

ỨNG DỤNG PHẦN MỀM AIQS-DB PHÂN TÍCH CÁC HỢP CHẤT HỮU CƠ TRONG MẪU NƯỚC CÁC SÔNG LỚN CỦA VIỆT NAM

Đến tòa soạn 28 – 7 – 2015

Nguyễn Thanh Thảo, Nguyễn Quang Trung, Dương Thị Hạnh

Viện Công nghệ Môi trường, Viện Hàn Lâm Khoa học Việt nam

Kadokami Kiwao

Trường Đại học Kitakyushu, Nhật Bản

SUMMARY

APPLICATION OF AIQS-DB SOFTWARE FOR ANALYSING MULTI - ORGANIC COMPOUNDS IN WATER OF RIVERS IN VIETNAM

This paper presents results of applying the software AIQS-DB (Automated Identification and Quantification System with a database) using GC / MS for the analysis of 943 organic compounds in 59 river waters in Hanoi, Hai Phong, Da Nang and Ho Chi Minh city. The results show that: 235/943 compounds were detected, including steroid compounds ($C = 31,7-50,3\text{ng/L}$) and petrochemicals ($C = 10.1-12,2\text{ng/L}$) was found in 100% of the samples analyzed. The main steroids such as cholesterol ($C = 178\text{ng/L}$), beta-sitosterol ($C = 3,94\text{ng/L}$), coprostanol ($11,2\text{ng/L}$), coprostanone ($3,13\text{ng/L}$) appear from 98-100 59% of the total sample, the concentration and frequency appear higher than with other organic compounds, only about $\leq 2\text{ng/L}$. AIQS-DB software was also calibrated by using surrogate standard from Kanto Chemical Co (18 compounds). Mixed- n-alkanes solution (C_9-C_{33}) to estimate real retention time of analysis compounds compare to retention time in database. AIQS-DB software perfectly suited to determine the qualitative and quantitative and over 943 organic compounds in water without the use of standards.

Key words: Software AIQS-DB, river water samples, organic compounds, pollution.

1. GIỚI THIỆU PHẦN MỀM AIQS – DB VÀ ỨNG DỤNG

Để phân tích các hợp chất hữu cơ ô nhiễm trong môi trường nước, phần lớn các công trình công bố đều phải dùng các dung dịch chuẩn và phân tích tối đa được vài chục chất^[1,2,3,4]. Các chi phí về hóa chất, thời

gian, quy trình xử lý mẫu cho từng nhóm chất riêng lẻ phức tạp. Đây chính là hạn chế lớn nhất của các phương pháp phân tích truyền thống. Năm 2005, Giáo sư Kiwao Kadokami, trưởng khoa Kỹ thuật môi trường, Trường Đại học Kitakyushu đã phối hợp với công ty Shimadzu Nhật Bản

nghiên cứu và phát triển thành công phần mềm AIQS-DB tích hợp trên thiết bị GC/MS để phân tích định tính và định lượng 943 chất hữu cơ trong các mẫu nước và trầm tích[5,6,7]. Phần mềm AIQS-DB gồm 2 phần chính: phần 1 (Compound composer-database registration phase) nạp dữ liệu về các thông tin thời gian lưu, khối phổ, đường chuẩn của các hợp chất hữu cơ; Phần 2(Compound Composer-method creation phase) xuất ra các file chuẩn từ các dữ liệu đã có để xử lý, nhận biết kết quả. Ưu điểm của phần mềm này là: (1).Không sử dụng chất chuẩn đối với từng chất hữu cơ. (2) Phương pháp có độ nhạy cao, giới hạn phát hiện của thiết bị ≤ 10 ng. (3) Cho phép phân tích với độ chính xác cao và khả năng định tính tốt dựa trên phổ khối chuẩn của các chất hữu cơ. (4) Có thể cập nhật dữ liệu của các chất hữu cơ mới và mở rộng số lượng các chất hữu cơ có thể phân tích được. Phương pháp này rất phù hợp với các nước đang phát triển như Việt Nam do có các ưu thế như chi phí thấp, tiết kiệm thời gian và nhân lực trong quá trình thực hiện. Danh sách nhóm các hợp chất có thể phân tích trên GCMS bằng phần mềm AIQS-DB gồm: 1-Nhóm thuốc diệt côn trùng (184 hợp chất), 2- Thuốc trừ cỏ (108), 3-Thuốc trừ nấm (109), 4-các loại trừ sâu khác(36), 5- Sterols (10), 6- Chống oxi hóa (6), 7- nước hoa và mỹ phẩm(11), 8- thuốc xông khử trùng, khử khuẩn(4), 9-Axits béo metylester (36), 10- Chất chống cháy(13), 11- Chất dẻo(14), 12- Các sản phẩm trung gian (111chất), 13-Các chất có nguồn gốc từ các sản phẩm chăm sóc sức khỏe(18), 14- Mỹ phẩm (28), 15- Dầu mỡ(26), 15- dung môi (17), 16- PAHs(46), 17- PCBs và PCNs (91), 18- chất nổ(6), 19- Chất có nguồn gốc công nghiệp, sinh hoạt khác (74), 20- Chất nội chuẩn (8). Trước khi

phân tích thì phải phân tích dung dịch chuẩn n-alkans để dự kiến thời gian lưu. Thời gian lưu dự kiến không được sai khác quá 3s so với thời gian lưu trong CSDL.

Trường đại học Kytakyushu đã phối hợp với Viện Công nghệ Môi trường để ứng dụng phần mềm AIQS-DB tại Việt Nam. Mẫu nước được lấy tại các con sông lớn ở các thành phố Hà Nội, Hải Phòng, Đà Nẵng và thành phố Hồ Chí Minh để đánh giá ô nhiễm các chất hữu cơ.

2. HÓA CHẤT, THIẾT BỊ, PHƯƠNG PHÁP PHÂN TÍCH

2.1. Hóa chất

- Các hoá chất: n-hexane, acetone, Diclomethane của hãng JT. Baker, USA và muối NaCl, Na₂SO₄, NaH₂PO₄, Na₂HPO₄ (nung 700⁰C, 4h) của hãng Merck
- Dung dịch nội chuẩn (Internal Standard mixtrue) bao gồm 08 chất (4-Chlorotoluene; 1,4Dichlorobenzen-d4;Naphthalene;Acenaphthanene-d10;Phenanthrene- d10; Fluoranthene-d10; Chrysene- d12; Perylene- d12)
- Dung dịch chuẩn kiểm soát: n-alkanes C₉ – C₃₃ dùng để xác định thời gian lưu (1ppm); - Dung dịch chuẩn đồng hành (surrogate compound): dung dịch 18 chất (1ppm) có trong cơ sở dữ liệu phần mềm AIQS-DB.

2.2. Thiết bị và dụng cụ thí nghiệm

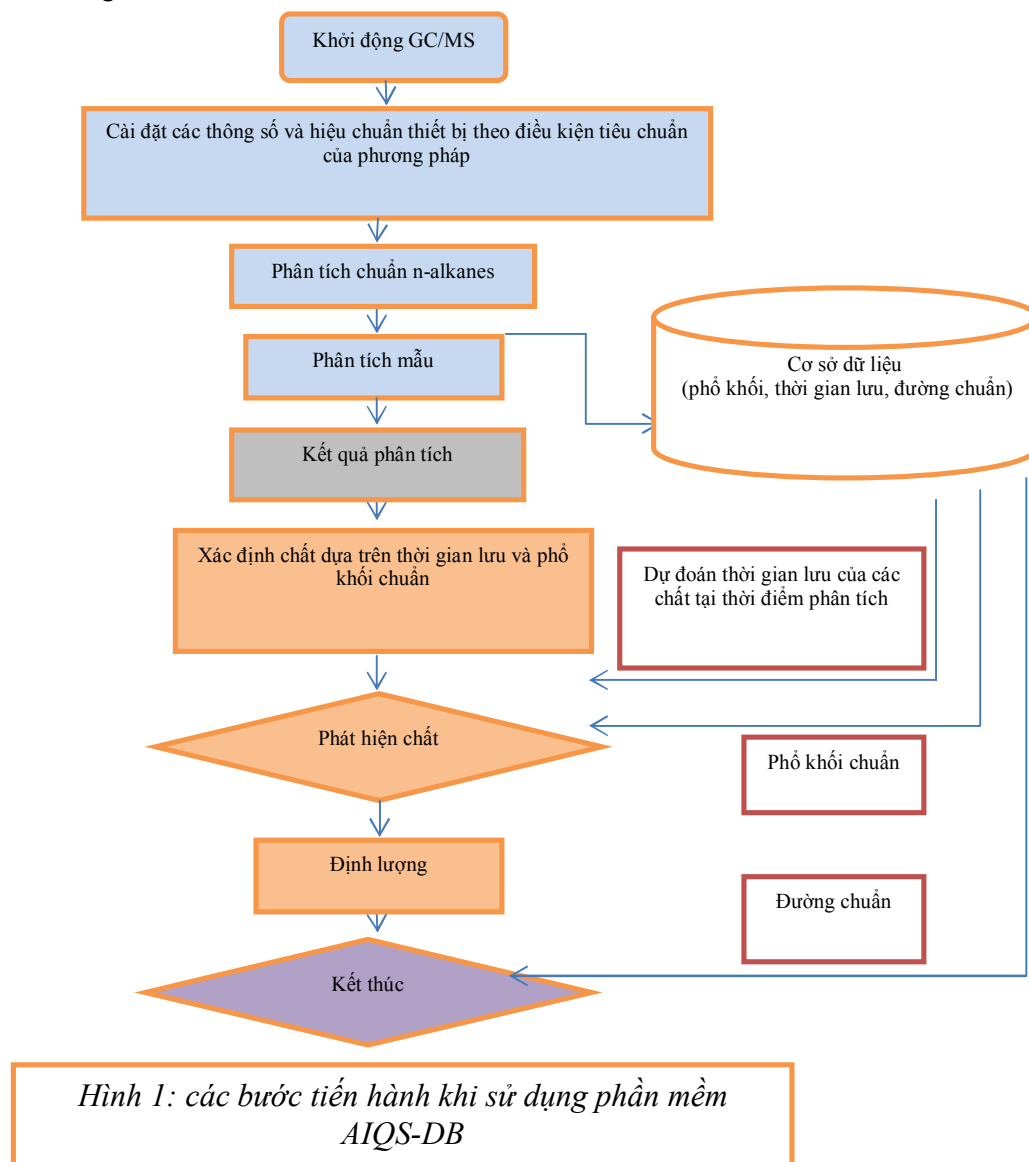
Cân phân tích độ chính xác đến 10⁻⁴g, Máy siêu âm Ultrasonic. Hệ chiết mẫu lỏng tự động Shaker A - 300. Hệ thống cất quay chân không Buchi R - 200 với hệ điều khiển V-800. Bộ thổi khí N₂. Thiết bị sắc ký khí GC/MS-QP 2010, Shimadzu. Hệ bơm mẫu tự động AOC-2000, Shimadzu. Cột mao quản Agilent J&W DB5 –MS Ultra Inert, dài 30m, đường kính trong 0,25mm và bề dày lớp pha tĩnh 0,25 μ m.

Dụng cụ thủy tinh thích hợp trong phòng thí nghiệm.

2.3. Quy trình xử lý mẫu bằng phương pháp chiết lỏng-lỏng

Mẫu nước được đưa về nhiệt độ phòng trước khi phân tích. Lấy 1L mẫu nước cho vào phễu chiết dung tích 2L, thêm 30 g muối NaCl vào để tăng độ tan của chất phân tích vào pha dung môi. pH của mẫu được điều chỉnh tới pH=7 bằng 1ml dung dịch đệm Photphat và thêm 1μl dung dịch chuẩn đồng hành có nồng độ 10μg/mL. Tiến hành chiết mẫu 3 lần bằng dung môi DCM với thể tích dung môi lần lượt là 50ml,

30ml, 10ml. Sau khi chiết, dịch chiết được loại nước bằng cách cho chảy qua phễu thủy tinh chứa Na₂SO₄ muối 10g khan và lót bông thủy tinh ở dưới. Sau loại nước, dịch chiết được cô đặc về 2-3ml bằng máy cất quay chân không. Chuyển dung môi bằng cách thêm 10 ml n hexan vào dịch chiết, rồi cô còn 5ml. Dịch chiết cuối cùng được làm giàu chính xác về 1ml sử dụng dòng khí N₂. Sau đó thêm 100 μl dung dịch nội chuẩn có nồng độ 10μg/mL. Tiến hành đo mẫu trên thiết bị GC/MS phân tích trên phần mềm AIQS-DB.



2.4. Điều kiện phân tích tối ưu trên GCMS

Bước 1: Khởi động và cài đặt các điều kiện cho thiết bị

- Lắp đặt cột mao quản DB5–MS (5% Phenyl- methyl polysiloxane capillary column) với chiều dài 30m, đường kính trong 0.25mm và bề dày lớp pha tĩnh 0,25 μm . Mỡ van khí heli. Khởi động thiết bị theo thứ tự GC – MS – bộ bơm mẫu tự

động AOC-2000. Bật chương trình GCMS Real Time Analysis, chọn biểu tượng Vacuum Control, click Auto Startup, đợi đến khi hệ thống chân không hoàn toàn đạt (khi tiến hành đo mẫu phải đợi ít nhất 5 tiếng kể từ lúc bật để áp suất H. Vac ở phía bên phải giao diện màn hình hiển thị giá trị 10^{-4} kPa)

- Các thông số cài đặt cho GCMS

Chương trình nhiệt độ lò cột (column oven temperature):

Nhiệt độ ban đầu 40 $^{\circ}\text{C}$ giữ trong 2 phút. Tăng đến 310 $^{\circ}\text{C}$ với tốc độ 8 $^{\circ}\text{C}$ /phút giữ trong 4 phút. Tổng thời gian phân tích là 39.75 phút.

áp suất cột là: 71,4kPa

Nhiệt độ cổng bơm: 250 $^{\circ}\text{C}$

Nhiệt độ cột : 40 $^{\circ}\text{C}$

Thể tích mẫu bơm vào: 1 μL

Chế độ bơm : không chia dòng (splitless)

Tốc độ khí mang: 1,2mL/phút với chế độ tuyến tính vận tốc 40cm/giây.

Nhiệt độ ion source: 2000 $^{\circ}\text{C}$

Nhiệt độ Interface: 3000 $^{\circ}\text{C}$

Khí mang: He

Solvent cut time : 6 phút

Ionization method: EI

Tuning method: target tuning for US EPA method 625

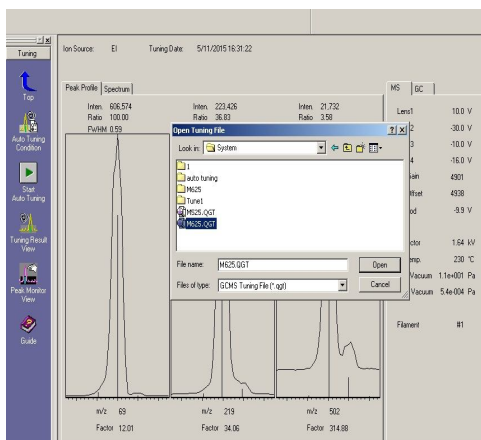
Scan range: 33 amu to 600 amu

Scan rate: 0.35 s/scan

Dung môi: Hexane

Bước 2: Hiệu chỉnh điều kiện của thiết bị (tuning)

Việc hiệu chỉnh nhằm mục đích mang lại độ nhạy tối ưu và tối ưu độ phân giải, chất chuẩn PFTBA (Perfluorotributylamine) được sử dụng trong quá trình hiệu chỉnh thiết bị⁽¹¹⁾. Sử dụng file tuning M625.qgt để hiệu chỉnh thiết bị.



Hình 2: Lựa chọn file M625.qgt

Bước 3: Đo dung dịch chuẩn n-alkanes

Đo dung dịch chuẩn n-alkanes (C9-C33) để xác định độ chệch thời gian lưu dự kiến và thời gian lưu thực tế của các n-alkanes. Mục đích của đo dung dịch n-alkanes cũng để xem mức độ ổn định của thiết bị so với điều kiện thiết bị chuẩn được đặt ra của phần mềm. Dung dịch chuẩn n-alkanes (C9-C33) với nồng độ 1-2 mg/L được bơm 1 µl vào hệ thống GC/MS đã được thiết lập các thông số theo điều kiện chuẩn.

Bước 4: Cập nhật thời gian lưu vào cơ sở dữ liệu

Sau một thời gian sử dụng, thời gian lưu dự kiến của các n-alkanes (C9-C33) sẽ bị sai lệch so với thời gian lưu thực tế ban đầu, vì vậy ta cần cập nhật thời gian lưu dự kiến của các n-alkanes cho cơ sở dữ liệu đạt yêu

ID#	Name	Ret.Time	m/z	Height	SI
1	C9	6.513	85.00	257780	96
2	C10	8.696	85.00	266338	97
3	C11	10.757	85.00	321109	96
4	C12	12.691	85.00	394977	96
5	C13	14.504	85.00	452919	96
6	C14	16.210	85.00	494889	96
7	C15	17.818	85.00	1011774	96
8	C16	19.337	85.00	523106	95
9	C17	20.778	85.00	510809	96
10	C18	22.147	85.00	505307	95
11	C19	23.452	85.00	516068	95
12	C20	24.695	85.00	523681	95
13	C21	25.884	85.00	498212	94
14	C22	27.021	85.00	508078	94
15	C23	28.113	85.00	477845	94
16	C24	29.159	85.00	471651	95
17	C25	30.166	85.00	473432	94
18	C26	31.134	85.00	503782	93
19	C27	32.069	85.00	486403	94
20	C28	32.971	85.00	478468	94
21	C29	33.841	85.00	486285	91
22	C30	34.684	85.00	959935	94
23	C31	35.500	85.00	860604	94
24	C32	36.317	85.00	807556	94
25	C33	37.233	85.00	799025	94

Hình 3: Thời gian lưu của các n-alkanes

Bước 5: Phân tích mẫu

Sử dụng phương pháp phân tích đã được cập nhật thời gian lưu. Phát hiện các chất dựa trên thời gian lưu và phổ khối, định lượng bằng đường chuẩn có sẵn trong cơ sở

cầu để phân tích. Điều kiện kiểm tra: nồng độ của các n-alkanes trong khoảng 0.6-2.4 mg/L và thời gian lưu của chất nội chuẩn Perylene-d12 lệch không quá 3s so với dự kiến. Do trong quá trình sử dụng cột tách phải được cắt. Khi chiều dài cột thay đổi, độ chính xác của thời gian lưu dự đoán vẫn tốt khi linear velocity là 40 cm/s. hoặc thời gian lưu có thể bị thay đổi do sử dụng cột tách có đường kính, bề dày lớp pha tĩnh khác với cột tách sử dụng. Xác định sự khác biệt giữa thời gian lưu thực tế và dự đoán của Perylene-d12 phải nhỏ hơn 3s, nếu không phải hiệu chỉnh lại bằng cách tăng áp suất lò cột là 0,669psi cho 1s trễ.

Automatic Adjustment of Retention Time [AART] 2/2 - (Simul_SCAN_start time 8min.aggm)

The retention time in the compound table of the method file is modified like the following table. In addition, if you want to modify the time of the MS instrument parameters by using the differences of the retention time, please turn on the following check.

Compound Table Information of Method File				
ID#	Name	Ret. Time(Before)	Ret. Time(After)	Ret. Index
1	C9	6.751	6.513	900
2	C10	8.948	8.696	1000
3	C11	11.022	10.757	1100
4	C12	12.963	12.691	1200
5	C13	14.780	14.504	1300
6	C14	16.488	16.210	1400
7	C15	18.099	17.818	1500
8	C16	19.627	19.337	1600
9	C17	21.064	20.778	1700
10	C18	22.435	22.147	1800
11	C19	23.740	23.452	1900
12	C20	24.985	24.695	2000
13	C21	26.174	25.884	2100
14	C22	27.313	27.021	2200
15	C23	28.405	28.113	2300
16	C24	29.453	29.159	2400
17	C25	30.461	30.166	2500
18	C26	31.430	31.134	2600
19	C27	32.366	32.069	2700
20	C28	33.268	32.971	2800
21	C29	34.140	33.841	2900
22	C30	34.984	34.684	3000
23	C31	35.800	35.500	3100
24	C32	36.656	36.317	3200
25	C33	37.633	37.233	3300

☒ Modify the time of MS instrument parameters.

< Back Finish Cancel Help

Hình 4: Cập nhật thời gian lưu của các n-alkanes vào cơ sở dữ liệu

dữ liệu. Thực hiện quá trình phân tích mẫu theo hai cách: **Sample login** (đo mẫu đơn) hoặc **Batch Processing** (tự động đo nhiều mẫu theo thứ tự).

Bước 6: Xuất kết quả đo

Sau khi máy chạy xong mẫu và xuất ra file kết quả qgd, mở file nhận được bằng **GC/MS Postrun Analysis** vào mục **Quantitative**, chọn **Load Method** và mở file method đã dùng.

2.5. Lấy mẫu nước tại một số sông ở Việt Nam

Bảng 1: số lượng mẫu phân tích

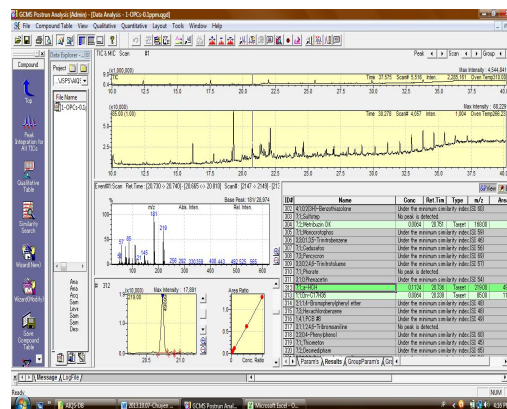
Thành phố	2011		2012	Thành phố	2011		2012
	M.khô	M. mưa	M. khô		M.khô	M. mưa	M. khô
Hà Nội	3	6	6	Đà Nẵng	2	6	6
Hải Phòng	3	5	5	Tp HCM	3	7	7

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

3.1. Thử nghiệm phần mềm AIQS-DB bằng thực nghiệm và sai số.

Phần mềm AIQS-DB được cài sẵn vào thiết bị GC/MS và sử dụng lâu dài cho mục đích phân tích mẫu. Vì vậy, phải kiểm tra sự tương thích của phần mềm với điều kiện thực tế của thiết bị GC/MS, một số hợp chất chuẩn được sử dụng để: 1- Kiểm tra tính trợ công bơm (ví dụ sử dụng hợp chất p,p'-DDT, Isoxathion là các chất dễ bị phân hủy v.v). 2- Kiểm tra tính trợ của cột (ví dụ sử dụng Benzidine để kiểm tra độ hấp thụ, kéo dài đuôi pik v.v); 3- Kiểm tra độ hấp thụ và kéo dài đuôi ic (ví dụ dùng Benzo(g,h,i) perylene, m-Phenylenediamine.v.v.); 4-Chất nội chuẩn IS (ví dụ: 4.Chlorotoluene-d4, Acenaphthene-d10); 5- Xác định giá trị định lượng (ví dụ dùng Benzothiazole, Pentachlorophenol); 6- Để kiểm tra thời gian lưu (dùng dãy n-ankan C₉-C₃₃); 7- Dung dịch các chất chuẩn đồng hành n=38 hay n=18 hợp chất.

Tổng số 59 mẫu nước từ các con sông lớn của Hà Nội, Hải Phòng, Đà Nẵng và thành phố Hồ Chí Minh vào mùa khô và mùa mưa năm 2011-2012 được lấy và bảo quản theo TCVN 6663-1:2011. Số lượng mẫu được phân bố như trong bảng 1.



Hình 5. Sắc phổ phân tích các hợp chất hữu cơ bằng AIQS-DB

Automatic Adjustment of Retention Time (AART) 2/2 - (Simul_SCAN_start time Bmin.aggm)

The retention time in the compound table of the method file is modified by the following table. In addition, if you want to modify the time of the MS instrument parameters by using the differences of the retention time, please turn on the following check.

Comp	Name	Ret. Time(Before)	Ret. Time(After)	Ret. Index
1	C9	6.761	6.813	900
2	C10	8.948	8.896	1000
3	C11	11.822	10.757	1100
4	C12	12.963	12.691	1200
5	C13	14.700	14.634	1300
6	C14	16.488	16.210	1400
7	C15	18.839	17.818	1500
8	C16	19.621	19.257	1600
9	C17	21.064	20.778	1700
10	C18	22.435	22.147	1800
11	C19	23.740	23.482	1900
12	C20	24.845	24.695	2000
13	C21	26.174	25.884	2100
14	C22	27.513	27.021	2200
15	C23	28.405	28.113	2300
16	C24	29.483	29.159	2400
17	C25	30.461	30.166	2500
18	C26	31.430	31.134	2600
19	C27	32.366	32.069	2700
20	C28	33.268	32.971	2800
21	C29	34.140	33.841	2900
22	C30	34.944	34.684	3000
23	C31	35.800	35.500	3100
24	C32	36.656	36.317	3200
25	C33	37.633	37.253	3300

☒ Modify the time of MS instrument parameters.

Buttons: C Back, Finish, Cancel, Help

Hình 6. Dãy chuẩn n-ankan(C₉-C₃₃)

Để phân tích theo phần mềm này thì 18 chất chuẩn đồng hành thuốc trừ sâu nhóm cơ Clo (0.1ppm) và dung dịch chất chuẩn n-ankan (từ C₉-C₃₃, 0.1ppm) đã được sử dụng để đánh giá sai số, độ thu hồi và độ sai lệch của thời gian lưu dự kiến của các chất phân tích. Thời gian lưu dự kiến không được sai lệch quá 3s so với thời gian lưu

trong cơ sở dữ liệu. Bảng 2: Dung dịch chuẩn n-ankan (C₉-C₃₃) kiểm tra.

3.2. Kết quả phân tích nước một số sông áp dụng phần mềm AIQS-DB trên GC/MS

Kết quả ở bảng 2 cho thấy 235/ 950 hợp chất hữu cơ được phát hiện có mặt trong 59 mẫu nước.

Bảng 2. Danh sách các nhóm chất phát hiện được trong 59 mẫu nước sông.

STT	Nhóm chất	N/M	Nồng độ TB (ng/L)		STT	Nhóm chất	N/M	Nồng độ TB (ng/L)	
			Mùa khô	Mùa mưa				Mùa khô	Mùa mưa
1	Thuốc trừ sâu	25/180	2.70	1,58	12	đeo	8/13	10,2	12,2
2	Thuốc diệt cỏ	5/120	0.07	0,25	13	PPCPs	10/14	7,84	11,0
3	Thuốc diệt nấm	8/117	0,37	0,44	14	Từ sinh hoạt	7/34	2,34	7,14
4	Chống oxy hóa	2/7	0,11	0,24	15	SP trung gian (nhuộm)	6/25	1,14	0,27
5	Chất chống cháy	2/13	0,26	0,1	16	SP trung gian của nhựa	4/11	1,28	0,74
6	Thuốc kh. trùng	3/4	-	41,8	17	SP trung gian của TTS	2/26	0,55	0,01
7	Methyl Ester	2/36	-	0.03	18	SP trung gian (hữu cơ)	19/59	4,40	2,03
8	Nước hoa và mỹ phẩm	4/9	1,64	3,57	19	PAHs	33/47	0,88	0,44
9	Chiết từ cao su	11/23	2,47	3,05	20	PCBs	36/62	0,004	0,004
10	Dầu khí	26/26	12,2	11,1	21	Dung môi	7/17	4,74	4,32
11	Steroid các loại	10/10	31,7	50,4	22	Các hóa chất CN khác	5/39	0,03	0,02
Tổng cộng: có 235 hợp chất hữu cơ được tìm thấy trong 59 mẫu nước sông ngòi							235 / 950 (0,004 - 12,2ng/L)		

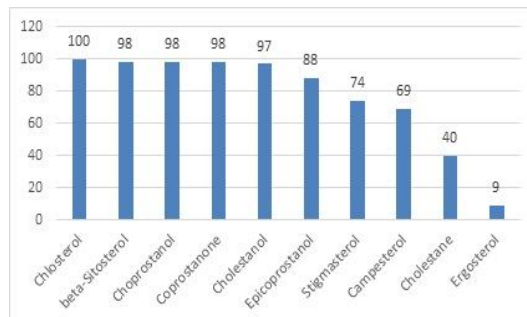
Ghi chú: N là số các hợp chất hữu cơ phát hiện được trong mẫu bằng phần mềm AIQS-DB. M là số các hợp chất hữu cơ có trong tập cơ sở dữ liệu AIQS-DB.

90% các mẫu nước của các sông lớn ở Việt Nam có phát hiện có các hợp chất hữu cơ khác nhau và được định tính và định lượng bằng cơ sở dữ liệu của phần mềm AIQS-DB, trong đó các hợp chất steroid động, thực vật và các sản phẩm hóa dầu xuất hiện với tần xuất cao nhất, 100% các mẫu phân tích đều có, tiếp đến PAHs, PPCPs (tần xuất xuất hiện khoảng 70%), hóa chất dẻo (khoảng 61%) v.v. Các steroid chính như cholesterol (xuất hiện 100% với nồng độ từ 0,27-178 ng/L). Đây cũng được xem như một chất chỉ thị đối với nguồn nước thải đô thị, khu công nghiệp vì sự có mặt của nó trong phân người và gia súc. Kết quả cho thấy các steroid xuất hiện trong mẫu nước với tỉ lệ khác nhau, từ 9-100% số mẫu nước có mặt từ 1 đến vài hợp chất steroid, mặc dù nồng độ có thể rất thấp, vài ng/L, nhưng cũng đủ để cho thấy có sự hiện diện và nguy cơ ô nhiễm của các chất này trong hệ thống sông ngòi Việt Nam.

4. KẾT LUẬN

Với kết quả nghiên cứu, cho thấy môi trường nước tại các sông ngòi ở Việt nam đều bị ô nhiễm các hợp chất hữu cơ, tuy nhiên việc điều tra, khảo sát và đánh giá sự hiện diện và mức độ ô nhiễm các hợp chất này còn rất hạn chế, điều đó thể hiện rất nhiều hợp chất hữu cơ không được qui định trong các tiêu chuẩn, qui chuẩn Việt Nam. Phần mềm cơ sở dữ liệu AIQS-DB ứng dụng cho phân tích 943 hợp chất hữu cơ là thành công lớn, giúp cho có thể phát hiện đồng thời, hầu hết các hợp chất hữu cơ có mặt trong mẫu nước mà không cần các chất chuẩn đi kèm, thời gian phân tích ngắn, độ nhạy và độ chính xác cao, hỗ trợ cho việc xác định nguyên nhân của sự cố ô nhiễm

môi trường trong trường hợp khẩn cấp. Với các ưu điểm trên, phần mềm cơ sở dữ liệu AIQS-DB dùng phân tích các hợp chất hữu cơ có mặt trong môi trường nước cần được giới thiệu và áp dụng rộng rãi ở Việt nam.



Hình 7. Tỉ lệ % các steroid có trong 59 mẫu nước

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- 1- Camino-Sánchez, F.J., Zafra-Gosmez, A., Pérez-Trujillo, J.P., Conde-Gonzalez, J.C., Jose Luis Vislchez, (2011). Validation of a GC-MS/MS method for simultaneous determination of 86 persistent organic pollutants in marine sediments by pressurized liquid extraction followed by stir bar sorptive extraction. *Chemosphere* 84, 869-881.
- 2- Jin, X., Huang, G., Jiang, G., G., Liu, J., Zhou, Q., (2004). Simultaneous determination of 4-tert-octylphenol, 4-nonylphenol and bisphenol A in Guanting Reservoir using gas chromatography-mass spectrometry with selected ion monitoring. *J. Environ. Sci. (China)*. 16. 825-828.
- 3- Leeming, R., Ball, A., Ashbolt, N., Nichols, P. (1996). Using faecal sterol from humans and animals to distinguish faecal pollution in receiving water. *Water Research*, 30, 2893-2900.

- 4- Hung,D.Q and Thiemamn,W.(2002). Contamination by selected chlorinated pesticides in Surface water in Hanoi, Vietnam. *Chemosphere.*, 47,357-367.
- 5- Kiwao Kadokami, Kyoko Tanada, Katsuyuki Taneda, Katsuhiro Nakagawa, (2004). Development of a novel GC/MS database for simultaneous determination of hazardous chemicals: BUNSEKI KAGAKU 53, trang 581-588.
- 6- Kiwao Kadokami, Kyoko Tanada, Katsuyuki Taneda, Katsuhiro Nakagawa,(2005). Novel gas chromatography-mass spectrometry database for automatic identification and quantification of micropollutants: *J. Chromatogr A*, 1089, trang 219-226.
- 7- Jinya D.,et al.,(2013): Novel screening methods measure hundreads of chemicals simultaneously. *Anal.Sci.*, 29,pp 483-486.
- 8- Kiwao Kadokami, Xuehua Li, Shuangye Pan, Naoko Ueda, Kenichiro Hamada, Daisuke Jinya, Tomomi Iwamura, (2013). Screening analysis of hundreds of sediment pollutants and evaluation of their effects on benthic organisms in Dokai Bay, Japan: *Journal of V4* trang 721-728.
- 9- Li WM, Li XH, Cai XY, Chen JW, Qiao XL, Kiwao K, DaisukeJ , Toyomi, (2010). Application of automated identification and quantification system with a database (AIQS-DB) to screen organic pollutants in surface waters from Yellow River and Yangtze River].
- 10- Duong Thi Hanh, Kiwao Kadokami, shuangye Pan, Naoki Matsuura, Nguyen Quang Trung, (2014). Screening and analysis of 940 organic micro-pollutants in river sediments in Vietnam using an automated identification and quantification database system for GC-MS: *Chemosphere*
- Shimadzu Việt Nam, Hướng dẫn sử dụng sắc ký khí ghép khối phổ GC-MS QP2010.