



Massaspektrien kehitys 1980-2022 ja niiden käyttö muun muassa sisäilma- ja ympäristöanalytiikassa

DI Erik Sandell, TKL Håkan Sandell





1. Alustus

- Massaspektrometrian historia
- 1. Vuonna 1600, Comprehensive work on electromagnetism, William Gilbert
- 2. 1834, The term ion coined (in liquid phase), Michael Faraday
- **3. 1869, Observation of cathode rays (negatively charged), Johann W. Hittorf**
- **4. 1897, Charge-to-mass ratio of electron. Joseph J. Thomson**
- **5. 1898, Wien filter for charged particles, Wilhelm Wien**
- **6. 1913, Separation of isotopes by their mass, Joseph J. Thomson**
- **7. 1918, Construction of a mass spectrometer, Arthur J. Dempster**
- **8. 1918, Electron impact ion source for solids, Arthur J. Dempster**
- **9. 1919, Construction of a mass spectrometer, Francis W. Aston**
- **10. 1929, Electron impact ion source for gases, Walker Bleakney**
- **11. 1934, Double-focusing spectrometer (Mattauch-Herzog), Josef Mattauch, R. Z. Herzog**
- **12. 1936, Double-focusing spectrometer (Bainbridge-Jordan), K. T. Bainbridge, E. B. Jordan**
- **13. 1946, Commercialization of mass spectrometry, John Hipple (Westinghouse Electric)**



1. Alustus

- **14. 1946, Concept of a TOF mass spectrometer, William E. Stephens**
- **15. 1953, Quadrupole mass spectrometer, Wolfgang Paul**
- **16. 1953, Quadrupole ion trap mass spectrometer, Wolfgang Paul**
- **17. 1957, GC/MS, Roland S. Gohlke**
- **18. 1966, Chemical ionization, Milam S. B. Munson, Frank H. Field**
- **19. 1968, Electrospray ionization, Malcolm Dole**
- **20. 1668, Installation of LKB-9000 mass spectrometer, ICT, Prague**
- **21. 1973, Purchase of JEOL mass spectrometer JMS-D100, Institute of Physical Chemistry, Prague**
- Minä käytin tätä vuonna 1984 VTT Kemianlaboratoriossa.
- 22. 1986-1992, Jeol D300, Jeol DX 300, GCMSD 5980 ja msd 5970
- 23, 1992, JEOL sx-102, korkearesoluution massaspektrometri, tarkka massa, dioksiinit, FRIT FAB HPLC analyysijä peptiidisekventointi, Törmäyksiä toisessa kenttävapaassa.
- 2005-2019 TQQQ massaspektrometrin käyttö kvadropolien lisäksi
- Tiedot khistoriasta lähteestä: <https://www.ms-museum.org/history-of-mass-spectrometry>



2. Työurani

- Valmistuin Åbo Akademi, KTF fakultetista 1982, INVERKAN AV SÅPTVÄTT PÅ RÅTALLOLJEKVALITET, Diplomarbete.
- 1983-1984 Linotek Oy, Mäntyöljy laitteiden testaus ja kehittäminen
- 1984-2005 VTT Chemical Technology, olin vastuussa EU:n serttifiointimateriaalien serttifioinnista Suomen puolelta. Kaasukromatografiset ja massaspektrometriset analyysit ja laitteistoista
- 1999 Koulutin Egyptissä kuukauden ajan EU:n pyynnöstä dioksiinianalytiikan opettamista ja satamassa karanteenissa olevien EU:n elintarvike viennin tuotteiden hyväksymistä. Belgian rehukriisi. Kyseinen laboratorio on nyt akkreditoitu
- 2005-2019 olin NabLabs Oy:n erikoisasiantuntija, Rauman, Raision, Kaustisen, Oulun ja Jyväskylän laboratoriossa. Jyväskylässä akkreditoin dioksiinianalytiikan ensimmäistä kertaa käyttäen TQQQ kvadropolilaitteistoa. Yhteensä kolme kertaa olen tehnyt kaiken jotta on saavutettu akkreditointia. Kaksi kertaa olen auttanut ulkopuoliset laboratoriot saavuttamaan akkreditoimia.
- 2019 Nablabs myytiin Eurofinsille ja he sulkiivat osan ostamistaan laboratorioista. Eli Jyväskylä suljettiin. Eurofins on ostanut melkein kaikki merkitsevät laboratoriot Suomesta ja Euroopasta. Tämä on heikentänyt suomen laboratoritoiminta ja siksi olen perustamalla omaa EKG Consulting Oy Ltd yrittänyt vaikuttaa, jotta kaikki analytiikka ei siirretä ulkomaille. Jopa VTT Expert Services on myyty Eurofinsille
- 2019-... EKG Consulting Oy Ltd



2. Työurani tarkemmin

- VTT 1984-2005, NabLabs Oy 2005-2019 VTT möi kyseiset analyysit laitteiston ja henkilöstön kanssa.
- Tämän jälkeen sain käyttööni JEOL D300, JEOL DX300. Näissä tietokonesysteemit olivat jo paremmat ja ne käyttivät 2 Megan valkoiset disketit. Ongelma oli, että ne olivat herkkiä hajoamaan eli niin sanottu disk crash. Printterikin oli kehittyneempi matriisiprintteri.
- Sitten saimme ensimmäinen HP 5970 massaspektrometri, jossa oli HP 5890 kaasukromatografi ja autosampleri. Tietokonesysteemi oli HP Chemstation, myöhemmin sitä pystyy ohjaamaan Windows 3.1.1 versiolla ja siinä pyörivä Chemstation versio.
- Vuonna 1992 sain vihdoon korkearesoluution massaspektrometri JEOL-SX102. Sillä pääsimme tekemään Dioksiinianalytiikka 10000 resoluutiolla. Sillä on erikoisherkkä ionilähde, jossa filamenttivirta voi olla 600 μ A ja ionisaatio jännite 40eV. Tämän laitteen pystyin muuttamaan Otaniemestä Jepualle ja kytkemään takaisin toimintaan siellä. Nyttemmin se on ollut muutama vuosi käyttämättä. Tietokonesysteemit tälle laitteella on HP-UNIX.



2. Työurani, tarkemmin

- Vuonna 1998 sain hankittua JEOL AX 505. Sillä ajettiin paljon vesinäytteitä Purge&Trap tekniikalla. Se on erittäin herkkä ja sillä näkee erittäin pienet pitoisuudet. Ainoa haitta on edelleen sen koko, joka johtuu siitä, että se on sektorilaite. Sitä on korvattu kvadropoleilla. Tämä laite on minulla Paippisissa varastossa.
- HP-5970, HP-5971, HP-5972, HP-5973 ja HP QQQ, eli triplequadropoli.
- Tietokoneiden kehitys eli analogidigitaali muuntimet ja tietokoneiden nopeuksien kasvaminen parantaa koko ajan identifiointitarkkuuden ja herkkyyden. Nykylaitteella voi jopa aja single ion monitoring (SIM)/skannaus yhtä aikaa. Tämä on mahtava kehitys. SIM on yli kymmen kertaa herkempi, kun skannaus, mutta SIM ei anna riittävästi tietoa yhdisteestä, jotta sitä voidaan tunnistaa, jos se ei ole etukäteen haettu yhdiste. Fragmentoinnilla varmistetaan, että SIM piikki on etsitty yhdiste, mikäli ioniparien intensiteetit ei ole rajojen sisällä teoreettisesta niin signaali hylätään. Skannilla voi sitten tunnistaa mikä yhdiste piikki todellisuudessa on.
- Piti pystyttää oma Laboratorio, eli EKG Consulting oy ltd



Kuivat laitteista





3. EKG CONSULTING OY:n alku ja laitekannat

1. GC6890 ja MSD 5973
2. GC5890 series II ja MSD 5971
3. GC5890 ja msd 5970 2 kappaletta
4. GC5890 varustettu FID detektorilla
5. 2 tarkkuusvaakaa ja muutama yläkuppivaakoja
6. Perkin Elmer ATD 400 Tenaxdesorberi
7. Lämpöhaude
8. Sentrifuugeja 2 kappaletta
9. Vetokaappi
10. Muita laboratoriotarvikkeita kuten lasitavarat, pipetit etc.
11. SPME kuituja ja holder 3 kpl.



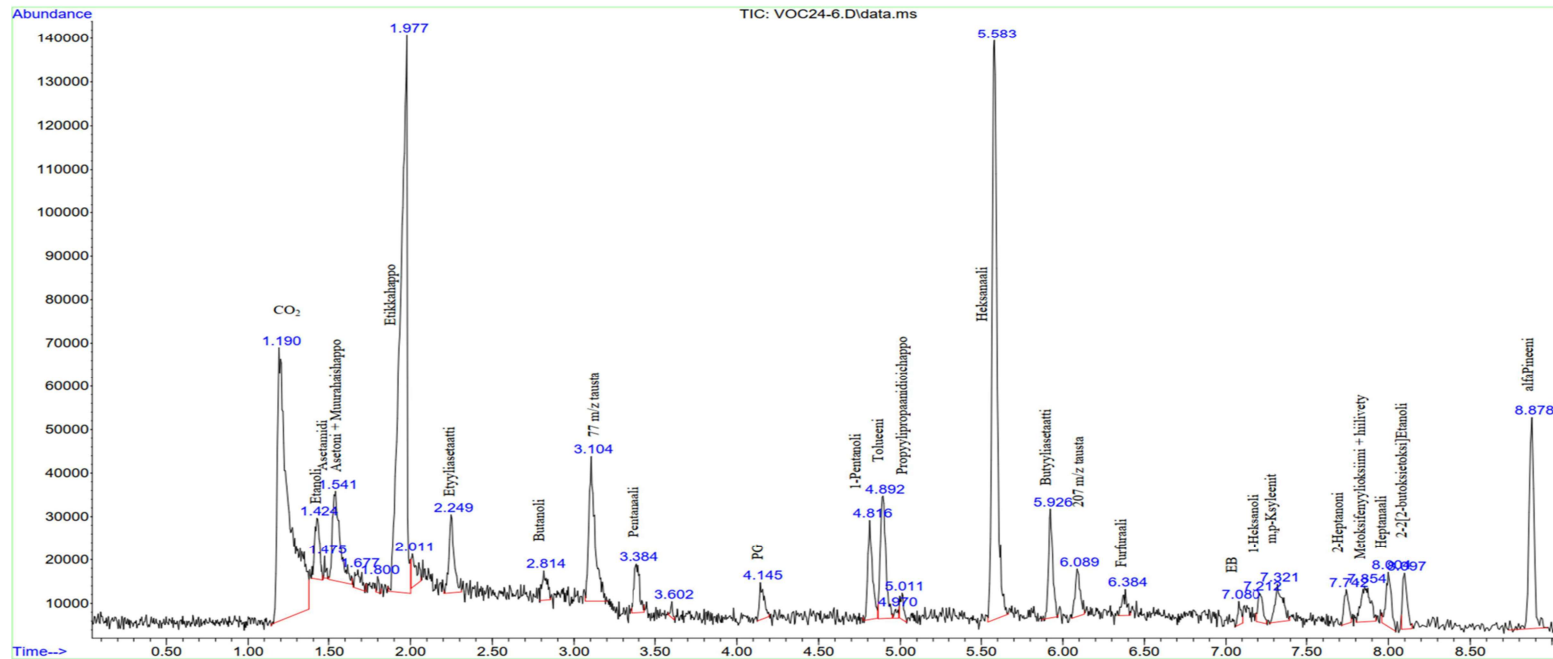


4. Esimerkkejä sisäilma- ja muista testeistä

<https://www.youtube.com/watch?v=eEZH51SleU>

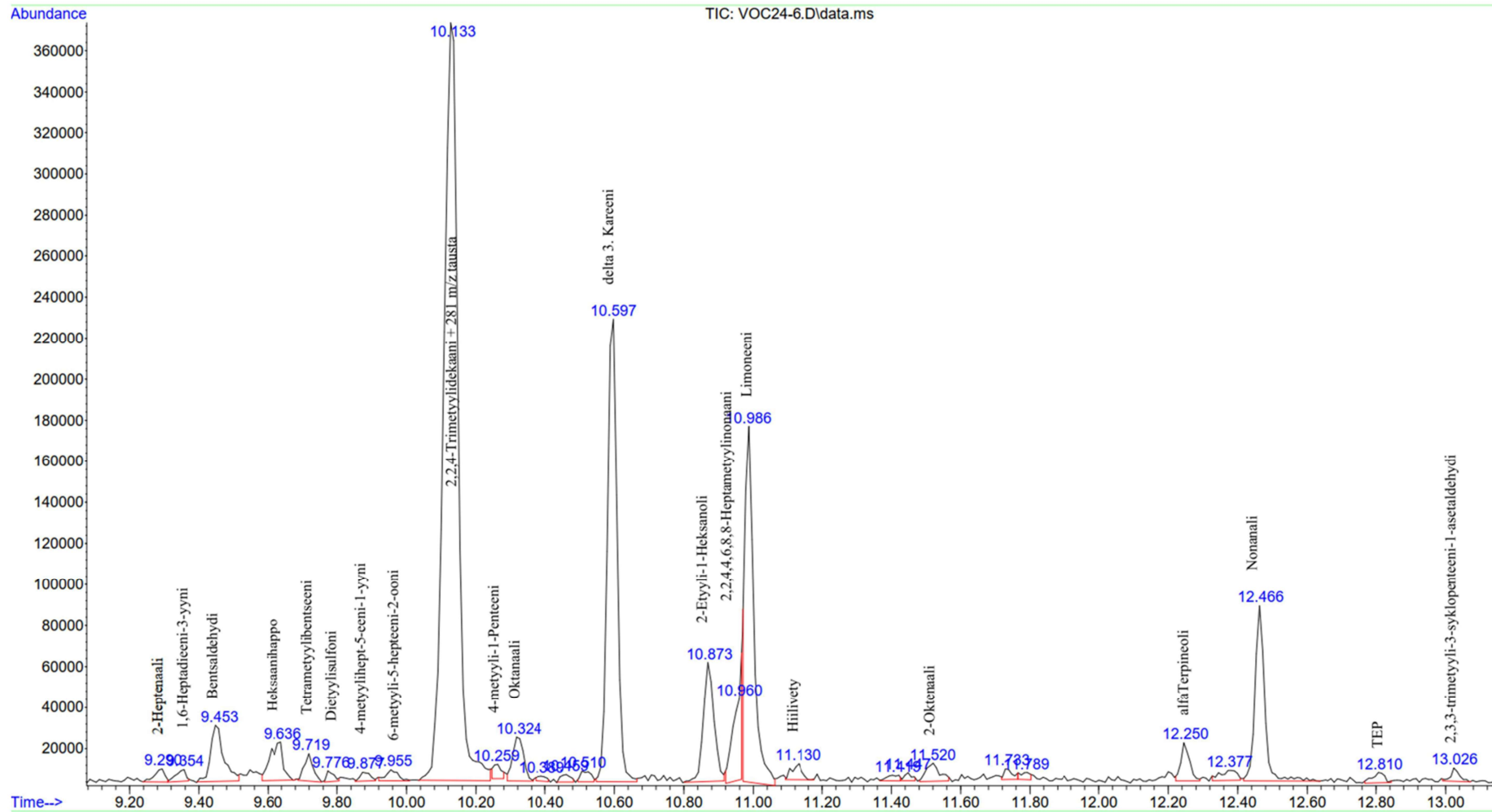
• Sisäilmamittaukset

File : C:\msdchem\1\DATA\Data30\Data30gw98\VOC24-6.D
Operator : Erik Sandell
Acquired : 13 Sep 2022 17:30 using AcqMethod VOCSP71
Instrument : GC/MS Ins
Sample Name: Paipis Karmen hu SPME C 12:25-13:25 13.9.2022
Misc Info : Test av MSD5971 med win 98
Vial Number: 1



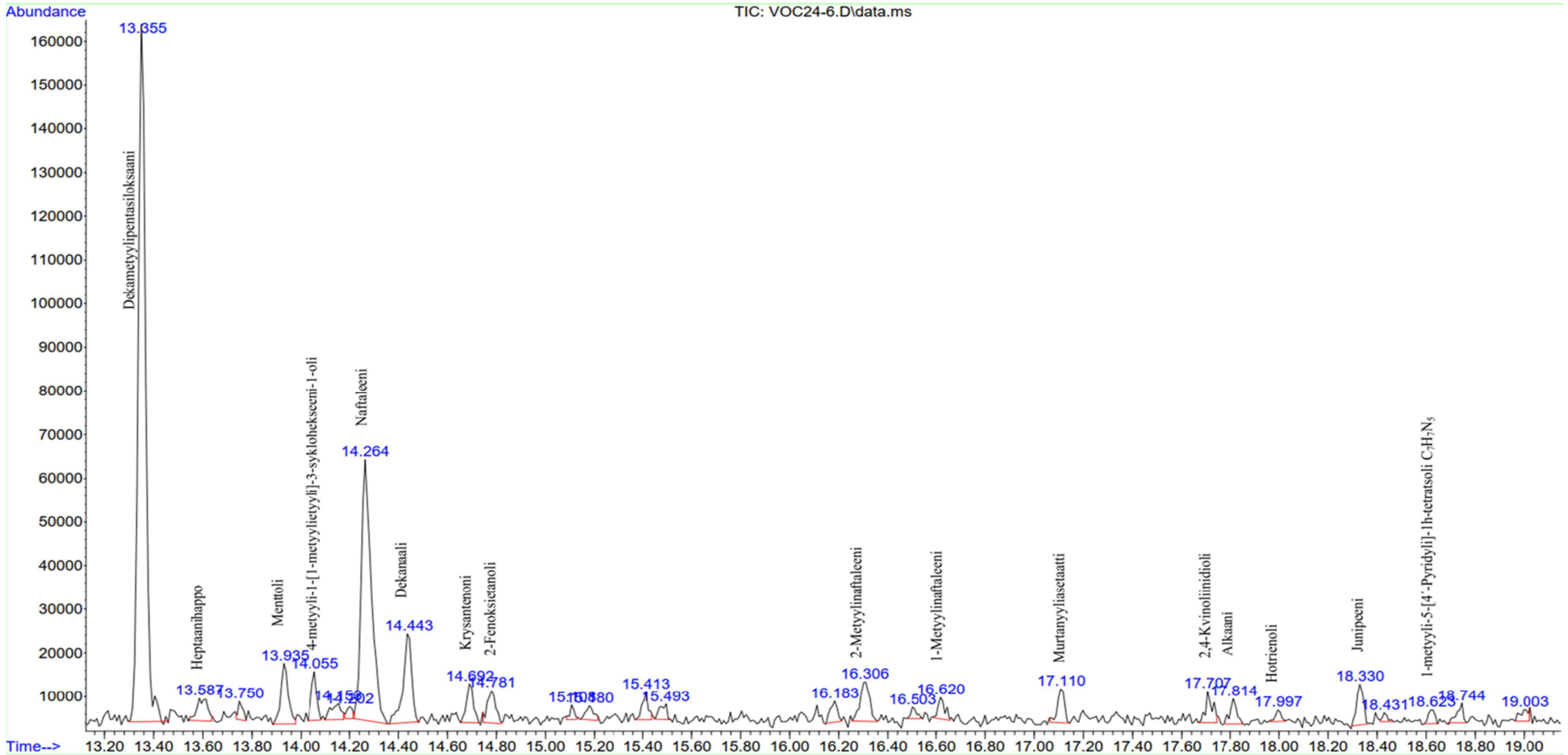


Esimerkkejä sisäilma- ja muista testeistä





4. Esimerkkejä sisäilma- ja muista testeistä





Vähän tuloksista

Yhteenveto

Näyte 24-6 Karmenin huoneen kirjoituspöytätasolta. Näytteen TVOC emissio on $< 155 \mu\text{g}/\text{m}^3$, yksittäiset VOC-yhdisteet ovat $< 10 \mu\text{g}/\text{m}^3$, paitsi etikkahappo, 2,2,4-trimetyyliDekaani ja Dekametyylipentasiloksaani. Nämä ovat peräisin hiuskiinniketuotteista. Täyttää hyvän huonetilan sisäilmavaatimukset. Näytepaikassa oli hieman ummehtunut tuoksu. Näyte ei sisällä karsinogeenisiä yhdisteitä ($< 1 \mu\text{g}/\text{m}^3$). Naftaleeni ja metyyli-naftaleenit, viittaavat että rakenteessa on kreosoottia sisältävää pikeä tai ter-
vapahvia. Naftaleenin pitoisuus ei ylitä sallittua raja-arvoa, joten mihinkään toimenpiteisiin tältä osin ei ole tarvetta ryhtyä. Löydetyt hajuste-aineet ja haaroittuneet hiilivedyt sekä seskviterpeenit ovat peräisin kosmetiikkatuotteista ja hiuskiinnikkeistä. Kannattaa siis pitää omakotitaloa riittävästi tuuletettuna. Tällä hetkellä huoneilma on hyvälaatuinen ja alittaa kaikkia raja-arvoja selvästi¹. Formaldehydi ei ylittänyt toimenpiderajan ($50 \mu\text{g}/\text{m}^3$). Mittarin antama taustataso on noin $10 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Ammoniakkia ei määritetty.



Tulokset

Taulukko 1. Näytteiden VOC-emissiot vertailua varten.

Näyte numero	Tilan koko	Näytteenottimen paikka	Hajukokemus	mg/m ³ , tolueenin avulla
Näyte 24-6	Koko huone	Kirjoituspöydän päältä, 20,2 °C kosteus 49,4 %	Ei havaittu hajua	VOC < 207
		TVOC	155 µg/m ³	OK
		CO ₂	855 ppm	OK
		Formaldehydi	40*	OK
		PM2.5/PM1.0/PM10	3/1/3	OK

* useamman mittauksen keskiarvo

- OK tarkoittaa tuloksia, jotka ovat alle toimintaraja-arvo

- PG=Propyleeniglykoli

-TEP=Trietyylifosfaatti

-dm³=litra

-TVOC=VOC yhdisteiden summa välillä heksaania-heksadekaania

-tausta=menetelmässä käytetty erotuskolonne ja näytteenottimen antamat yhdisteet

-Kreosottiindikaattorit: naftaleeni, fenoli ja metyyli-naftaleeni

SISÄILMAN KEMIKAALIT, Valvira¹

- Aerodynaaminen halkaisija Enimmäispitoisuus sisäilmassa (24 h)

Hengitettävät hiukkaset PM10 < 10 µm ≤ 50 µg/m³

Pienhiukkaset PM2.5 < 2,5 µm ≤ 25 µg/m³

-Materiaaleista vapautuvista orgaanisista yhdisteistä käytetään nimitystä VOC (= volatile organic compound) ja niiden kokonaispitoisuudesta TVOC (= total volatile organic compound).

TVOC-pitoisuutta ei voida käyttää sellaisenaan terveyshaitan arvioinnissa. Toisaalta kohonnut TVOC-pitoisuus (yli 400 µg/m³) on osoitus kemiallisten aineiden epätavallisen suuresta määrästä sisäilmassa, ja lisäselvitykset yksittäisten yhdisteiden tutkimiseksi ovat todennäköisesti tarpeen. Kemiallisten epäpuhtauksien pitoisuudet ovat usein korkeampia uudisrakennuksissa ja korjatuissa rakennuksissa.

- Hiilidioksidin toimenpideraja on 2 100 mg/m³ (1 150 ppm) suurempi kuin ulkoilman hiilidioksidipitoisuus. Kyseinen pitoisuus vastaa ilmanvaihtoa, joka on keskimäärin noin 4 dm³/s henkilöä kohden. Huom. kyseisessä pitoisuudessa hiilidioksidi ei aiheuta terveyshaittaa.

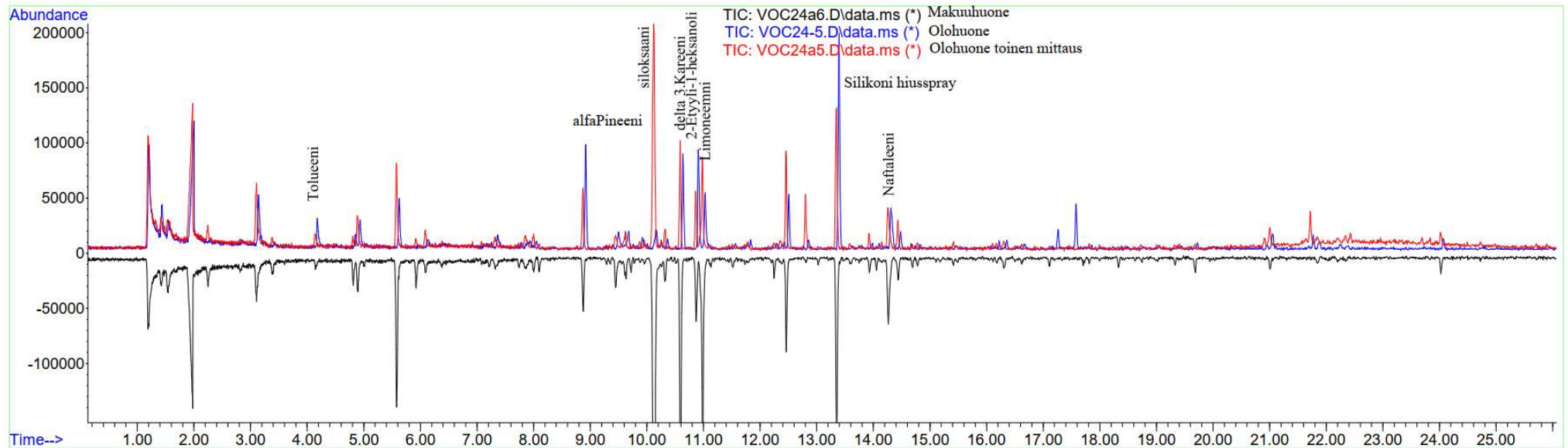
-Sisäilman formaldehydi on yleensä peräisin liima-aineena käytetystä ureaformaldehydihartsista, jota on käytetty lastulevyssä ja eräissä paneeleissa (esim. asuntojen kiintokalusteet ja huonekalut). Formaldehydiä voi vapautua sisäilmaan myös lakoista, maaleista, pinnoitteista, kokolattiamatoista sekä itsesiliävistä tekstiileistä. Formaldehydi (hajukynnys n. 35 µg/m³) ärsyttää silmiä ja ylempiä hengitysteitä. Ihmisten herkkyys formaldehydin ärsytysvaikutuksille vaihtelee suuresti.

-Sisäilman formaldehydipitoisuuden vuosikeskiarvo ei saa ylittää 50 µg/m³ ja lyhyen mittauksen keskiarvopitoisuus ei saa ylittää 100 µg/m³ (30 min). Formaldehydin tutkiminen on tarpeen, jos sisäilmassa on havaittavissa formaldehydin hajua. Jos huonetilassa on käytetty runsaasti lastulevyä rakenteissa tai kalusteissa (yli 1 m²/m³) tai, jos huoneistossa on esiintynyt kosteusvaurioita ja asukkaiden oireilu viittaa formaldehydialtistukseen, on formaldehydipitoisuuden mittaaminen myös tarpeen.



Vähän tuloksista

File :C:\msdchem\1\DATA\Data30\Data30-hw98\Neuer Ordner\VOC24a6.D
Operator : Erik Sandell
Acquired : 13 Sep 2022 17:30 using AcqMethod VOCSPE71
Instrument : GC/MS Ins
Sample Name: Paipis Karmen hu SPME C 12:25-13:25 13.9.2022
Misc Info : Test av MSD5971 med win 98
Vial Number: 1



Tässä nähdään kaksi ajoa samasta tilasta, VOC2a5 13.9.22 ja VOC24-5 9.11.2022. Ajot ovat hyvin samankaltaiset. Lisäksi on ajo viereisestä makuuhuoneesta 13.9.2022. Merkittävät yhdisteet ovat vnaisten kosmetiikasta ja hiuslakasta. Talossa on kreosoottia rakenteissa, joten Naftaleeni on havaittavissa. Pitoisuudet eivät aiheuta huolta.



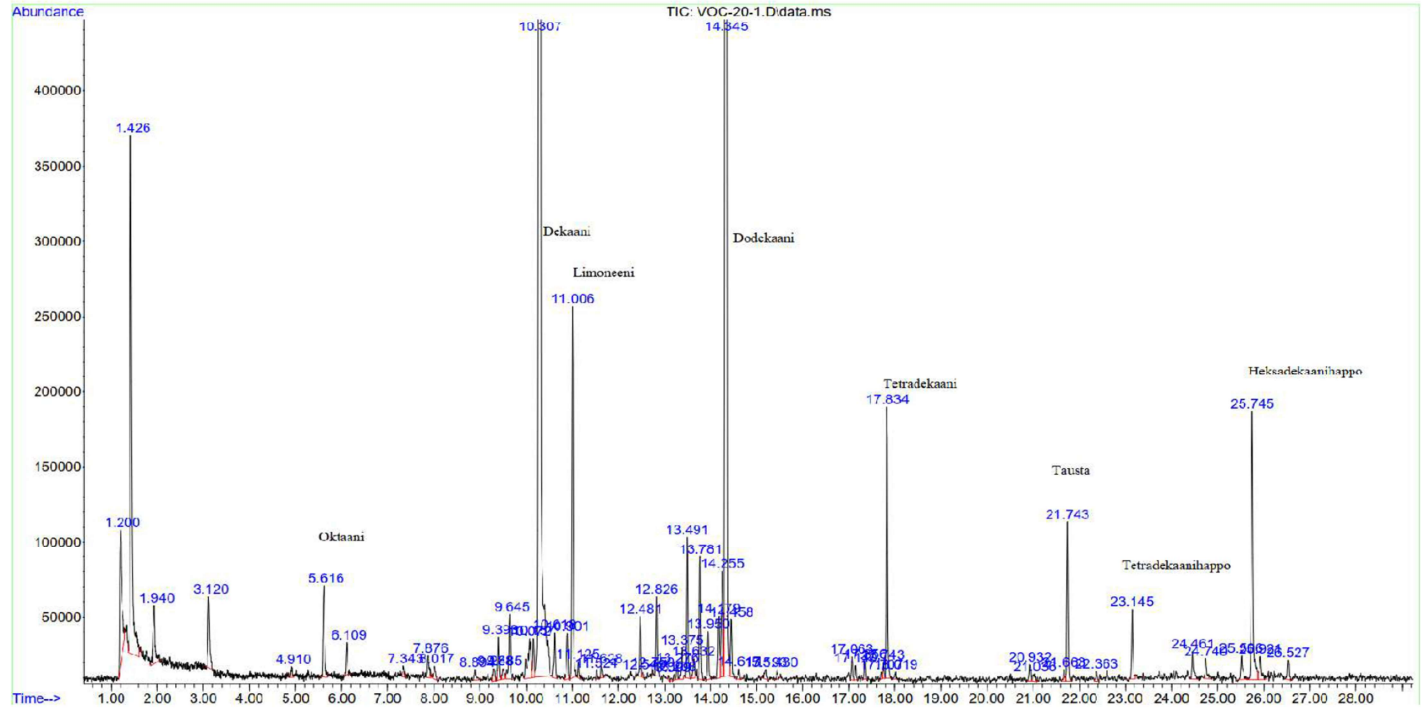
Esimerkki 2 , huvila



Näyte otettu imemällä imurilla
huonelilma pulloon. Pullo
toimitettu Laboratorioon ja
analysoitu.

EKG CONSULTING OY/LTD Tutkimusraportti 020-1, 2022

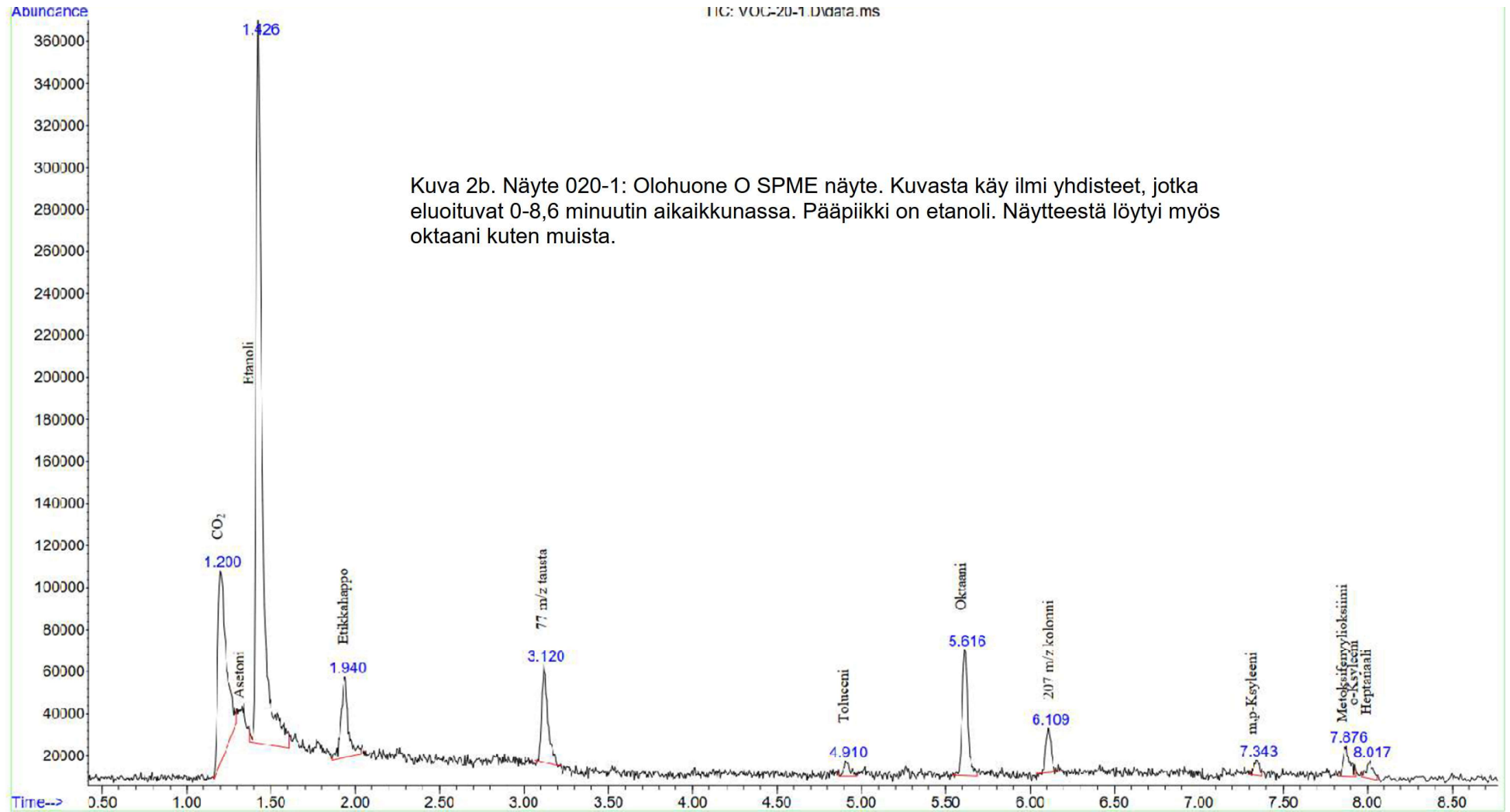
File :C:\msdchem\1\DATA\Data30\Data30-win98\VOC-20-1.D
Operator : Erik Sandell
Acquired : 7 Jul 2022 8:14 using AcqMethod VOCSP/E/1
Instrument : GC/MS Ins
Sample Name: Olohuoneen plo 330ml40 min 2.7-5.7 aj8.7.2022
Misc Info : Test av MSD5971 med win 98
Vial Number: 1



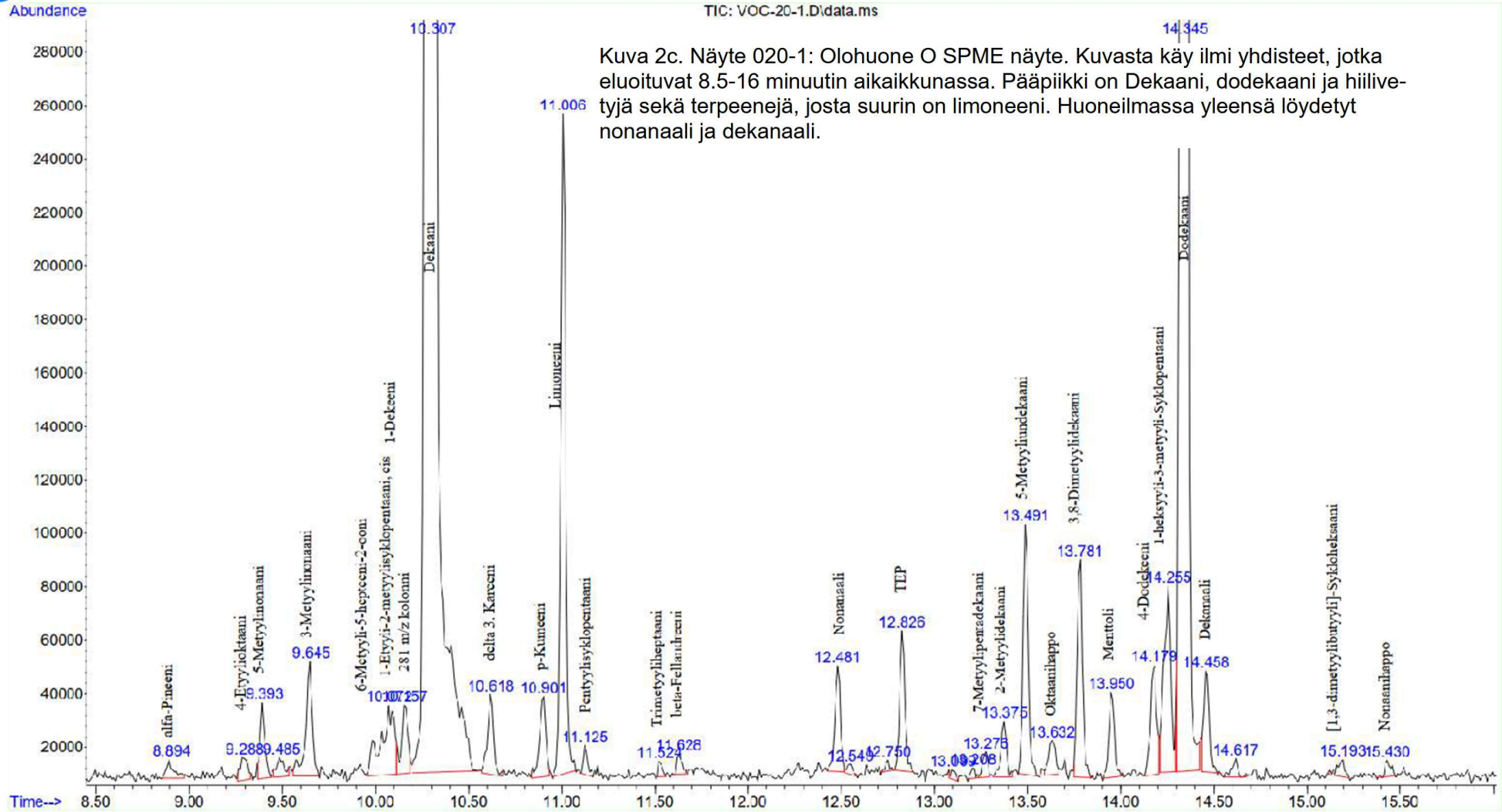
Taulukko 1. Näytteiden VOC-emissiot vertailua varten.

Luvia, huvila

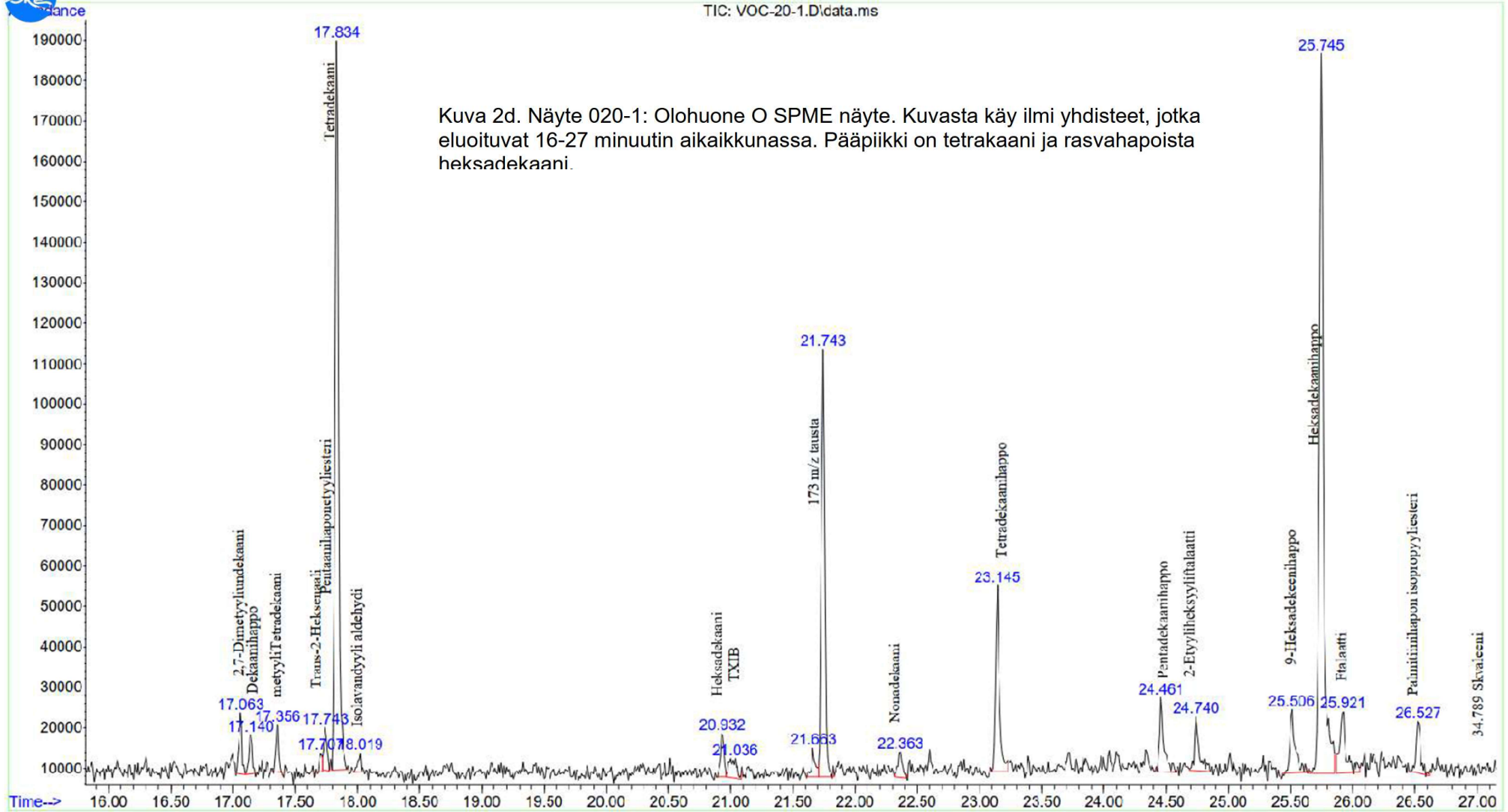
Näyte numero	Tilan koko	Näytteenottimen paikka	Hajukokemus	µg/m ³ , tolueenin avulla
Näyte 20-1	Koko huone	Olohuone O, 28 °C		< 890
		TVOC raja-arvot	200-400 µg/m ³	



Kuva 2b. Näyte 020-1: Olohuone O SPME näyte. Kuvasta käy ilmi yhdisteet, jotka eluotuvat 0-8,6 minuutin aikaikkunassa. Pääpiikki on etanoli. Näytteestä löytyi myös oktaani kuten muista.



Kuva 2c. Näyte 020-1: Olohuone O SPME näyte. Kuvasta käy ilmi yhdisteet, jotka eluoiutuvat 8.5-16 minuutin aikaikkunassa. Pääpiikki on Dekaanit, dodekaani ja hiilivettyjä sekä terpeenejä, josta suurin on limoneniini. Huoneilmassa yleensä löydetty nonanaali ja dekanaali.

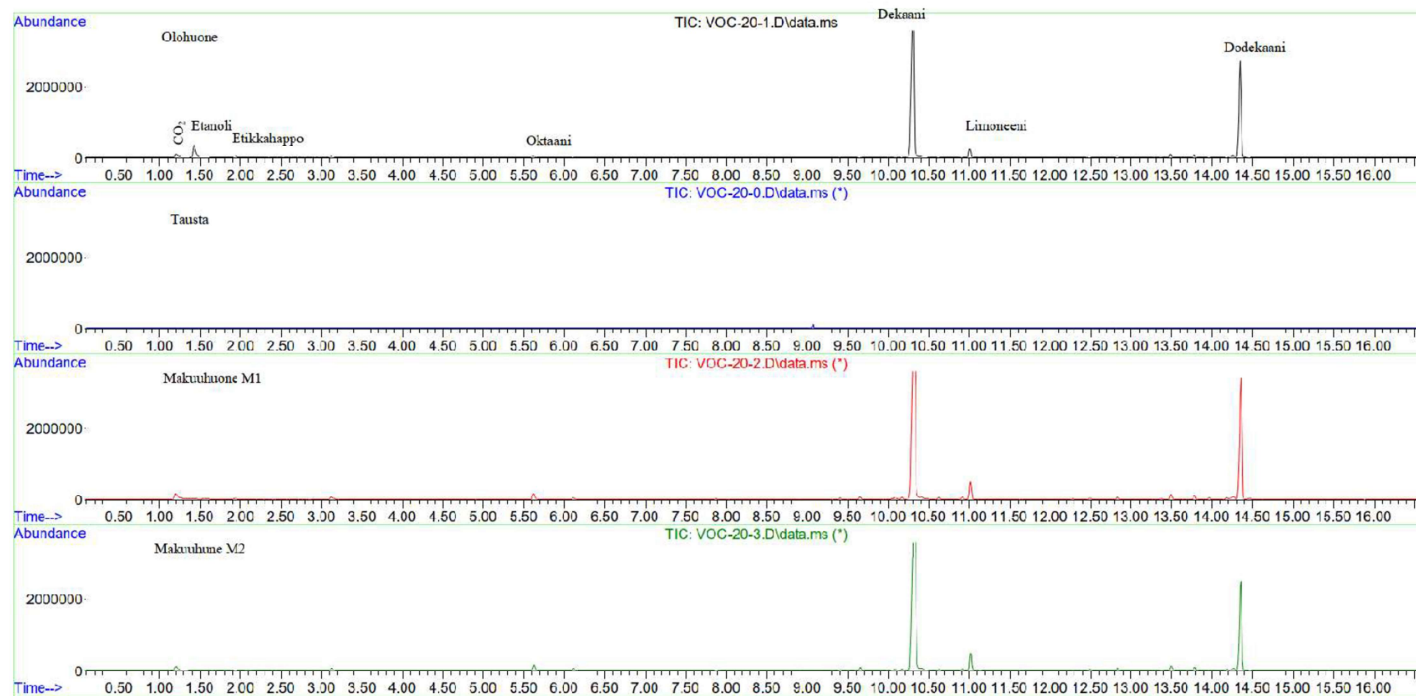


Kuva 2d. Näyte 020-1: Olohuone O SPME näyte. Kuvasta käy ilmi yhdisteet, jotka eluotuvat 16-27 minuutin aikaikkunassa. Pääpiikki on tetrakaani ja rasvahapoista heksadekaani.



Neljän ajon vertailu kohteesta

File :C:\msdchem\1\DATA\ekg 2022\Data30-win98\VOC-20-1.D
Operator : Erik Sandell
Acquired : 7 Jul 2022 8:14 using AcqMethod VOCSPE71
Instrument : GC/MS Ins
Sample Name: Olohuoneen plo 330ml40 min 2.7-5.7 aj8.7.2022
Misc Info : Test av MSD5971 med win 98
Vial Number: 1



Kuva 3. Näyte 020-1_3: Olo ja makuuhuoneiden SPME näytteiden vertailu. Kuvasta käy ilmi yhdisteet, jotka eluotuvat 0-16 minuutin aikaikkunassa. Pääpiikki on Dekanaani > dodekaani. Limoneeni on myös läsnä eli ehkä syöty sitrushedelmiä.



Eli huvilan sisäilma oli huono ja tuuletus on liian pieni. TVOC pitäisi olla pienempi eli alle $400 \mu\text{g}/\text{m}^3$

Yhteenveto

Näyte 20-1 Olohuone O pulloon imetty huoneilma. Näytteen TVOC emissio on $972 \mu\text{g}/\text{m}^3$, yksittäiset VOC-yhdisteet ovat $< 10 \mu\text{g}/\text{m}^3$, paitsi hiilivedyt oktaani, dekaani, dodekaani ja tetradekaani sekä Limoneeni, jotka muodostavat 79 % VOC kuormasta, ja aiheuttaa, että TVOC ylittää toimenpiderajan, joka on $400 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Näytepaikassa oli tunkkaista. Näyte ei sisällä karsinogeenisiä yhdisteitä ($< 1 \mu\text{g}/\text{m}^3$). Formaldehydiä ja ammoniakkia ei määritetty. Hiilivedyt ovat peräisin kapeasta puhdistetusta alifaattisista hiilivedyistä eli parilliset alkaanit oktaani - tetradekaani välillä ja limoneeni ehkä sitruunasta tai appelsiinista.



Mikrobien tuottamat VOC-yhdisteet

Are Some Fungal Volatile Organic Compounds (VOCs) Mycotoxins?

[Joan W. Bennett](#)^{1,*} and [Arati A. Inamdar](#)^{1,2}

Jiujiang Yu, Academic Editor

- Muun muassa:
- Useimpien sieni-VOC-yhdisteiden biosynteettisestä alkuperästä tiedetään yllättävän vähän. Kattava katsaus Korpi et al. sisältää taulukon, jossa on yhteenveto siitä, mitä tiedetään joidenkin yleisimpien mikrobien VOC-yhdisteiden esiasteista [61]. Esimerkiksi yhdisteet, kuten 3-metyyli-1-butanoli, 2-metyyli-1-propanoli ja styreeni, syntyvät aminohapoista [70]. Useita alkeeni- ja metyyliketoneja, kuten 2-butanoni, 2-pentanoni ja 2-undekanoni, syntyvät rasvahapoista [63]. Kahdeksan hiiliyhdistettä, kuten 1-okten-3-oli, 3-oktanoli ja 3-oktanoni, ovat yleisimpiä sienten VOC-yhdisteitä. Vaikka 1-okten-3-olia kutsutaan joskus sekundääriseksi metaboliitiksi, se luokitellaan paremmin lipidien hajoamistuotteeksi. Sekä 1-okten-3-olia että vähemmän haihtuvaa 10-oksohappoa tuotetaan linoli- ja linoleenihappojen entsyymaattisella hapetuksella ja pilkkoutumisella [71]. Pleurotus pulmonariuksessa kaksi erillistä lipoksigenaasia voi osallistua 1-okten-3-olin ja 10-oksohappojen tuotantoon [72]. Termiä "oksilipiini" käytetään usein kuvaamaan yhdisteitä, jotka on johdettu tyydyttymättömien rasvahappojen hapettamisesta, ja se sisältää rasvahappojen hydroperoksidit, hydroksyyli- ja epoksirasvahapot, ketorasvahapot, haihtuvat aldehydit ja sykliset yhdisteet. Haihtuvat oksilipiinit ovat tärkeitä komponentteja monissa hajussa, jotka liittyvät ruoan sivuhajuihin [73]. Viimeaikaiset tutkimukset viittaavat siihen, että joillakin haihtuvilla oksilipiineillä on olennainen rooli sienien morfogeneesissä ja patogeneesissä [74,75]. Lopuksi dimetyylidisulfidi, yhdiste, joka voi olla hyvä haihtuva indikaattori sekä *Stachybotrys chartarum*ille että *Aspergillus*ille.



Are Some Fungal Volatile Organic Compounds (VOCs) Mycotoxins?

[Joan W. Bennett](#)^{1,*} and [Arati A. Inamdar](#)^{1,2}

Jiujiang Yu, Academic Editor

- Yhtään 15 yhdisteestä ei ole arvioitu niiden syöpää aiheuttavan vaikutuksen suhteen, vaikka 3-metyyli-2-butanoni ja 3-metyyli-3-butanoli olivat positiivisia Amesin testissä [85]. Luminesenssitestillä SOS-indusoiva aktiivisuus havaittiin 2-metyyli-1-propanolille, 3-metyyli-1-butanolille, 3-metyyli-2-butanolille, 2-pentanolille, 3-oktanolille, 1-okten-3-ol, 2-heksanoni, 2-pentanoni ja 3-oktanoni [85]. Kreja ja Seidel testasivat 15 yleistä haihtuvaa ainetta käyttämällä ihmisen keuhkokarsinooman epiteelisoluja, kiinanhamsterin fibroblasteja ja ihmisen perifeerisiä verisoluja. Yksikään niistä ei aiheuttanut kromosomikatkoja tai mutageenisuutta, mutta DNA-vaurio havaittiin sytotoksisissa olosuhteissa kaikille testatuille VOC-yhdisteille [86]



Statistical Analysis of Microbial Volatile Organic Compounds in an Experimental Project: Identification and... Article in Indoor and Built Environment · April 2010
DOI: 10.1177/1420326X09342680

- Viisi VOC-yhdistettä, (1-propanoli, sykloheksanoni, 3-metyylifuraani, alfa-pineeni ja pentadekaani) tunnistettiin liittyvän homeen esiintymiseen. Kolme näistä yhdisteistä, sykloheksanoni, 3-metyylifuraani ja alfa-pineeni, on raportoitu asiaankuuluvassa kirjallisuudessa MVOC-yhdisteinä, kun taas kaksi (1-propanoli ja pentadekaani) katsotaan tässä tutkimuksessa MVOC-yhdisteiksi, koska homeen esiintyminen on erittäin merkittävää niiden pitoisuuksista ontelossa. Näiden yhdisteiden päästöt eivät kuitenkaan rajoitu homeeseen; eri sisätilojen lähteiden tiedetään lähettävän samanlaisia VOC-yhdisteitä [10].
- Nämä muut tyypilliset kosteusvaurioihin liitetyt 2-Etyyli-1-heksanoli, Butoksihydroksitolueeni (BHT) ja TXIB etsitään sisäilmanäytteistä osoittamaan kosteusvaurioita.
- Muut hyvät lähteet ovat sisäilmaongelmille on:
 - www.ttl.fi, sisäilma
 - www.sisailmayhdistys.fi
 - www.hengityслиitto.fi



Muita VOC ANALYYSIKOHTEITA

- Materiaalitutkimukset
- Maalien VOC yhdisteiden emissiotutkimukset
- Yritysten patentteihin vaativat orgaanisten yhdisteiden määrittämiset luottamuksella
- Sairauksien diagnostiikka.

Clinical Application of SPME: Analysis of VOCs in Exhaled Breath as Cancer Biomarkers, Bogusław Buszewski, Tomasz Ligor, Joanna Rudnicka, Department of Environmental Chemistry and Bioanalytics, Faculty of Chemistry Nicolaus Copernicus University, Gagarina 7 St., PL-87-100 Toruń, Poland, *Reporter US Volume 30.3*



5. Massaspektrometrien käyttö

- Massaspektrometrien ionilähteet ovat nykyään erittäin inerttejä ja maksimoi yhdisteiden ionisoituminen, ja linssit ohjaavat negatiivisesti varautuneet fragmentit tehokkaasti kvadropolikentän läpi detektorille. Detektorit ovat myös kehittyneet valtavasti. Vanhemmat multipleierit olivat erittäin herkkiä hapelle ja siten niitä piti suojata ilmasta venttiilien taakse, kun ionilähde piti puhdistaa. Nykyiset kvadropoleissa olevat kestävät ilmaa paremmin ja siten niitä ei ole tarvetta suojata ilmasta ionilähteen puhdistuksen yhteydessä.
- Massaspektrometri ovat tietokoneiden kehityksen myötä, niiden nopeus, tullut pysyväksi identifioimiskeinoksi ja samalla kvantitointiin on saavuttanut perinteisen FID-detektorin tarkkuuden. Nykyään saadaan kaikki tarvittava dataa yhdestä ajosta. Massaspektrometrin ainoa huono puoli on, että kantokaasu analyyseissä ei voi olla typpeä. On käytettävä Heliumia, joka on kallis ja myös hupeneva kaasu, ja hinta sekä saatavuus on ongelma. Onneksi tulevaisuudessa uusimmissa massaspektrometreissa voidaan vaihtaa helium vedyksi. Se ei ole valitettavasti mahdollista vanhemmissa laitteissa.
- Massaspektrometrit käytetään nykyisin ympäristöanalytiikassa, sisäilma analytiikassa, kosmetiikka analyyseissa, lääkeaineiden tarkistuksessa, sairaalan diagnostiikassa ja ruoka-aineiden jäämäanalytiikassa



6. yhteystiedot

- EKG CONSULTING OY LTD
- Erik Sandell
- Puh. 0505637421
- erik.sandell@ekgconsulting.fi

