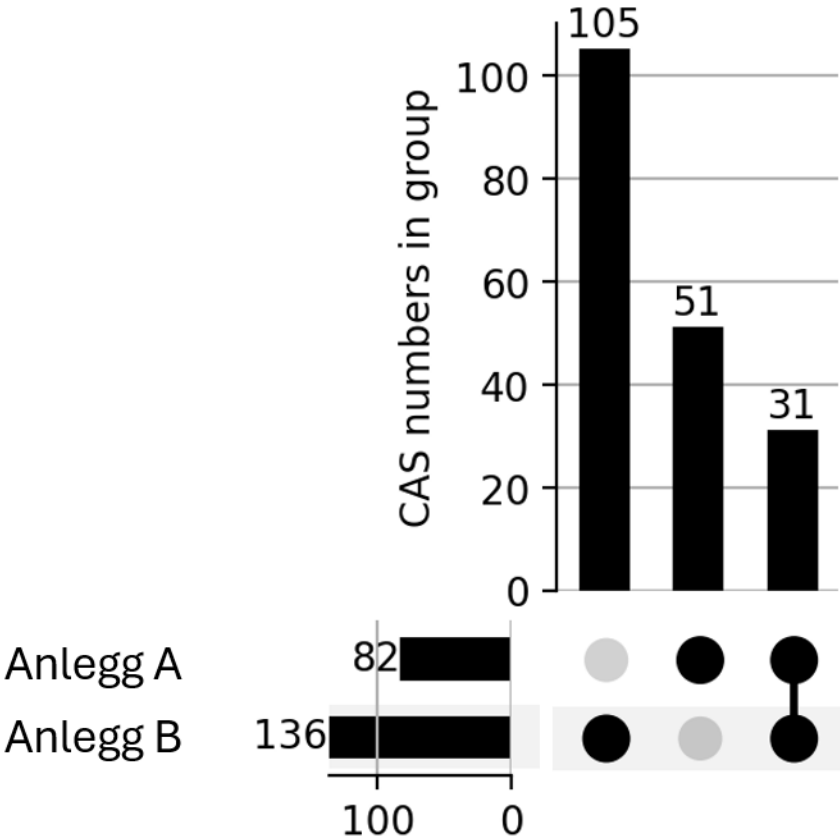
Giftighetsdata benyttes videre

- Artssensitivitetsdistribusjon (SSD)
- Blandingsgiftighetsberegninger

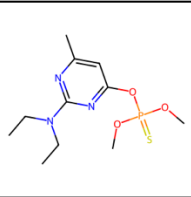


Eksempel på SSD-kurve for tralopyril som kan brukes til å etablere tilstandsklasser

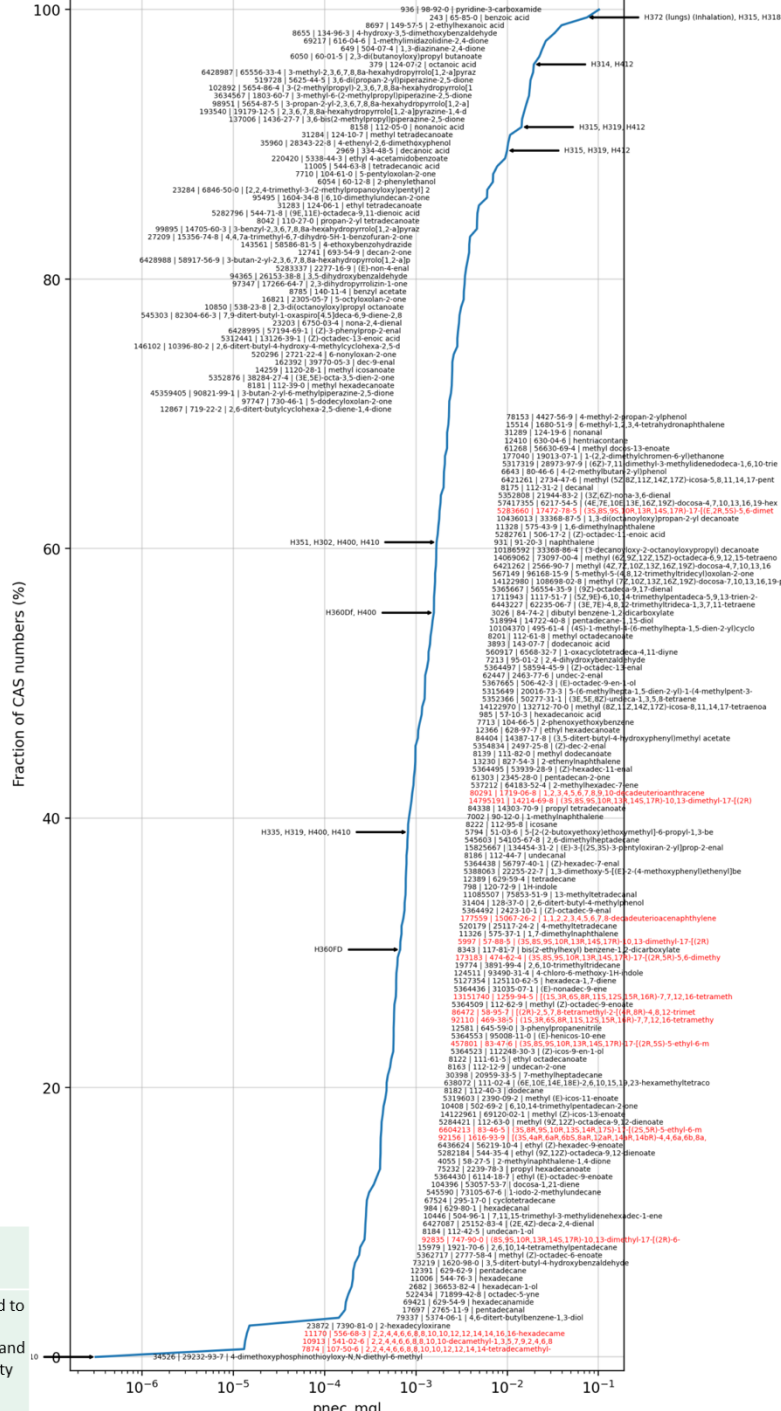
Fôr-analyser for havbruk



Pirimiphosmethyl



SMILES	CAS#	Compound Name	Formula	LogKow PubChem	fish EC50 MOR 96 mg/L	invertebrates EC50 MOR 96 mg/L	algae EC50 POP 96 mg/L	PNEC mg/L	SVHC	ECHA Hazard Code	NORMAN suspect list	Copilot summary
CCN(CC)c1nc(C)cc(OP(=S)(OC)OC)29232-n1	93-7	Pirimiphos methyl	PS	4.2	1.275889	0.000312	5.7296	3.11523E-07	NaN	H302 H372 (nervous system) H400 H410	Yes	Pirimiphos-methyl is an organophosphate insecticide used to protect stored grains and control pests, considered moderately toxic to humans with potential acute effects, and poses significant environmental risks due to its high toxicity to aquatic organisms and persistence under certain conditions.



Nytteverdi av NTS analyser

- Bærekraftige materialvalg (SSbD)
 - Kan man redusere miljøavtrykket av et anlegg ved å velge materialer og produkter som har lav miljørisiko?
- Fôrleverandører og lakseprodusenter:
 - Er det miljøgifter i fôret?
 - Er det forbindelser i fôret som gjør det mindre attraktivt for laksen?
 - Finnes det miljøgifter i produktet (laksen)?
- Kostnadseffektiv screeningmetode for miljøtilstandsanalyser:
 - Hvilke miljøgifter bør man måle og overvåke?
 - Hvilke miljøgifter var der før etablering (for-undersøkelser)?
 - Den kjemiske profilen kan si noe om effekten av brakklegging/tilbakeføring/rehabilitering
 - Hvorfor er miljøtilstanden dårlig?
 - Hvem har ansvaret for utslippet og tilstedeværelsen av stoffet (kildesporing)?
 - Hvordan endres sedimentets sammensetning over tid?
 - Hvorfor har biodiversiteten i sedimentet endret seg?

Bør NTS være en del av NS9410:202X?

- Databehandling og tolkning av store datasett
 - Kompetanse, behandlingstid, falske positive/negative treff
- Sikker identifikasjon av ukjente forbindelser
 - Massespektralbibliotek, nedbrytningsstoffer
- Standardisering av arbeidsflyten
 - Ekstraksjon, instrumentparametere, databehandling, rapportering
- Kvantifisering i komplekse sedimentprøver
 - Standarder, ioniseringseffektivitet, måleusikkerhet
- Kostnader og kompetansebehov
 - Instrument, instrumentekspertise, vedlikehold, datalagring og beregningskapasitet
- Oversettelse av kjemiske funn til miljørisiko
 - Datamangel om identifiserte kjemikalier

Verdifull som et komplement til målrettede metoder, men pr i dag fortsatt for umodent til å være en integrert del av miljøovervåkningsprogrammer



Teknologi for et bedre samfunn