

# Analitičke metode za određivanje antidepresiva, antipsihotika, benzodiazepina i njihovih metabolita u epidemiologiji otpadnih voda

Prema: M. Laimou-Geraniou, D. Heath, E. Heath, *Trends Environ. Anal. Chem.* **37** (2023) e00192

Doktorski studij Kemija – Analitička kemija

**Kemijski seminar I**

Tin Županović

2. travnja 2025.

# Sadržaj

## Uvod

- Epidemiologija otpadnih voda
- Psihoaktivne tvari

## Priprema uzoraka

- Uzorkovanje
- Čuvanje uzoraka
- Priprema za analizu

## Analiza uzoraka

- Kromatografska analiza
- Spektrometrija masa

# Epidemiologija otpadnih voda (WBE)

## Wastewater-based epidemiology

🌐 3 languages ▾

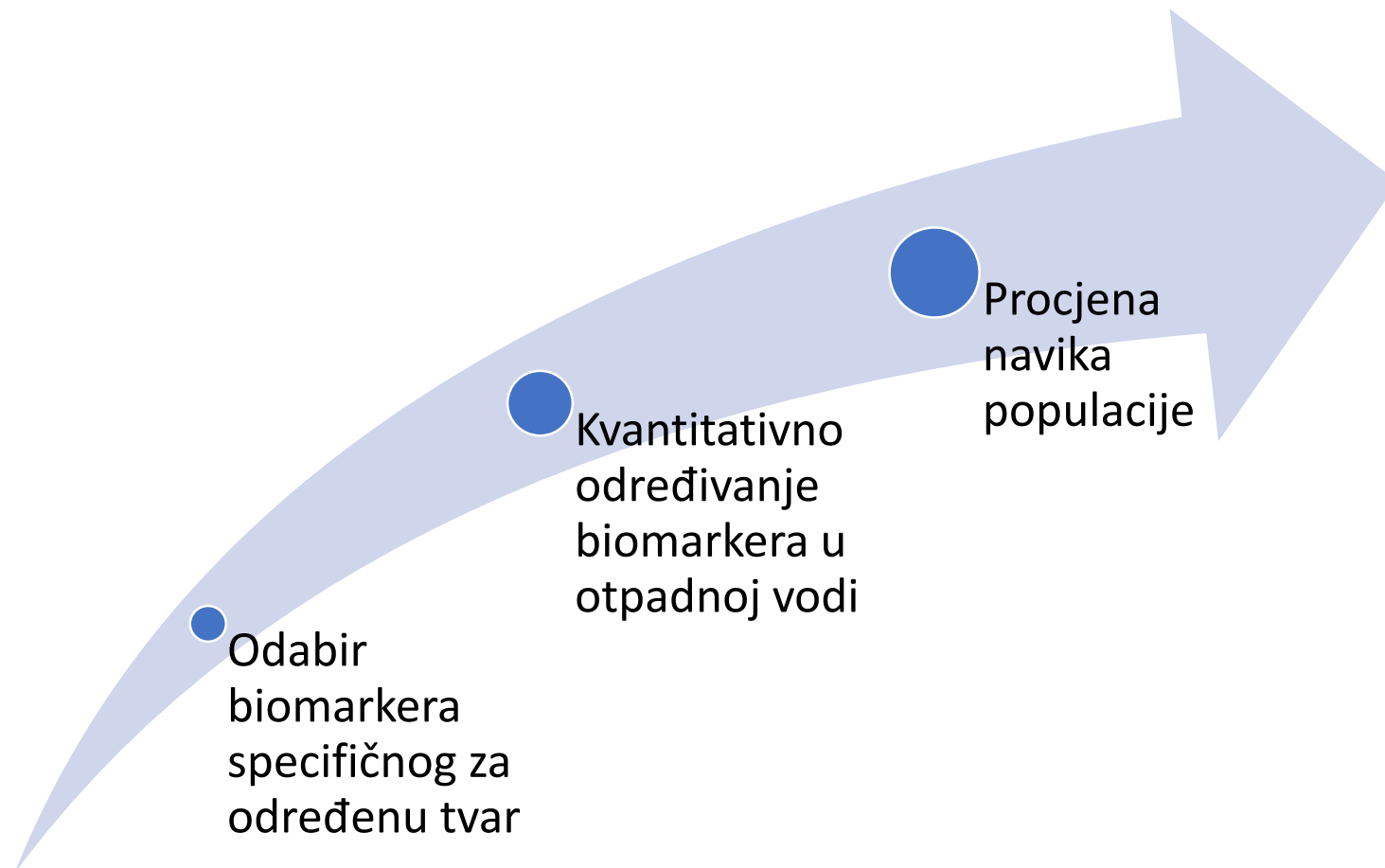
Article [Talk](#)

[Read](#) [Edit](#) [View history](#) [Tools](#) ▾

From Wikipedia, the free encyclopedia

**Wastewater-based epidemiology** (or **wastewater-based surveillance** or **sewage chemical-information mining**) analyzes [wastewater](#) to determine the consumption of, or exposure to, chemicals or [pathogens](#) in a population. This is achieved by measuring chemical or [biomarkers](#) in wastewater generated by the people contributing to a [sewage treatment plant](#) catchment.<sup>[1]</sup> Wastewater-based epidemiology has been used to estimate [illicit drug](#) use in communities or populations, but can be used to measure the consumption of alcohol, caffeine, various pharmaceuticals and other compounds.<sup>[2]</sup> Wastewater-based [epidemiology](#) has also been adapted to measure the load of pathogens such as [SARS-CoV-2](#) in a community.<sup>[3]</sup> It differs from traditional [drug testing](#), [urine](#) or [stool](#) testing in that results are population-level rather than individual level. Wastewater-based epidemiology is an interdisciplinary endeavour that draws on input from specialists such as [wastewater treatment plant](#) operators, [analytical chemists](#), [molecular biologists](#) and [epidemiologists](#).

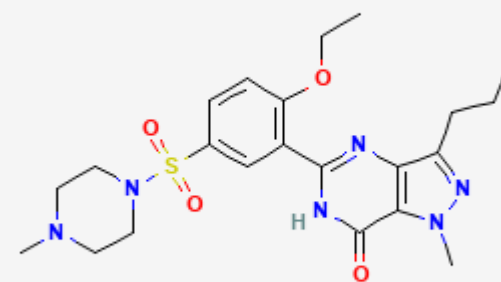
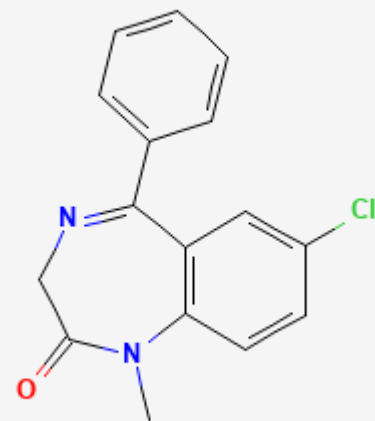
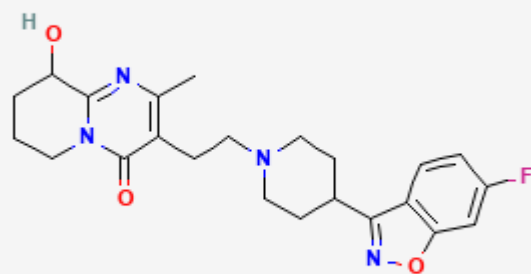
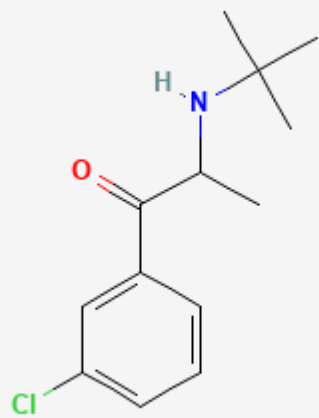
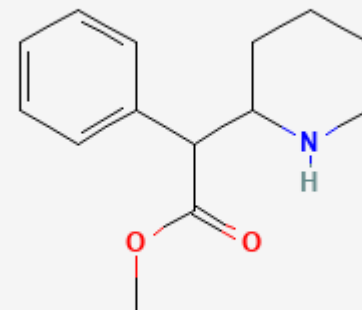
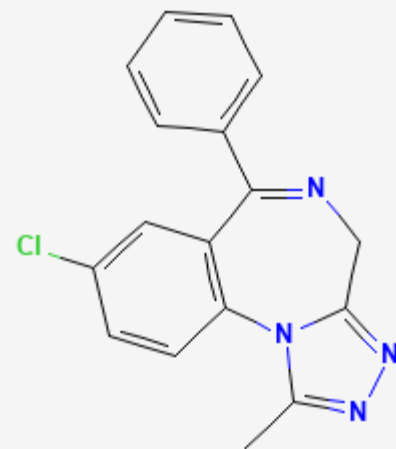
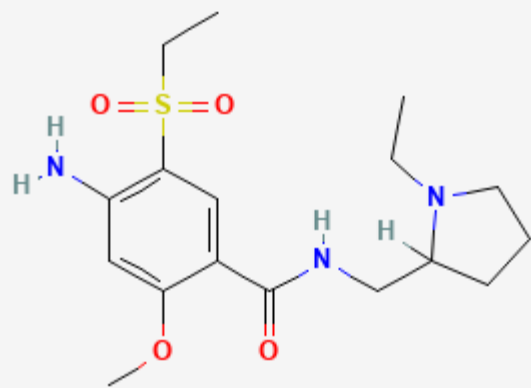
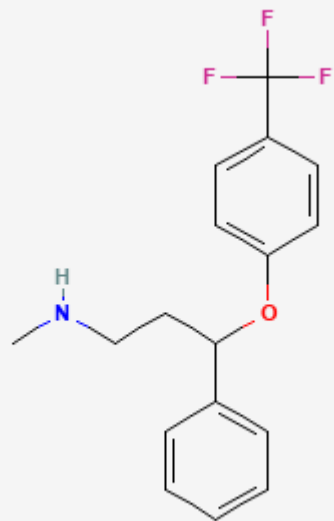
# Kako se i zašto primjenjuje WBE?



# Biomarkeri kojih skupina spojeva?

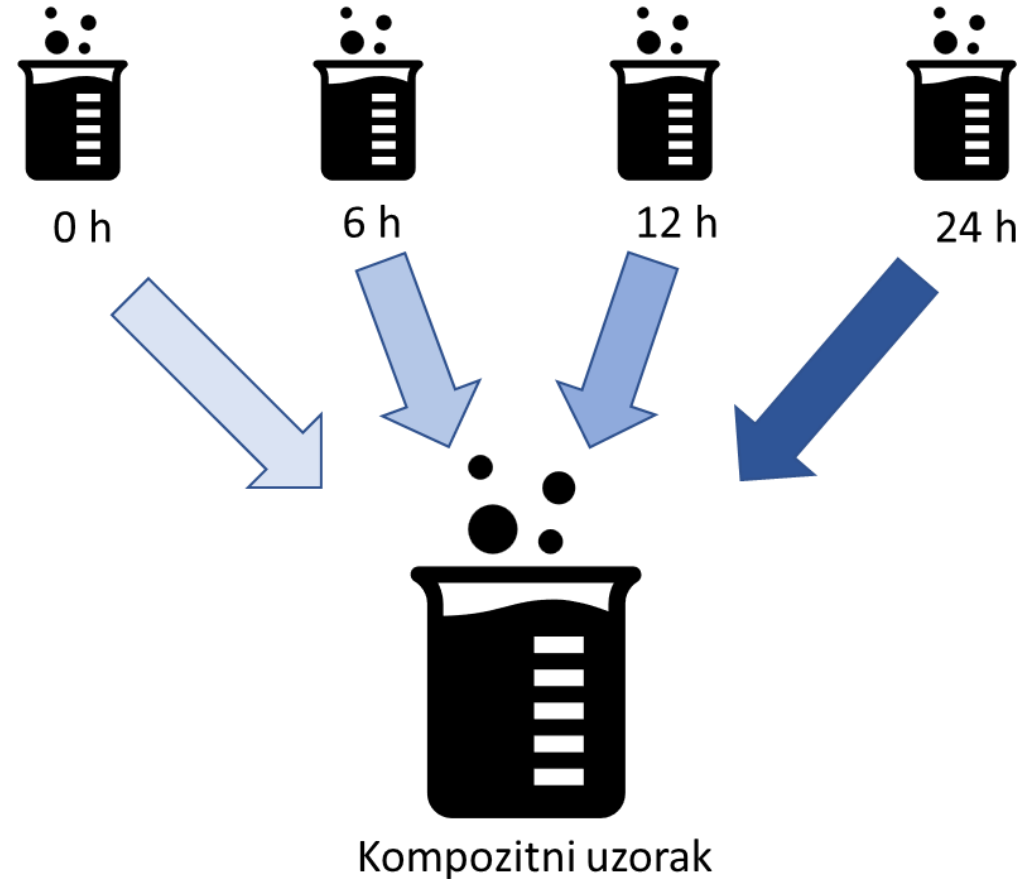
1. Alkoholna pića,
2. Duhanski proizvodi,
3. Vitamini,
4. Biomarkeri hrane,
5. Umjetni zaslađivači,
6. Farmaceutski spojevi,
7. Ilegalne droge,
8. Proizvodi za osobnu njegu, ...





# Uzorkovanje

- Najvažniji korak, greška u uzorkovanju najčešće rezultira krivim rezultatima
- Obratiti pažnju na vremenske i društvene događaje
  1. „Trenutno” uzorkovanje
  2. Automatski uzorkivač
  3. Pasivni uzorkivač
  4. Kombinacija aktivnog i pasivnog uzorkovanja



# Čuvanje uzoraka

- Ovisi o vrsti matrice i stabilnosti pojedinog uzorka
- Pažljivo pakiranje i transport do laboratorija u što kraćem vremenu
- Kratkoročno čuvanje:  $-20^{\circ}\text{C}$  i  $4^{\circ}\text{C}$
- Dugoročno čuvanje:  $-80^{\circ}\text{C}$
- Zakiseljavanje sprječava bakterijsku aktivnost
- **Stabilnost**



# Priprema uzoraka za analizu



- Uklanjanje partikulata filtracijom preko odgovarajućeg filtera
- Stakleni filtri
- Najlonski filtri
- Polivinildifluoridne membrane
- Filtri od celuloznih estera
- PTFE filtri

# Priprema uzoraka za analizu

## Direktno injektiranje

- Ovisi o matrici uzorka
- Najčešće se upotrebljava za biomarkere koji su zastupljeni u otpadnim vodama u visokim konc. (npr. etil-sulfat i kotinin)
- Dodatak izotopno obilježenih internih standarda



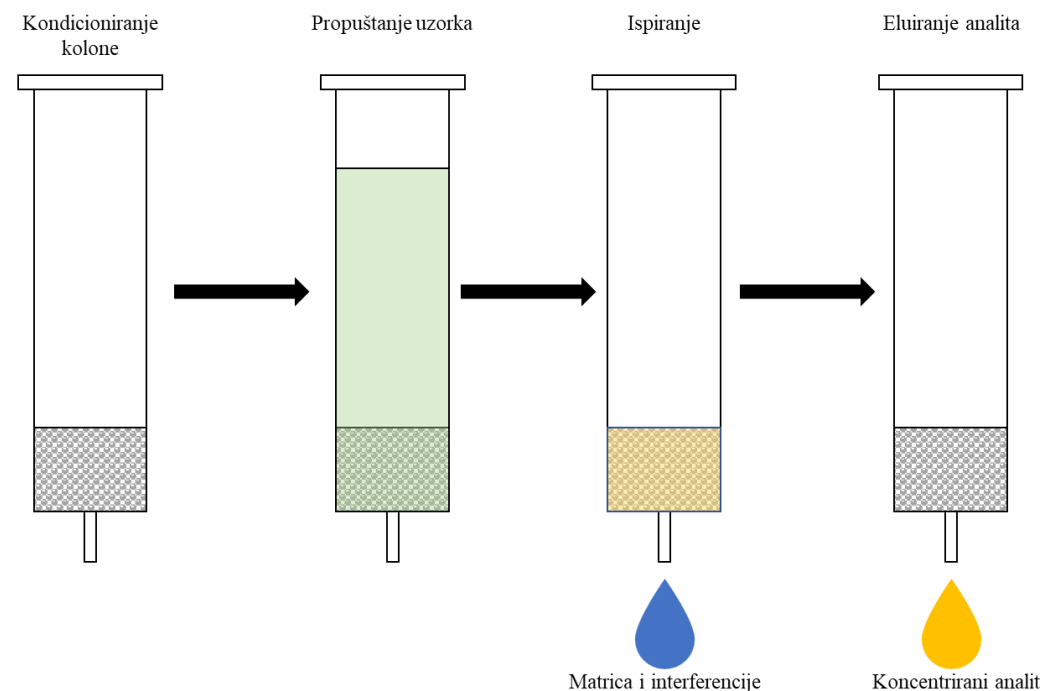
## Ekstrakcija na čvrstoj fazi

- Ukoncentriravanje uzorka prije analize
- Različite vrste kolona
- Eluiranje u jednom koraku ili sekvencionalno eluiranje
- *Online* ili *offline* ekstrakcija na čvrstoj fazi



# Ekstrakcija na čvrstoj fazi

- Kolone obrnutih faza
- Kolone obrnutih faza punjene polimerom (Oasis HLB, Oasis HLB Prime, Strata-X)
- Kolone obrnutih faza punjene smjesom polimera i kationskog (MCX, Strata-X-C) odnosno anionskog izmjenjivača (MAX)

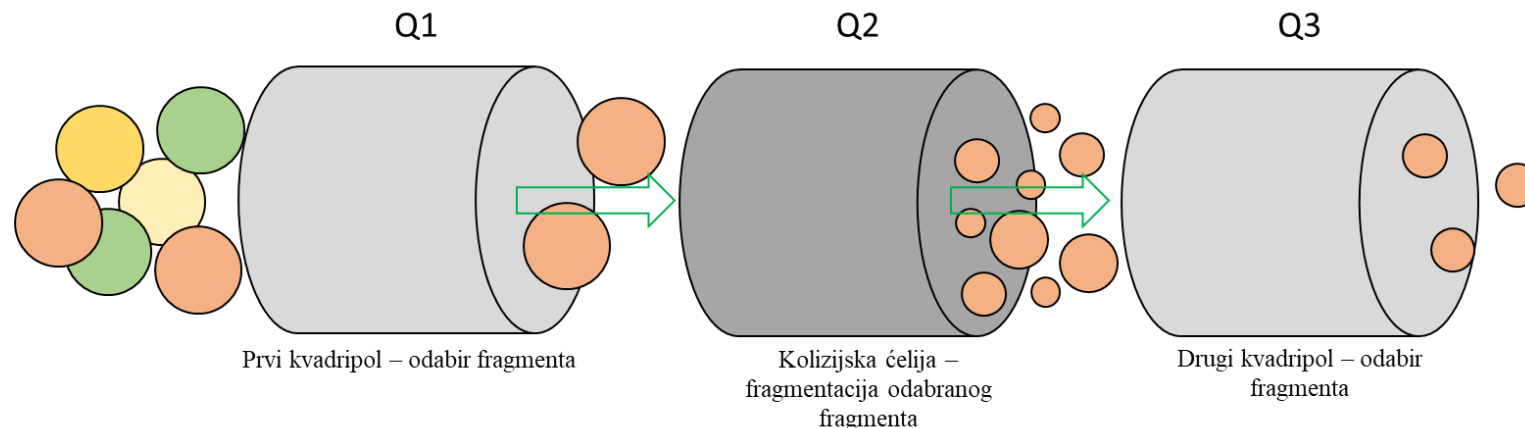


# Kromatografsko razdvajanje

- Tekućinska kromatografija ultra visoke djelotvornosti
- Kraće kolone manjih promjera u odnosu na HPLC kolone
- Kromatografija obrnutih faza
- Vrste sorbensa koje se koriste:
  1. Etilenom premošten hibrid (BEH)
  2. Hibrid nabijene površine (CSH)
  3. Silika velike jakosti (HSS)
- Eluens: dvofazni sustav vode i polarne organske faze uz mogućnost dodatka hlapivih soli (amonijev nitrat ili amonijev formijat)

# Spektrometrija masa

- Najčešće se koristi ionizacija elektroraspršenjem u pozitivnom polaritetu
- Izotopno obilježeni unutarnji standardi
- Analizatori mase: **QqQ**, QTRAP, QTRAP-Orbitrap, QOrbitrap, QqTOF
- Praćenje odabrane reakcije (SRM)
- **Praćenje višestrukih reakcija (MRM)**



# Zaključak

- I. Otpadna voda je riznica podataka koji opisuju zdravstveni status i životne navike populacije.
- II. Razvijene su mnoge metode za istovremeno određivanje koncentracije različitih skupina farmaceutika u uzorcima otpadne vode.
- III. Zahvaljujući napretku instrumentacije moguće je odrediti koncentracije psihoaktivnih tvari i njihovih metabolita u tragovima, što uvelike pomaže razvijanju i razumijevanju epidemiologije otpadnih voda.
- IV. WBE u kombinaciji s drugim izvorima podataka postaje vjerodostojan izvor informacija koji može ukazati na životne navike populacije.

HVALA NA POZORNOSTI

