



Syddansk Universitet

**AUTOSPAN - AUTOMATISK  
OPSAMLING AF VANDPRØVER  
FOR DISTRIBUTUERET SPORING  
OG ANALYSE AF ORGANO-  
KEMISK FORURENING**  
**AUTOSPAN - AUTOMATISK  
OPSAMLING AF VANDPRØVER**

---



Projektet er finansieret med puljemidler  
fra Den Syddanske Udviklingspulje for  
rent vand og jord

**Syddansk Universitet (SDU):**

Casper Kunstmann  
Jacek Fiutowski

**Samarbejdspartnere:**

VandCenter Syd (Rikke Hansen)  
CPHNano (Emil Højlund-Nielsen)

**Følgegruppe (Region Syddanmark):**

Heidi Hinge Krogsgaard  
Agnieszka T. Bentzen  
Jesper Lindgren Gregersen



**Ansvarsfraskrivelse:** Region Syddanmark vil, når lejligheden gives, offentliggøre rapporten som er finansieret med puljemidler fra "Den Syddanske Udviklingspulje for rent vand og jord". Det skal bemærkes, at offentliggørelse af rapporten ikke nødvendigvis betyder, at Region Syddanmark er enig i rapportens indhold og konklusioner, men er udelukkende med henblik på at dele viden om teknologiudviklingen på jordforureningsområdet.

# Slut-rapport:

## Indhold

|                                                               |    |
|---------------------------------------------------------------|----|
| Motivation og formål (fra ansøgning).....                     | 1  |
| Metoder (fra ansøgning).....                                  | 1  |
| Planlægning og Bemanding .....                                | 2  |
| Gennemførte metoder.....                                      | 2  |
| Metode evaluering.....                                        | 2  |
| Automatisk analyse-enhed .....                                | 3  |
| Opkoncentrering af PFOA .....                                 | 5  |
| Optiske målinger .....                                        | 7  |
| Lateral Flow Device papir-tests (LFD). .....                  | 8  |
| Raman (og SERS) - <i>Clean Cluster</i> Vidensbro projekt..... | 9  |
| Opsummerende konklusion .....                                 | 10 |
| Perspektivering .....                                         | 12 |

## Motivation og formål (fra ansøgning)

Per- og polyfluorerede alkylstoffer (PFAS) er en stor global belastning for miljøet og folkesundheden. Derfor skal overflade- og grundvandsanalyser udføres kontinuerligt, helst i realtid, for at håndtere historiske og aktuelle forurenende udledninger fra forskellige kilder. På grund af den relativt lange responstid er dette i øjeblikket en tidskrævende proces, hvor prøverne først skal indsamles manuelt og derefter sendes til analyse i et laboratorium.

Dette projekt har til formål at udvikle en effektiv løsning til automatisk indsamling af grund- og overfladevand, analyse og datalagring. Det vil gøre det muligt for myndigheder, forsyningsselskaber og/eller virksomheder at gribe ind over for forurening, og at afværge risikoer før, under og efter en forurening sker. Projektideen er at udvikle og implementere en kompakt og automatiseret opsamlings- og måleenhed, der ved hjælp af en ny generation af kommercielle sensorer kan måle indholdet af udvalgte PFAS i de indsamlede vandprøver.

## Metoder (fra ansøgning)

Projektets mål opnås ved at integrere kompetencer inden for mikrofluidik, maskin- og software, fotonisk sensing og analytisk kemi og ved at bringe akademiske og industrielle partnere om bord. De udviklede enheder kan placeres i/ved udvalgte vandboringer, søer og vandløb, og kan automatisk udtage og måle vandprøver. Prøveindsamlingsenheden er baseret på en innovativ '**Digital Mikrofluid (DMF)**' prøveudtagningsplatform, der bruger almindelige printkort-elektroder og computerstyret 'elektrowetting' til at bevæge, udtage og opbevare dråbebaserede vandprøver (nanoliter). Denne platform bliver kombineret med en kommerciel **nanofotonisk krystal** (FK) til

yderst præcis måling af brydningsindeks, som leveres af CPHNano. Denne løsning inkluderer også cloud-baseret datalagring og AI-drevet dataanalyse.

## Planlægning og Bemanding

2 studentermedhjælpere blev ansat 01.02.2024 som planlagt, efter individuelle samtaler og med input fra andre kollegaer og undervisere. Disse to var Zuzanna og Felix som blev præsenteret til første møde med Region Syddanmark (RS). Per 01.09.2024 overtog en anden studerende (Leon) for Felix.

Nedenfor ses den oprindelige plan for projektet, som blev fulgt bedst muligt undervejs som en guideline. Planen indeholder en række delmål (DM) og møder (M) mellem RS og projektparterne.

| Projekt trin / Måned   | Jan | Feb | Mar | Apr | Maj  | Juni | Juli | Aug  | Sep | Okt | Nov | Dec |
|------------------------|-----|-----|-----|-----|------|------|------|------|-----|-----|-----|-----|
| 1. Prøvetagning        |     | DM1 |     |     |      |      |      |      |     |     |     |     |
| 2. Automatisering      |     |     | DM2 |     |      |      |      |      |     |     |     |     |
| 3. Væskekontrol        |     |     |     |     |      |      |      |      |     |     |     |     |
| 4. Fuld prøveudtagning |     |     |     |     | Mål1 |      |      |      |     |     |     |     |
| 5. Sensor integration  |     |     |     | DM3 |      |      |      |      |     |     |     |     |
| 6. Laboratorie test    |     |     |     |     |      | DM4  |      |      |     |     |     |     |
| 7. Test af PFAS        |     |     |     |     |      |      |      | Mål2 |     |     |     |     |
| 8. Test i felt         |     |     |     |     |      |      |      |      |     | DM5 |     |     |
| 9. Evaluering          |     | M1  |     | M2  |      | M3   |      |      | M4  |     |     | M5  |

Tabel 1 Gantt chart projektplanlægning

Selvom visse trin og delmål var afhængige af andre, blev en parallel proces alligevel sat i gang så hver studerende kunne fokusere på ét område, mens den projektansvarlige (Casper Kunstmann – CK) stod for litteratur-studier og analyse af resultater. Der blev også under projektet givet støtte og vejledning af diverse kollegaer i Nanophotonics grupper ved Mads Clausen Institutet, SDU Sønderborg, samt løbende dialog med projektpartnere og RS.

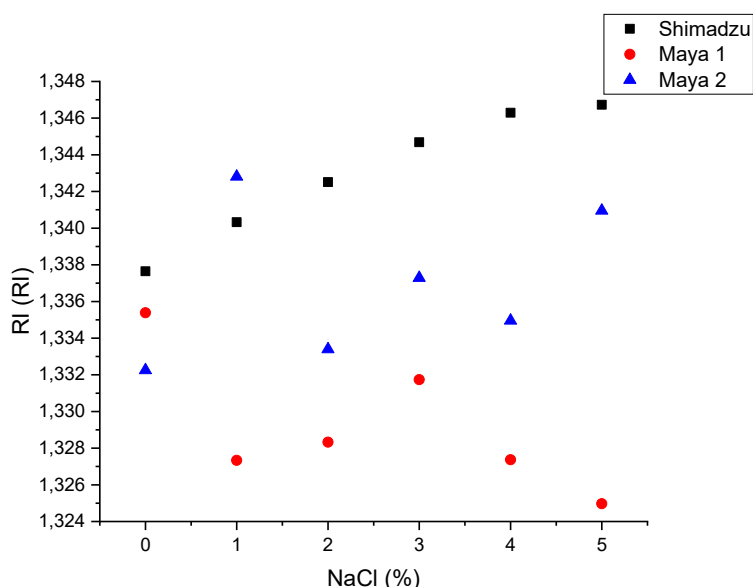
## Gennemførte metoder

### Metode evaluering

De første par måneder blev således brugt på intens litteraturanalyse for at identificere kompatible metoder, der er i stand til at påvise tilstedeværelsen af PFAS i relevante koncentrationer. Indledningsvis var der fokus på alle PFAS, men efter diskussion med RS blev det besluttet at fokusere på PFOA, siden dette stof er præsenteret ofte i den videnskabelige litteratur og ofte bliver brugt som et model-stof. På dette første fælles møde (M1), blev de forskellige metoder præsenteret og diskuteret, og en række optiske metoder blev udvalgt til nærmere efterprøvning, materialer bestilt hjem og forsøg planlagt med de studerende. De valgte metoder blev løbende evalueret, diskuteret på opfølgende møder og nye metoder identificeret og testet løbende. Se afsnit nedenfor for individuelle resultater.

Indledende forsøg blev planlagt for at afgøre om CPHNano's teknologi til måling af brydningsindeks (RI) er tilpas robust og præcis nok til at benytte til måling af små mængder PFOA. Figur 1 viser et test-setup, som bruger et mikroskop samt en optisk fiber til opsamling af lys til et spektrometer. En flowchip i silikone blev designet og fremstillet til at integrere de fotoniske krystaller i et kanal-system således ændringer i brydningsindeks kan måles løbende. Saltvandsopløsninger af forskellig styrke (op til 5%) blev testet med på både et større "benchtop" spektrometer (Shimadzu i1900) og et mindre

portabelt USB-spektrometer (Ocean Optics *Maya*), kombineret med en række forskellige lyskilder (data ikke vist her). Endelig blev en række individuelle cuvetter med nanofotoniske krystaller testet for at undersøge gentageligheden af målingerne (data ikke vist her).



Figur 1: Venstre: Test setup til CPHNano's FK med optisk mikroskop, lyskilde og fiber til spektrometer (ikke vist). Højre: Eksempel på data fra 2 spektrometre (Shimadzu og Maya) der viser sammenhæng mellem brydningsindeks (RI) og koncentration af saltvandsopløsning (% NaCl).

Diverse tests (såsom figur 1 *højre*) viste desværre, at der var betydelig variation i henhold til aflæsning af RI for både spektrometre og forskellige fotoniske krystaller for målinger på identiske prøver. Dette gjorde det svært at retfærdiggøre videre brug af den specifikke teknologi, så det blev besluttet at undersøge den videnskabelige litteratur efter alternative metoder.

Parallelt med AutoSPAN kørte der de første 5 måneder et bachelorprojekt hvor vi undersøgte muligheden for brug af Raman-spektroskopi til, bl.a. at identificere PFAS. Dette mandede ud i et Clean Cluster *Vidensbro II projekt*, sammen med Watercare Guard (en lokal virksomhed). Projektet prøvede at afdække muligheden for at bruge overfladeforstærket Raman (SERS) til at påvise små koncentrationer af PFOA i vand. (Resultater ses i afsnittet "Raman (og SERS) - Clean Cluster Vidensbro projekt").

### Automatisk analyse-enhed

At undgå manuel prøveopsamling og behandling var oprindeligt en stor del af projektet, og vi besluttede derfor at besøge Vandcenter Syd i Odense for at få bedre indsigt i, hvordan nuværende opsamling og måling foregår. Som en del af dette besøgte vi rensningsanlægget ved Odense Nordvest, hvor det rensede vand bliver ledt ud i Odense Å. Det er nødvendigt at tage en række målinger af åen både inden og efter udledning for at sikre at rensningen af spildevandet overholder



gældende regler. Dette gøres via to permanente målestationer, som automatisk pumper vand fra åen via en bølge, ind til stationen, hvor optisk analyse udføres (se figur 2).

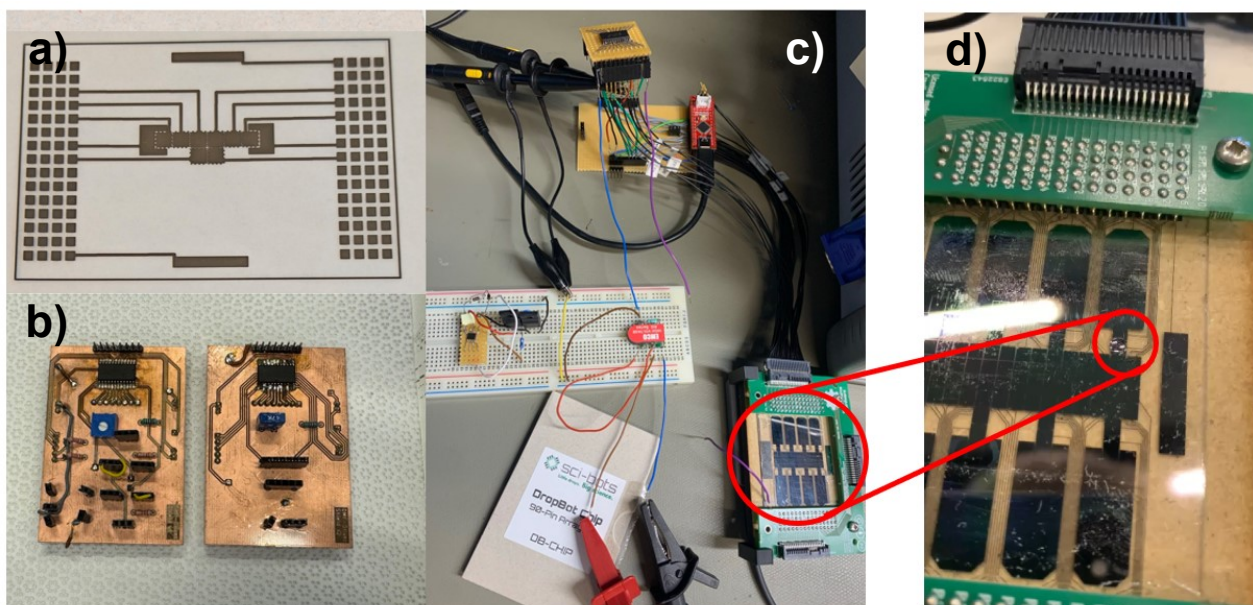


Figur 2. Besøg ved Nordvest rensningsanlæg ved Odense Å sammen med VandCenter Syd, a) pumpestation og b) medhørende måleskab, c) Open-Source peristaltisk pumpe baseret på FAST, brugt til test af vandopsamling og d) Prøvedeponering på printkort-elektroder direkte fra pumpen.

Det blev således afklaret under besøget, at det ville være muligt for projektet at koble sig direkte på dette system og dermed få adgang til det opsamlede vand via det allerede eksisterende system (figur 2a+b). Således kunne fokus skiftes over på hvordan disse vandprøver kan manipuleres via den elektriske chip så forskellige kemikalier osv. kan tilføres. For at teste integrationen med Vandcenter Syd's pumpesystem, blev en simpelt peristaltisk pumpe ([FAST](#), udviklet på DTU) bygget, igen baseret på et open-sourcedesign (se figur 2c). Ved hjælp af dette system kan vandprøver pumpes direkte fra en beholder og vanddråber placeres på chippen (figur 2d).

For at bygge en simpel enkeltstående enhed, tog vi udgangspunkt i et [DropBot](#), som er et open-source DMF-system udviklet af en samarbejdspartner i Canada. Vi har således fuld adgang til tekniske detaljer, elektriske diagrammer osv. Ud fra disse specifikationer blev et simpelt dråbehåndterings-system designet, bygget og testet ved SDU (se figur 3). Kort fortalt er systemet i stand til at deponere dråber (7 mikroliter) på printkort-elektroderne, og deres bevægelsesmønster kan styres enten via en PC, eller i dette tilfælde, være forprogrammeret direkte i en mikrokontroller. Dette gør det muligt at manipulere meget små væskeprøver og således blande vandprøven med

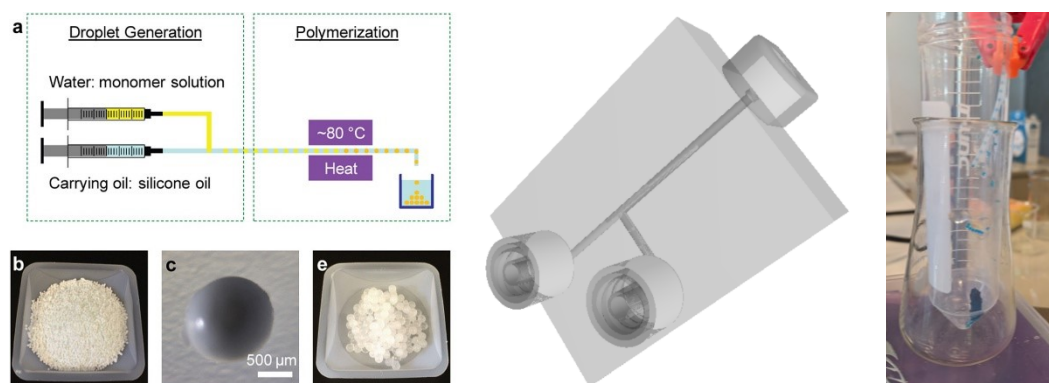
indikatorer væske, reagenser og lignende, som fx bruges i afsnittet om optiske målinger. Systemet vil også være i stand til at levere den håndterede (og behandlede) prøve videre ved en anden slange og pumpe til andre analysemetoder hvis dette er nødvendigt.



Figur 3. a) Elektrode-struktur printet direkte på plastik-film med blæk-printer b) Test printkort designet og samlet i AutoSpan c) Komplet test-setup til generation af højspændingssignaler og forbindelse til printkort- elektroder (rød cirkel) d) Succesfuld dråbe-aktivering på printkort elektroder (rød cirkel).

## Opkoncentrering af PFOA

Da PFAS forekommer i meget små koncentrationer i miljøet, og grænseværdier i vand måles i ng/l, var der fra starten af projektet fokus på at undersøge forskellige metoder til at opkoncentrere disse kemikalier, så målinger lettere kunne udføres på de opsamlede prøver. Vi fik inspiration fra en kollega i Canada som bruger små polymer-partikler ("vandperler") til opsamling af [tungmetaller](#). Baseret på en [videnskabelig artikel](#), blev kemikalier indkøbt og et enkelt setup opsat til fabrikation af små polyakrylat vandperler (se figur 4 venstre). Ved brug af 2 sprøjtepumper og en simpel 3D printet chip med en T-formet kanal kan blanding af to faser styres og størrelse kontrolleres (se figur 4).

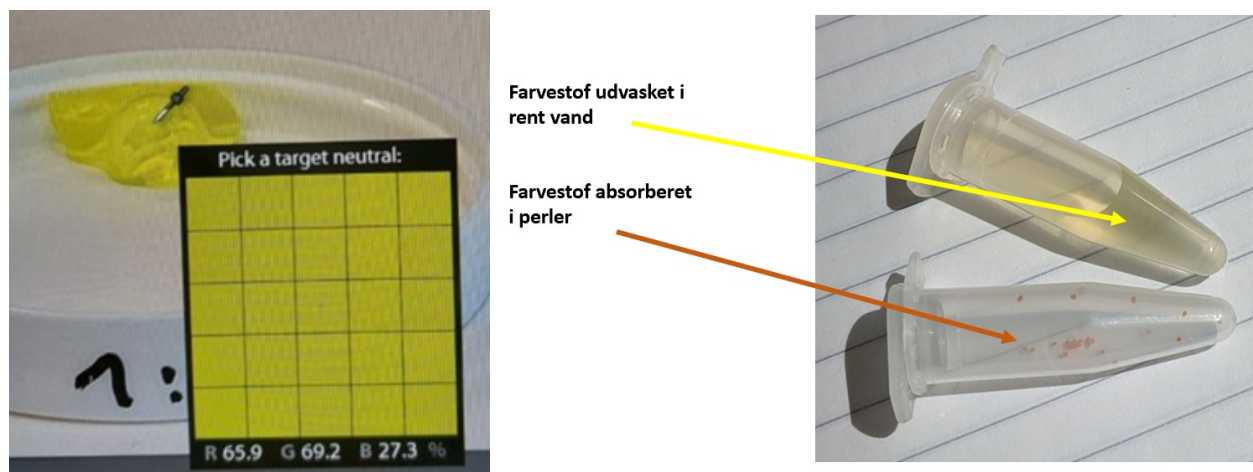


Figur 4: Venstre: Fra artikel, Midt: CAD tegning af T-formet chip. Højre: vandperler farvet med blå farve i SDU's lab.

For at karakterisere absorptionsevnen af vandperlerne, testes de med et stærkt gult farvestof *uranin* ved gentagne gange at absorbere farveopløsning og tørre perlerne. Farven noteres (se figur 5) og det kan konstateres at perlerne kan akkumulere farvestoffet ved gentagne eksponeringer. Endelig

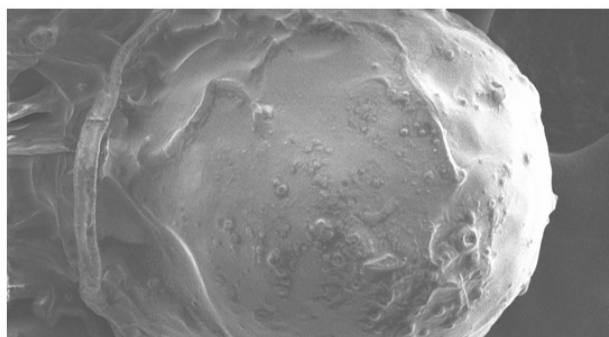
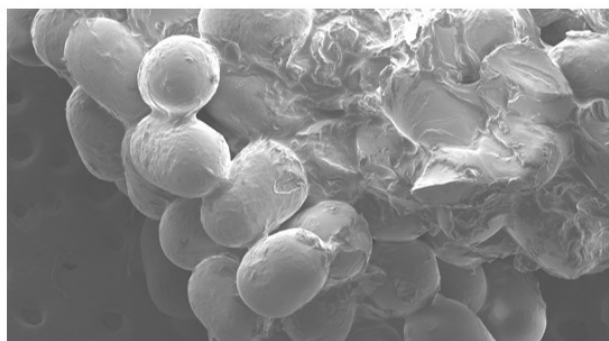


har vi også vist at farvestoffet kan udvaskes igen i rent vand (figur 5 *højre*), så den akkumulerede farve kan måles i opløsning. Begge resultater er meget lovende idet denne metode kan benyttes til at opsamle PFAS fra vandprøver og "udvaske" dem igen når målinger skal foretages. Disse vandperler kan potentielt kombineres med opsamling direkte i mikrokanaler forbundet med DMF printkort-elektroderne.



Figur 5: Venstre: Billede af vandperle med farvestof samt målte RGB (Red-Green-Blue) værdier. Højre: vandperler der har absorberet gult farvestof, samt perler der har frigivet farvestof i rent vand.

Endelig har vi også testet perlerne evne til at akkumulere mindre molekyler eller atomer, ved at bruge elementær-analyse (EDX) via vores elektronmikroskop (SEM) (se figur 6). Ved at putte perlerne i både postevand og destilleret vand, kan vi se at fx siliciumindholdet (fra kalken) stiger fra omkring 3% til 8% (figur 6 *højre*) samt at de skifter farve fra gennemsigtige til hvide.



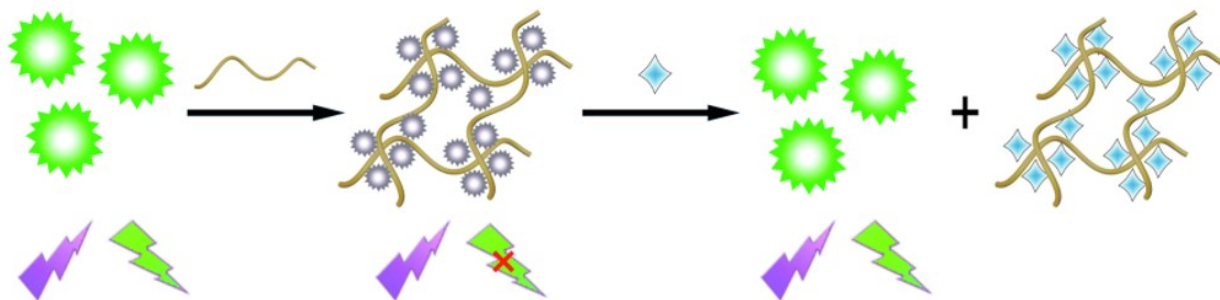
| Element   | Series   | unn. C<br>[wt.%] | norm. C<br>[wt.%] | Atom. C<br>[at.%] |
|-----------|----------|------------------|-------------------|-------------------|
| Carbon    | K-series | 21.28            | 42.17             | 54.98             |
| Oxygen    | K-series | 18.70            | 37.06             | 36.27             |
| Aluminium | K-series | 0.14             | 0.27              | 0.16              |
| Silicon   | K-series | 7.32             | 14.50             | 8.09              |
| Potassium | K-series | 0.04             | 0.09              | 0.04              |
| Palladium | L-series | 0.02             | 0.05              | 0.01              |
| Platinum  | L-series | 2.96             | 5.86              | 0.47              |
| Total:    |          | 50.46            | 100.00            | 100.00            |

| Element   | Series   | unn. C<br>[wt.%] | norm. C<br>[wt.%] | Atom. C<br>[at.%] |
|-----------|----------|------------------|-------------------|-------------------|
| Oxygen    | K-series | 12.62            | 38.23             | 49.86             |
| Aluminium | K-series | 2.13             | 6.46              | 5.00              |
| Silicon   | K-series | 1.32             | 4.00              | 2.97              |
| Calcium   | K-series | 0.34             | 1.04              | 0.54              |
| Platinum  | L-series | 8.49             | 25.72             | 2.75              |
| Palladium | L-series | 0.00             | 0.00              | 0.00              |
| Copper    | K-series | 0.88             | 2.68              | 0.88              |
| Carbon    | K-series | 7.22             | 21.87             | 38.00             |
| Total:    |          | 33.02            | 100.00            | 100.00            |

Figur 6: Venstre: Elektronmikroskop billede af vandperler under 40x til 100x forstørrelse. Højre: Indhold af enkelte grundstoffer i vandperlerne målt via EDX. Værdier for silicium indhold (fra kalk) for postevand (rød) og destilleret vand (grøn).

## Optiske målinger

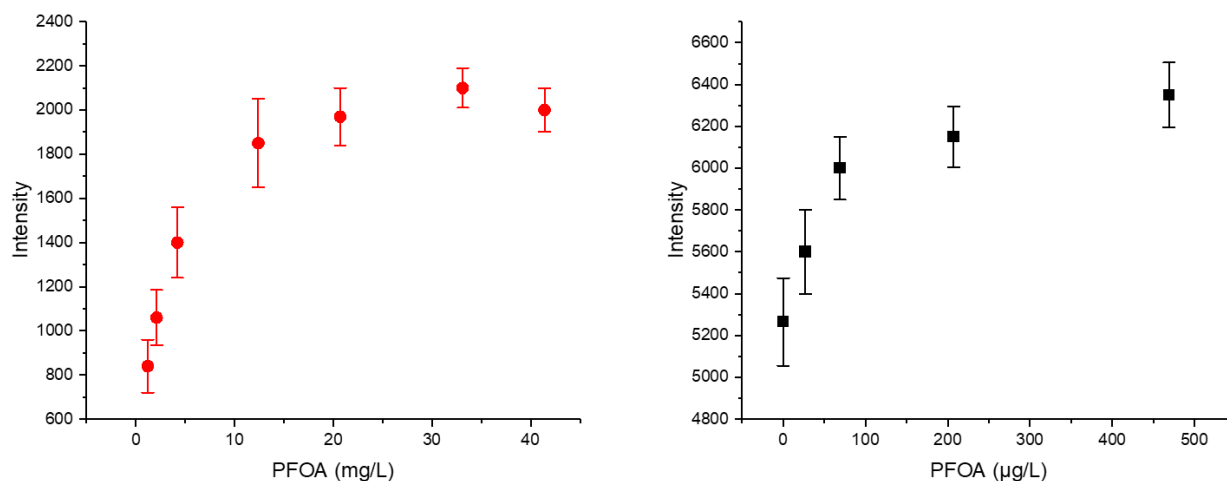
Efter grundige litteratur-undersøgelser blev en mulig metode identificeret til at måle mængden af PFOA, ved hjælp af *quenching* (eller "slukning") af fluorescens. Et farvestof blandes med et detergent (CTAB). CTAB vikler sig omkring farvestof-molekylet og dermed reduceres farvestof-molekylets evne til at udsende lys under belysning med en laser (dvs. fluorescens). Hvis en vandprøve indeholdende PFOA blandes med farvestof/CTAB-opløsningen, vil CTAB vikle sig omkring PFOA i stedet, og farvestoffet er dermed i stand til at udsende mere lys (se figur 7). I løbet af projektet har vi påvist en sammenhæng mellem mængden af udsendt lys og koncentration af PFOA.



Figur 7: Top: Skematisk illustration af reaktionen mellem farvestoffet (grønne og grå ringe) og CTAB (gule streger) som slukker fluorescensen (grønne lyn) i farvestoffet, samt tilføjelsen af PFOA (blå diamant), som binder til CTAB og frigiver farvestoffet. Lilla lyn er belysning af blandingerne. Bund: Måleopstilling med spektrometer (Maya), koblet til kyvetten med en optisk fiber (blå), som indeholder den kemiske opløsning (se orange cirkel), som bliver lyst op af laserens.

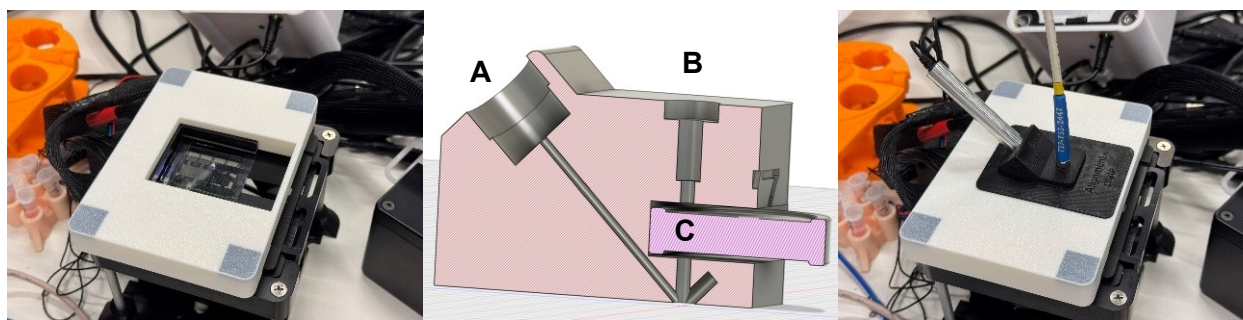
Et simpelt setup blev konstrueret, hvor en opløsning i en glaskyvte belyses med en laser-diode, og det udsendte lys opsamles vinkelret på glaskyvten (for at forhindre forstyrrelser fra laserens). Ved hjælp af et lille USB-spektrometer kan mængden af lys måles baseret på et *Python* script udviklet under projektet. Hele processen tager under én time at udføre og kræver kun 2ml vandprøve samt mindre mængder af regenser. Figur 8 viser resultater opnået indtil videre, hvor laveste koncentration der kan måles med sikkerhed (ingen overlap med usikkerheden for nul koncentration) er 69 ug/L PFOA i rent vand.





Figur 8. Resultat er prøverne som viser lysintensitet som funktion af PFOA-koncentration for høje koncentrationer (venstre) og lave koncentrationer (højre). Usikkerhederne er standard afvigelse for mindst 3 målinger per datasæt.

Næste skridt er nu at integrere de optiske målinger på den digital print-elektrode platform, noget som i første omgang testes på vores kommercielle *DropBot* system (figur 9 venstre). Vi har således i AutoSPAN designet en optiske enhed (Figur 9 midt) med laser-holder (A), optisk fiber kobler (B), samt plads til et optisk filter (C), som fjerner spredt laserlys. Denne enhed gør det nu muligt at foretage målinger direkte på en dråbe-position på chippen. Arbejdet med at optimere integration og teste fluorescensmetoden med PFOA, er blevet videreført i 2025 i et bachelor-projekt som forventes afsluttet sommer 2025. Dette projekt vil også arbejde på at bringe detektionsgrænsen længere ned (til ng/L) ved at optimere kemi samt optiske komponenter.

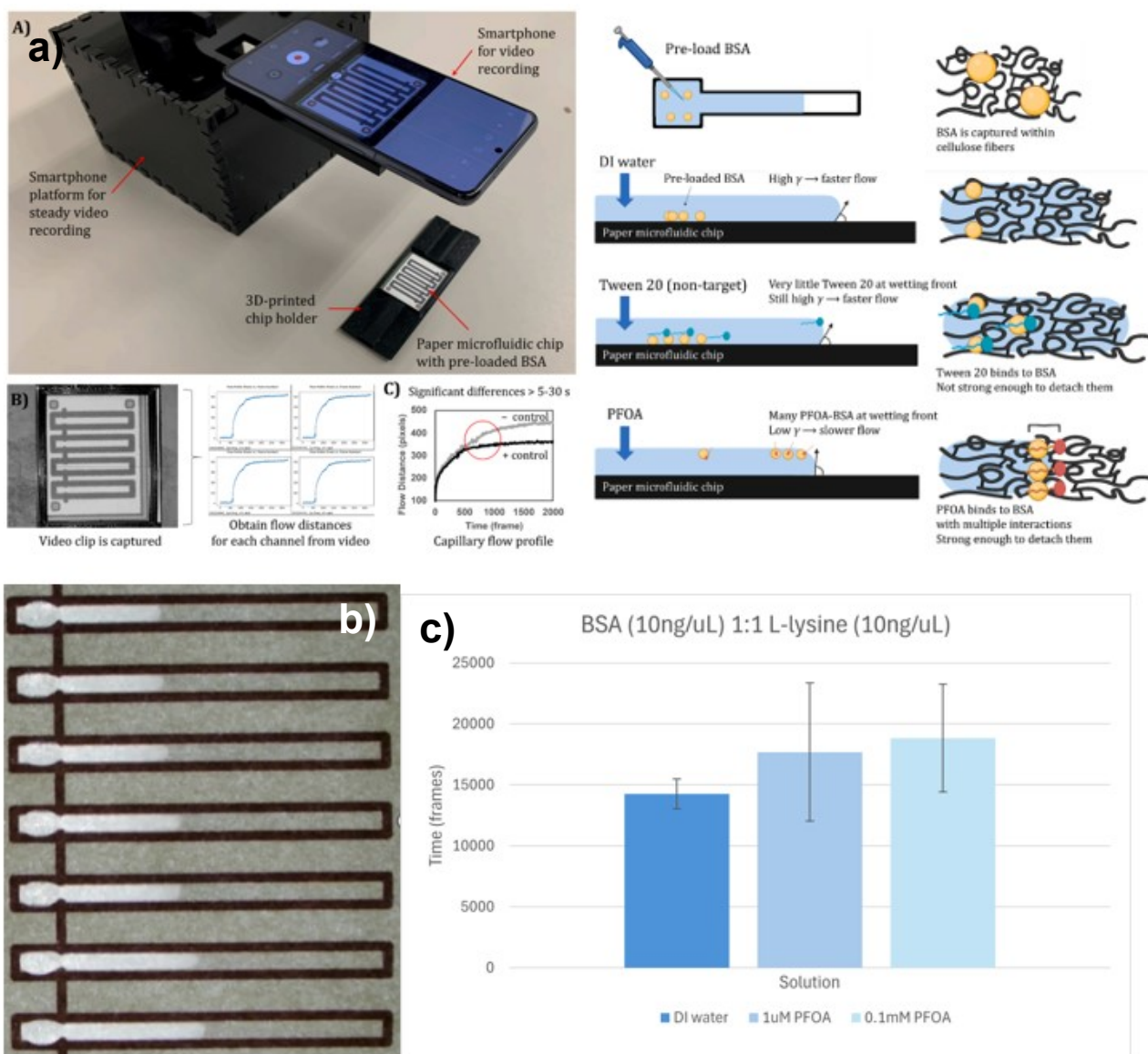


Figur 9. DropBot i åben tilstand visende metal-elektroderne. Midt: skematisk snit af den optiske holder med hul til laser (A), tilslutning til optisk fiber (B), samt plads til optisk filter (C). Højre: DropBot med 3D printet optisk holder med laser og optisk fiber indsat.

### Lateral Flow Device papir-tests (LFD).

Som led i AutoSpan blev alternative metoder til måling af PFAS også testet. En [lovende metode](#) baseret på LFD-teknologi blev identificeret tidligt i forløbet, og simpelheden i både prøve-forberedelse og aflæsning gjorde det værd at undersøge nærmere. Ved at "lade" en simpel LFD (lateral-flow- device) papir-chip med forskellige proteiner (såsom *albumin* (BSA) og *lysin*) kan man forsinke flowet af en vand-opløsning indeholdende PFOA (figur 10, top). Kanaler på papiret er defineret ved at printe på kromatografi-papir med en almindelig printer og "bage" papiret således at blækket trænger igennem til bagsiden (figur 10, venstre). Endelig kan man ved hjælp af kameraet på en mobiltelefon aflæse hastigheden af vandprøven gennem kanalen og dermed korrelere

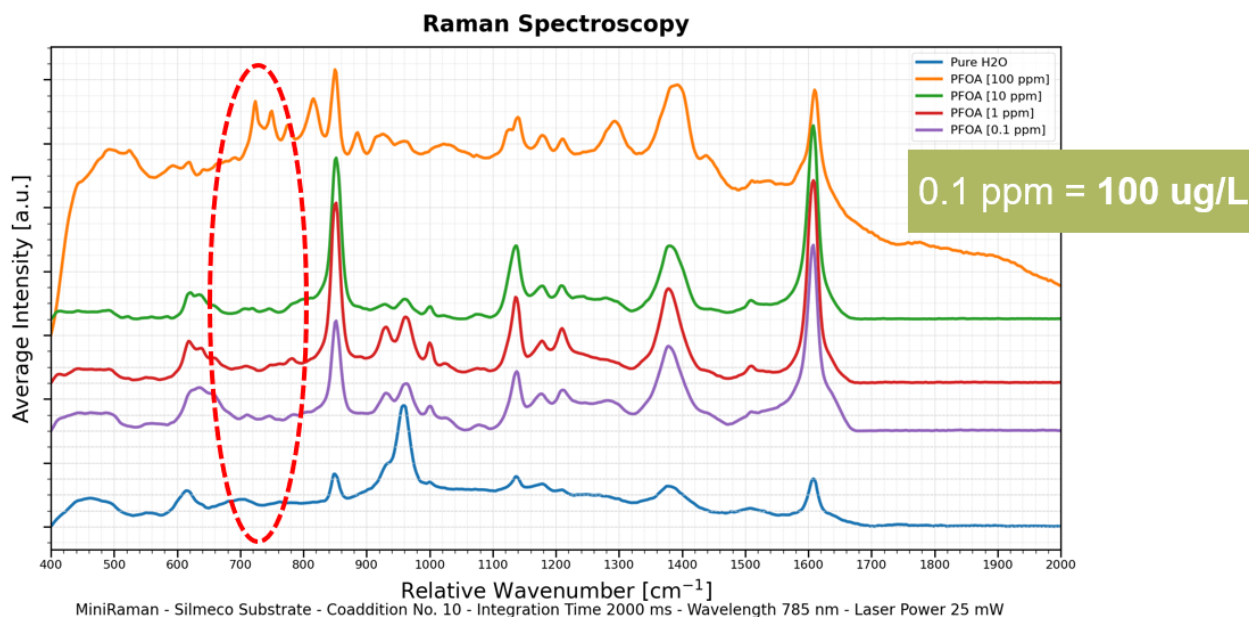
hastigheden til indholdet af PFOA (figur 10 *højre*). Metoden blev testet ned til 1  $\mu\text{M}$  (400 ppb eller  $\mu\text{g/L}$ ) PFOA, men yderligere optimering blev ikke undersøgt da andre metoder viste bedre resultater i forhold til lavere mængder.



Figur 10: a) Fra [kildeartikel](#), aflæsning af LFD papir-chip med mobil kamera, samt grundlæggende princip for aflæsning, baseret på forskellige flow-hastigheder afhængig af PFOA og protein-indhold. b) Aflæsning med mobilkamera fra AutoSpan tests, hvide linjer indikerer hurtigere flow. c) Hastighed (tid til fuldende LFD strippen) som funktion af PFOA indehold i en strip ladet med proteiner (BSA og lysin).

## Raman (og SERS) - Clean Cluster Vidensbro projekt

Parallelt med AutoSpan deltog SDU i et mindre projekt finansieret gennem Clean Cluster Danmark, et såkaldt *Vidensbro* projekt, hvor formålet var at undersøge, om man kunne bruge Raman spektroskopi til at identificere PFAS (PFOA) i vandprøver. Her blev både almindeligt spektroskopi testet, samt såkaldt SERS (*surface-enhanced Raman spectroscopy*) som benytter nanostrukturerede overflader til at fremme signaler fra de meget små mængder PFOA der er til stede i prøven (se figur 11).



Figur 11: Raman spektre fra vandprøver indeholdende forskellige mængder PFOA (ned til 0.1 ppm). De karakteristiske peaks omkring 725 cm<sup>-1</sup> er identificerbare ned til laveste koncentration (lilla kurve), men ses ikke i rent vand (blå kurve).

Tests blev udført af en studenter-medhjælper ansat på projektet, og her blev både en række kommercielle SERS-overflader testet, sammen med en række forskellige Raman-spektrometre og mikroskoper. De bedste resultater opnåede målinger af koncentrationer ned til 100 ug/L. Projektet kørte kun over en relativt kort periode (4 måneder), men de positive resultater var en stor faktor i forhold til projektets videre forløb, samt forsættelsen af arbejdet i *AutoSERS*, som nu skal udføres som næste udviklingsprojekt i SUP regi sammen med Region Syddanmark i 2025.

## Opsummerende konklusion

Dette projekt havde til formål at udvikle et system der er i stand til automatisk opsamling af vandprøver for derefter at udføre sporing og analyse af organo-kemisk forurening (PFAS). I den oprindelige ansøgning antog vi følgende omkring usikkerhed i forhold til gennemførelsen af projektet:

*Selve prøveopsamlingen er forbundet med forholdsvis små usikkerheder, da den er baseret på eksisterende teknologi som "blot" skal tilpasses. Det samme gælder selve målemetoden (brydningsindeks) som er udviklet af CPHNano. De største usikkerheder kommer fra, hvilken kemi vi skal bruge til at identificere PFAS, præcis hvilke polyfluorerede alkylstoffer vi vil gå efter, og hvor specifikke vi kan være. Vi har en række ideer og backup i forhold til andre lignende teknologier, især indenfor spektroskopi hvor vi har adgang til fx Raman.*

Visse antagelser har holdt stik, mens andre aspekter var sværere at forudse. Det viste sig desværre tidligt i projektet at målemetoden baseret på CPH Nano's teknologi ikke var følsom eller stabil nok til at kunne bruges til det tiltænkte formål. Dette er især set i forhold til at kvalitetskriteriet for grundvand og overfladevand er nede på ng/L. Som følge af denne erkendelse blev det derfor valgt at undersøge alternative metoder til detektion af PFOA, og en række alternative metoder blev identificeret og testet.

I forhold til automatisk prøvehåndtering og vandopsamling, viste dette sig at være forholdsvis ligetil idet VandCenter Syd i visse lokationer allerede har prøveudtagnings-stationer placeret hvor en udviklet løsning kan kobles direkte på. Det blev derfor besluttet at flytte fokus til selve målemetoderne, selvom arbejdet med at udvikle specifikke løsninger til automatisk prøveudtagning



stadig fortsatte sideløbende. Nedenstående oversigt (figur 11) fra den oprindelige projektansøgning, blev præsenteret på sidste møde med alle projektpartnere i december 2024. Tabellen opsummerer hvorvidt alle delmål er blevet opfyldt.

| Projekt trin / Måned   | Jan | Feb | Mar | Apr | Maj  | Juni | Juli | Aug  | Sep | Okt | Nov | Dec |   |
|------------------------|-----|-----|-----|-----|------|------|------|------|-----|-----|-----|-----|---|
| 1. Prøvetagning        |     | DM1 |     |     |      |      |      |      |     |     |     |     | ✗ |
| 2. Automatisering      |     |     | DM2 |     |      |      |      |      |     |     |     |     | ✓ |
| 3. Væskekontrol        |     |     |     |     |      |      |      |      |     |     |     |     | ✓ |
| 4. Fuld prøveudtagning |     |     |     |     | Mål1 |      |      |      |     |     |     |     | ✗ |
| 5. Sensor integration  |     |     |     | DM3 |      |      |      |      |     |     |     |     | ✓ |
| 6. Laboratorie test    |     |     |     |     |      | DM4  |      |      |     |     |     |     | ✓ |
| 7. Test af PFAS        |     |     |     |     |      |      |      | Mål2 |     |     |     |     | ✓ |
| 8. Test i felt         |     |     |     |     |      |      |      |      |     | DM5 |     |     | ✗ |
| 9. Evaluering          |     | M1  |     | M2  |      | M3   |      |      | M4  |     |     | M5  |   |

2025

- Færdiggøre fluorescens forsøg - nedre detektionsgrænse?
- Implementering DropBot - videnskabelig artikel
- Papir microfluidics - fortsæt som studenterprojekter
- Raman og SERS – Fortsætter i AutoSERS
- Rapport for AutoSpan i februar/marts

Figur 11: Oversigt over tidsplan for AutoSpan med alle delmål (DM) markeret, samt indikatorer for om disse blev helt eller delvist opnået (grønt flueben) eller ej (rødt kryds).

Gennem projektet er der opnået væsentlig viden om muligheder og begrænsninger ved eksisterende og nye metoder til detektion af PFAS. Det oprindelige mål om at udvikle en fuldt integreret, feltklar måleenhed, der løbende kan udtage og analysere prøver i realtid, er ikke opfyldt, men der er opnået delresultater, som danner et solidt grundlag for videreudvikling. De væsentligste tekniske resultater kan opsummeres som følger:

- **Automatisk prøvehåndtering:** Det er lykkedes at demonstrere en velfungerende prototype til elektrisk dråbebehandling baseret på DMF-plattformen, integreret med peristaltisk pumpe og mikrokontroller. Systemet muliggør præcis dosering og manipulation af små væskevolumener.
- **Sensorudvikling:** Den oprindeligt planlagte optiske målemetode baseret på fotoniske krystaller viste sig at have for lav følsomhed og for høj variabilitet til at kunne anvendes ved de ønskede koncentrationer (ng/L-niveau).
- **Fluorescens-quenching:** En kemisk metode baseret på quenching af farvestof blev udviklet og testet. Metoden viste målbar respons ned til ~70 µg/L PFOA og er vurderet som den mest lovende til videreudvikling.
- **Opkoncentration:** Et simpelt og potentielt skalerbart princip baseret på hydrofile polymerperler til opkoncentration af små molekyler blev undersøgt. Resultaterne viser, at metoden kan akkumulere og efterfølgende frigive modelstoffer, men effekt for PFAS er endnu ikke kvantificeret.
- **Lateral Flow Devices:** Simpelt papirbaseret testsystem blev afprøvet og viste funktionsdygtighed, men følsomheden og muligheden for integration i en automatisk platform vurderes som begrænset.
- **Raman og SERS:** Der er opnået lovende resultater med SERS til detektion af PFOA ned til ~100 µg/L. Dette arbejde videreføres i det kommende AutoSERS-projekt.

Samlet set har projektet bidraget med nye indsigter i udvikling af miniaturiserede og automatiserede analyseteknologier til brug i PFAS-overvågning. Arbejdet har afdækket centrale udfordringer og styrket grundlaget for fremtidige teknologiske løsninger.

## Perspektivering

Projektet har ikke resulteret i en færdigudviklet måleenhed, der kan placeres i en boring eller et vandløb og løbende sende online-data om PFAS-koncentrationer til brugeren. Det oprindelige mål om en fuldt integreret og felt-deployérbar løsning er således ikke opnået inden for projektperioden, men projektet har alligevel bidraget med væsentlig ny viden, teknologisk afprøvning og identificering af videreudviklingsspor, som bringer os betydeligt nærmere målet. Der er både arbejdet med selve prøvetagningen og med detektionsdelen, og resultaterne herfra viser klart, hvilke teknologier der med fordel kan følges i fremtidige projekter, herunder i det planlagte/igangværende AutoSERS.

Automatiseringen af prøvetagning blev delvist imødekommet ved integration med eksisterende pumpesystemer, og den udviklede DMF-baserede dråbehåndteringsenhed har vist sig funktionel og fleksibel i laboratorieopstilling. En feltklar version af denne komponent er endnu ikke realiseret, men princippet er demonstreret, og der er etableret erfaringer med open-source løsninger, der kan videreudvikles. Det vurderes derfor som realistisk, at en komplet automatiseret prøveopsamlingsenhed kan udvikles i en efterfølgende projektfase.

På detektionssiden har projektet afsøgt flere forskellige teknologisor. Den oprindelige sensorløsning baseret på måling af brydningsindeks viste sig uegnet pga. utilstrækkelig følsomhed og for høj variabilitet, og blev derfor fravalgt tidligt i forløbet. Til gengæld har forsøg med fluorescens-quenching givet meget lovende resultater med målelige ændringer i signalet som funktion af PFOA-koncentration. Metoden har foreløbig en detektionsgrænse omkring 70 µg/L og er dermed ikke tilstrækkelig følsom i forhold til myndighedskrav, men det vurderes, at detektionsgrænsen kan nedbringes betydeligt med optimering af både kemi og optisk opstilling. Denne metode anses derfor som den mest lovende i forhold til at realisere en feltklar løsning.

Endelig har Raman-spektroskopi, herunder særligt SERS, i et sideløbende forløb vist evne til at detektere PFOA ved forholdsvist lave koncentrationer (~100 µg/L). Dette er dog ikke nok til at imødegå de lave grænseværdier, men teknologien har teoretisk potentiale til ng/L-niveau. Udfordringen er her robusthed og replikérbarhed, særligt i miljøprøver med varierende sammensætning. Teknologien vurderes dog stadig som relevant at arbejde videre med, og er derfor inkluderet i det kommende AutoSERS-projekt, som vil adressere netop disse udfordringer.

Et centralt delmål var muligheden for opkoncentration af PFAS i prøverne. Her blev der udviklet og testet polymerperler, som viste evne til både at akkumulere og frigive modelstoffer. Dette princip er interessant og vurderes at have potentiale – særligt som forbehandlingsteknologi – men kræver supplerende dokumentation og validering i forhold til reelle PFAS-forbindelser. Metoden er dog kompatibel med DMF-plattformen og kan integreres i et fremtidigt målesystem.

På tværs af delteknologier og testforløb er det samlede billede, at projektet har frembragt flere delkomponenter, som – hver for sig og i samspil – peger frem mod en feltklar måleenhed. Det næste logiske skridt er at videreføre arbejdet i en fokuseret projektfase med mål om at integrere de mest lovende teknologier (primært fluorescens og SERS) i en robust prototype og afprøve denne under feltforhold. Endelig vurderes det, at flere af teknologierne – særligt automatiseret dråbehåndtering og fluorescensdetektion – allerede nu kan anvendes i laboratorieopsætninger, fx til screening eller som undervisningsværktøj, og dermed bidrager til teknologisk modenhed og kompetenceopbygning.