

Carbon S SPE と LC/MS/MS による 土壌中のペルフルオロアルキル化合物 およびポリフルオロアルキル化合物の測定

著者

Matthew Giardina, Ph.D.
Agilent Technologies, Inc.

概要

このアプリケーションノートでは、土壌中のペルフルオロアルキルおよびポリフルオロアルキル化合物 (PFAS) の分析で使用する多成分分析メソッドの開発と評価について説明します。このメソッドは、基本的なメタノール抽出とその後の Agilent Bond Elut Carbon S 固相抽出 (SPE) カートリッジを使用したパススルーマトリックス除去ステップ、および LC/MS/MS による定量分析で構成されています。試験した 59 種類の PFAS では、低スパイク濃度 (0.625 ng/g) での平均回収率が 99.9 % であり、相対標準偏差は 13.5 % でした。土壌マトリックスに応じて Agilent Bond Elut Carbon S カートリッジを使用することにより、PFBA のような初期に溶出する化合物の分離ピーク形状とリテンションを改善できます。

はじめに

土壌は、有機および無機化合物の複雑な混合物です。¹ これらの有機化合物の多くは、抽出プロセス時にターゲット化合物とともに有機溶媒に共溶出します。これらの共溶出物を十分に除去しない場合、抽出物を直接注入すると、分析時に LC/MS/MS でのマトリックスによるイオン抑制または促進、サンプル流路および MS イオン源でのマトリックス堆積物の蓄積など、複数のマトリックス効果を引き起こすことがあります。そのため、ターゲット化合物の回収率に影響を与えないように、機器による分析の前にマトリックス共溶出物を除去するためのクリーンアップステップを実施することが重要です。

グラファイトカーボンブラック (GCB) は、色素やその他のマトリックス干渉物を効率的に除去するために、サンプル前処理で広く使用されています。ただし、GCB を使用すると、一部の成分が損失する可能性があります。Carbon S は、炭素の含有量が最適化された、ポア構造を持つ高度なハイブリッドの炭素材です。Carbon S は GCB と比較して、サンプルマトリックスから色素を同等またはより適切に除去すると同時に、一部の GCB 選択性のある成分（平面構造を持つ農薬など）の回収率を大幅に向上させます。結果として、Carbon S 充填剤は従来の GCB 充填剤と比較して、分析対象物の回収率とマトリックス除去の効率の間のバランスをより適切に保っています。² Carbon S 充填剤は、GCB SPE と同じ充填剤量で同じ SPE カートリッジ形式で使用されます。Carbon S SPE カートリッジは、SPE 手法が使用されているアプリケーションで GCB カートリッジの置き換えとして使用できます。

この実験では、Agilent Bond Elut Carbon S 250 mg、6 mL カートリッジの後に LC/MS/MS 分析を使用した、砂壤土、アシスゲ泥炭、および表土からの 59 種類の PFAS の抽出後のマトリックスクリーンアップについて調査します。

実験方法

材料および試薬

非標識 PFAS 標準および同位体標識されている標準品は、個別の標準として Wellington Laboratories, Inc (ゲルフ、オンタリオ州、カナダ) から購入しました。HPLC グレードのメタノール (MeOH) は Honeywell (マスキゴン、ミシガン州、米国) から入手しました。試薬グレードの酢酸、酢酸アンモニウム、および水酸化アンモニウムは Sigma-Aldrich (セントルイス、ミズーリ州、米国) から入手しました。

溶液および標準試料

この実験で調査した 59 種類のターゲット化合物を付録 A に示します。ターゲットスパイク溶液は、すべての化合物について濃度 250 ng/mL のメタノール溶液で調製しました。ただし、例外があり、N-MeFOSA、N-EtFOSA、6:2/8:2 diPAP、8:8 PFPI、8:2 diPAP は濃度 500 ng/mL、MeFOSE、EtFOSE、PFHxDA、PFODA、diSAMPAP は濃度 1,000 ng/mL、6:2 FTCA、8:2 FTCA、10:2 FTCA は濃度 2,500 ng/mL にしました。

同位体希釈類似物のスパイク溶液は、付録 A に示されている化合物を含むメタノール溶液で調製しました。すべての同位体の濃度は 250 ng/mL ですが、例外があり、d₇-MeFOSE、d₉-EtFOSE は 1,000 ng/mL、¹³C₂-6:2 FTCA、¹³C₂-8:2 FTCA、¹³C₂-10:2 FTCA は 2,000 ng/mL にしました。

同位体性能標準は、濃度がそれぞれ 500、500、1,500 ng/mL の ¹³C₃-PFBA、¹³C₂-PFOA、¹³C₄-PFOS を含むメタノール溶液で調製しました。

検量線標準溶液は、メタノールと水が 80:20 (v/v) の混合溶媒で調製しました。フルオロテロマーカルボン酸、スルホンアミドエタノールを除く、付録 A に示されているすべてのターゲット化合物に対して、0.25 ~ 2.5 ng/mL のキャリブレーション範囲で 6 つの標準溶液を調製しました。6:2 FTCA、8:2 FTCA、および 10:2 FTCA の濃度は 0.25 ~ 25 ng/mL の範囲としました。EtFOSE および MeFOSE の濃度は 0.1 ~ 10 ng/mL の範囲としました。標識化フルオロテロマーカルボン酸、スルホンアミドエタノールを除く、付録 A に示されているすべての同位体標準に対して、標準中の同位体希釈物の濃度を 0.5 ng/mL にしました。¹³C₂-6:2 FTCA、¹³C₂-8:2 FTCA、および ¹³C₂-10:2 FTCA の濃度は 4 ng/mL にしました。d₉-EtFOSE および d₇-MeFOSE の濃度は 2 ng/mL にしました。同位体性能標準 ¹³C₃-PFBA、¹³C₂-PFOA、および ¹³C₄-PFOS の濃度はそれぞれ、5、5、および 15 ng/mL にしました。

1 % アンモニアメタノール溶液 (v/v) は、抽出と同じ日に調製しました。

実験装置と材料

サンプルは、Agilent 1290 Infinity II ハイスピードポンプ (G7120A)、Agilent 1290 Infinity II マルチサンブラ (G7167B)、および Agilent 1290 Infinity II マルチカラムサーモスタット (G7167B) で構成される Agilent 1290 Infinity II LC システムで分析しました。LC システムは、Agilent InfinityLab PFC フリー HPLC 変換キット (部品番号 5004-0006) を使用して PFAS 分析に合わせて変更しました。この LC システムを、Agilent Jet Stream エレクトロスプレーイオンソースを搭載した Agilent 6470B トリプル四重極 LC/MS システムに連結しました。データの取り込みと解析には、Agilent MassHunter ワークステーションソフトウェアを使用しました。MRM 設定を最適化するために、Agilent PFAS MRM データベース (G1736AA) を使用しました。

PFAS の抽出および分析に使用した PFAS に適した消耗品を表 1 に示します。^{3, 4} 評価には、清潔な砂壌土 (Supelco、部品番号 CLNSOIL3)、黒っぽいアシスゲ泥炭、有機表土の 3 種類のサンプルマトリックスを使用しました。抽出時に、多目的ローテータモデル 150 (Scientific Industries、スプリングフィールド、マサチューセッツ州) チューブローテータを使用して、サンプルチューブを完全に反転させました。

分析条件

HPLC 条件を表 2 に、MS 条件を表 3 に示します。ターゲットおよび同位体希釈類似物の MRM トランジションを付録 A に示します。図 1 に、2 ng/mL の標準の抽出済みターゲットプロダクトイオンから生成される代表的なクロマトグラムを示します。

表 1. PFAS に適した消耗品

アジレントの消耗品	部品番号
Carbon S カートリッジ、250 mg、6 mL	5610-2082
ポリプロピレンオートサンプリングスクリューバイアル、2 mL、キャップ付き	5191-8151 と 5191-8150
遠心分離チューブとキャップ、15 mL	5610-2039
InfinityLab PFC ディレイカラム、4.6 × 30 mm	5062-8100
Agilent ZORBAX RRHD Eclipse Plus C18 カラム、2.1 × 100 mm、1.8 μm	959758-902
Vac Elut SPS 24 マニホールド、10 × 75 mm 試験管用コレクションラック付き	12234003
12 または 15 mL コニカルチューブ用コレクションラックおよびファネルセット、Vac Elut SPS 24 マニホールド用	12234027

表 2. HPLC 条件

パラメータ	設定値		
移動相	A) 5 mM 酢酸アンモニウム水溶液 B) メタノール		
注入量	5 μL		
カラム温度	30 °C		
流量	0.400 mL/min		
グラジエント	時間 (分)	% A	% B
	0	85	15
	1.00	85	15
	1.50	45	55
	5.50	30	70
	7.00	20	80
	12.00	0	100
	14.40	0	100
14.50	85	15	

表 3. MS 条件

パラメータ	設定値
MS/MS	Agilent 6470B トリプル四重極 LC/MS システム
極性	ネガティブ
乾燥ガス	230 °C、4 L/min
シースガス	250 °C、12 L/min
ネプライザガス	15 psi
キャピラリー電圧	2,500 V
ノズル電圧	0 V

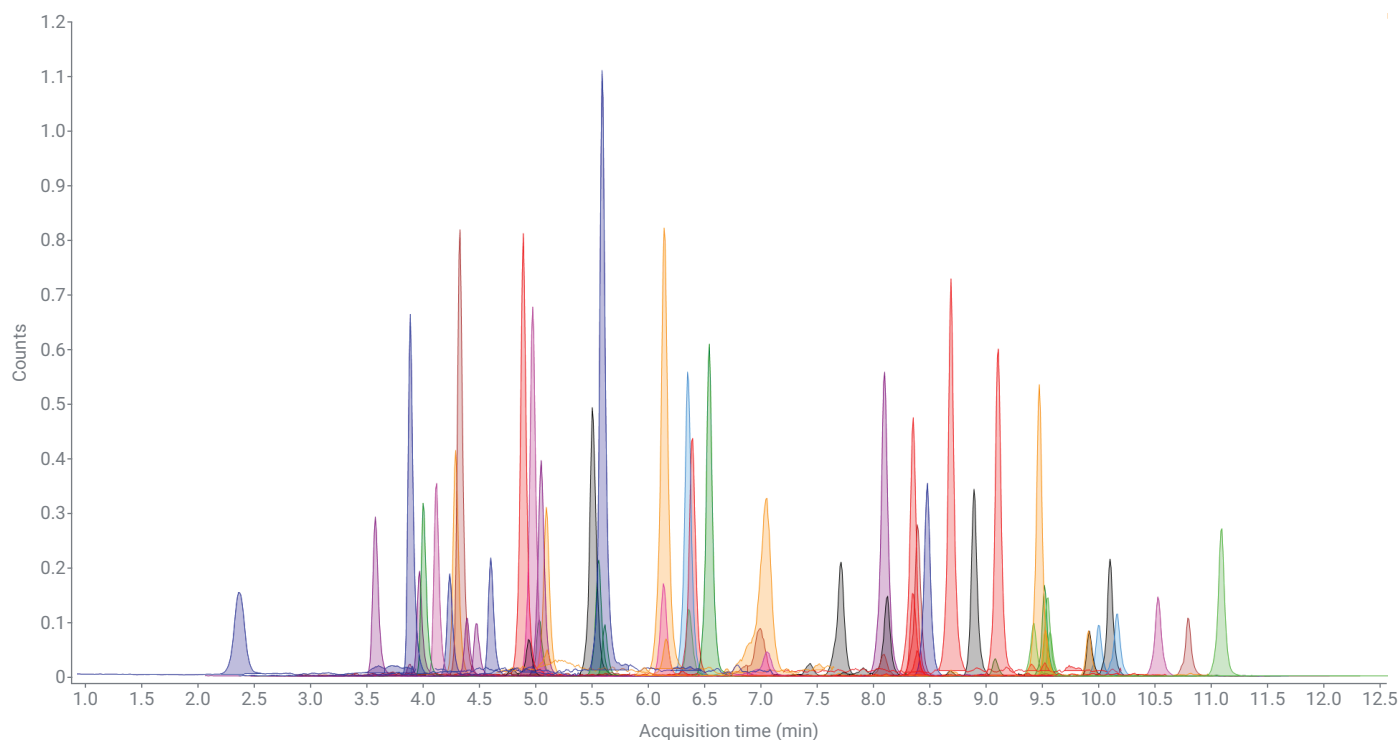


図 1. 大部分の化合物 (付録 A に示されている化合物) の標準溶液の 2 ng/mL におけるターゲット定量イオンのクロマトグラム

キャリブレーションと定量

安定同位体希釈手法を使用して、ターゲットのレスポンスと濃度を、同位体希釈物のレスポンスと濃度と比較して測定する定量を実行しました。⁵ 各ターゲット化合物に対応する同位体希釈物を付録 A に示します。レスポンス曲線は、 $1/x$ 重み付き線形最小二乗法回帰モデルを使用して適合させ、原点 (0,0) を含めました。塩として提供された PFAS 標準の濃度を、溶液中の酸の濃度に合わせて補正しました。

サンプル前処理

サンプル前処理は、ASTM D7968-17a の抽出方法に厳密に従いました。ただし、シリンジによるろ過ステップを、Carbon S カートリッジを使用したパススルークリーンアップに置き換えました。抽出プロセスの手順を図 2 に示します。

メソッド性能の評価

最初に、砂壌土マトリックスの 2 つのスパイクレベルにおける 5 回の繰り返し抽出の回収率の精度と真度を測定することにより、メソッド性能を評価しました。次に、スゲ泥炭および表土サンプルの残留 PFAS について試験しました。Carbon S によるクリーンアップを使用する場合と使用しない場合について、サンプル抽出物の結果を比較することにより、メソッドの改善状況を評価しました。

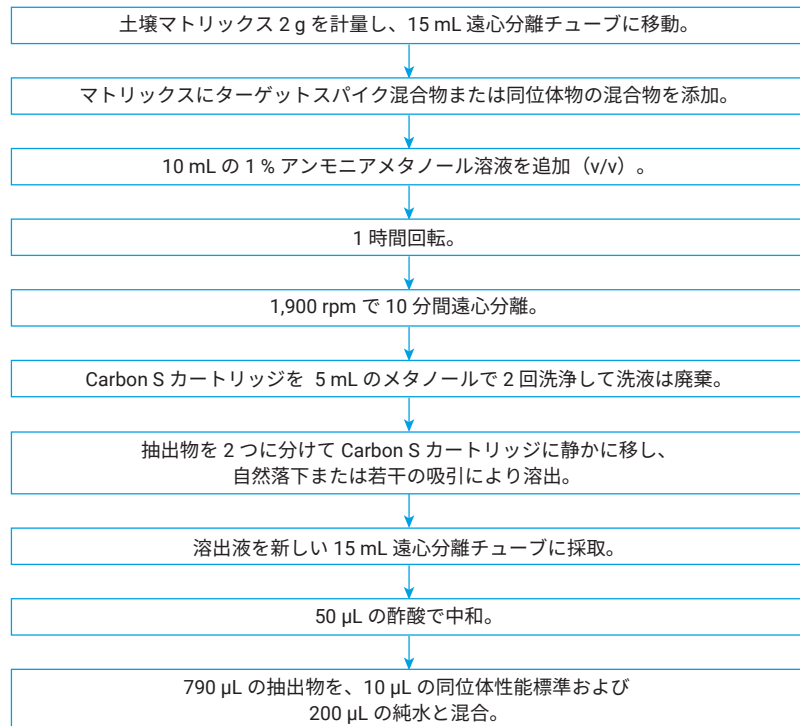


図 2. この実験で使用した土壌抽出プロトコル

砂壌土サンプルに、5 µL (低濃度スパイク) または 50 µL (高濃度スパイク) のターゲットスパイク溶液および 20 µL の同位体希釈物のスパイク溶液を添加しました。低濃度スパイクでは、大部分のターゲット化合物に対して、2 g の土壌中の PFAS ターゲットの濃度を 0.625 ng/g にしました。ただし、例外があり、N-MeFOSA、N-EtFOSA、6:2/8:2 diPAP、8:8 PFPi、8:2 diPAP では 1.25 ng/g、EtFOSE、N-MeFOSE、PFHxDA、PFODA、diSAmpPAP では 2.5 ng/g、6:2 FTCA、8:2 FTCA、10:2 FTCA では 6.25 ng/g にしました。高濃度スパイクの土壌濃度は 10 倍以上にしました。

サンプルセットには、メソッドブランクも含めました。カートリッジブランク (メタノール洗浄液から採取したすすぎ液) およびマトリックスブランクも分析して、サンプル分析の前にシステムとカートリッジに PFAS 汚染物が含まれていないことを確認しました。

結果と考察

キャリブレーション

メソッドキャリブレーションの品質を評価するために、キャリブレーションレベルごとの各ターゲットの算出濃度を、レスポンス曲線に基づいて算出しました (図 3)。レベル 2 ~ 6

では、精度は 75.1 ~ 100.0 % の範囲であり、平均は 95.4 % でした。レベル 1 では、精度は 66.3 ~ 99.9 % の範囲であり、平均は 89.5 % でした。品質管理用標準⁵を、大部分の化合物に対する濃度 2 ng/mL の標準溶液とは別に、ターゲットのスパイク溶液から前処理しました。品質管理用標準の精度は 74.7 ~ 99.7 %

の範囲であり、平均は 94.1 % でした。これらの結果を図 4 にプロットしていますが、実験で使用した濃度範囲にわたって良好なキャリブレーション精度を示しています。

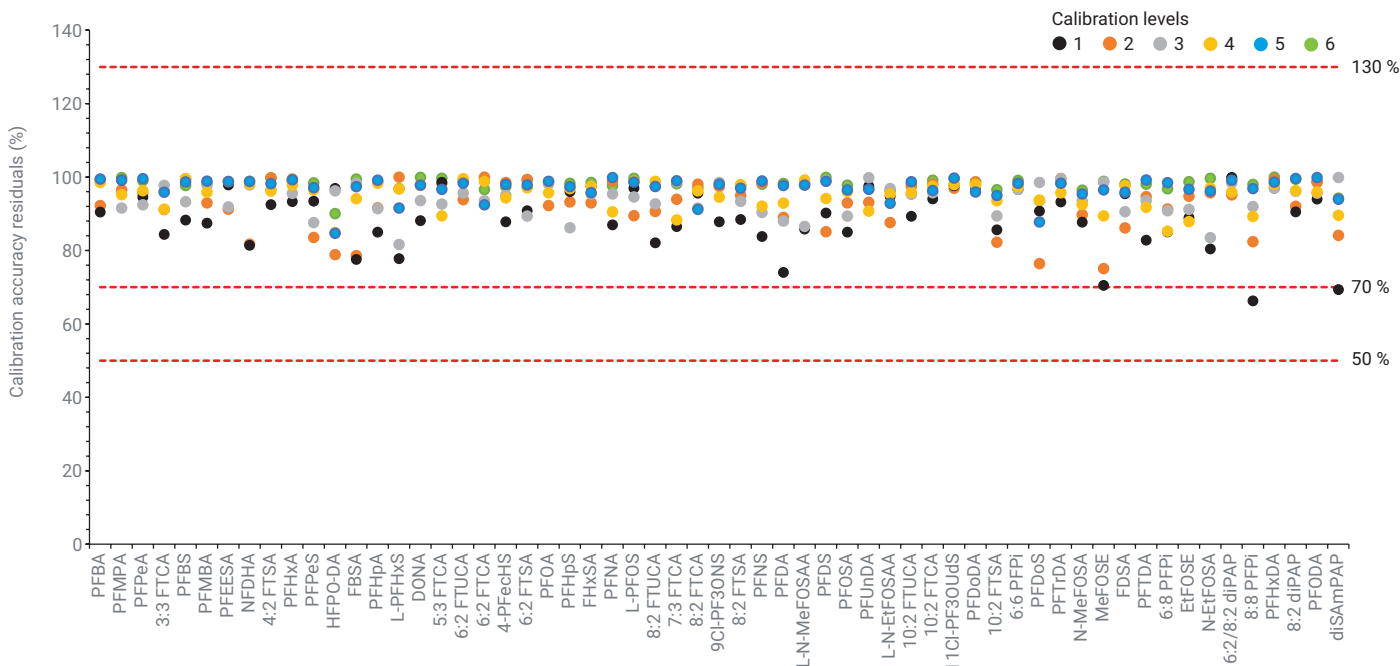


図 3. キャリブレーションレベル 1 ~ 6 の算出濃度の精度

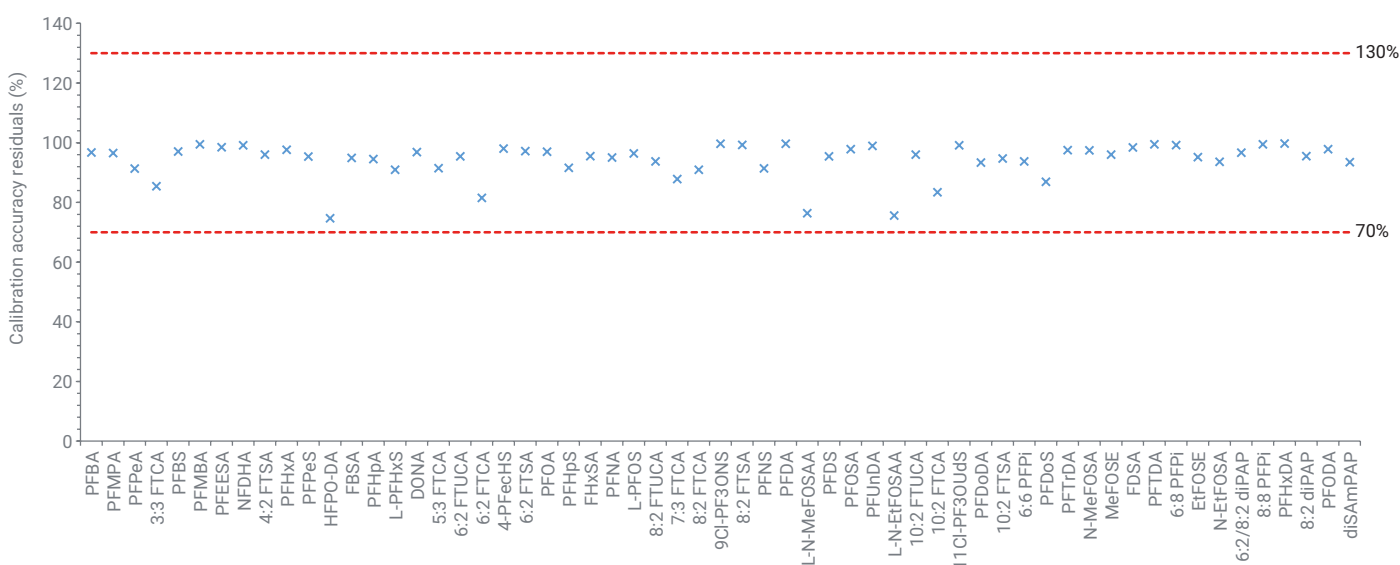


図 4. 大部分の化合物の品質管理用標準の 2 ng/mL における算出濃度の精度

ブランクの分析

抽出および分析で使用した消耗品、抽出方法、および LC/MS/MS システムが PFAS で汚染されていないことを確認するために、各抽出セットとともに抽出ブランクを分析しました。さらに、2 つに分けたカートリッジからメタノールすすぎ液 (図 2) を採取して分析し、Carbon S 充填剤とカートリッジに PFAS 残留物が存在しないことを確認しました。抽出物およびカートリッジブランクを確認して、バックグラウンドの上限を最小報告レベル (MRL) の 3 分の 1 に設定することにより、

低濃度スパイクを最小報告レベルとして規定しました。⁵ 図 5 に、ブランクの分析の定量結果を示します。オレンジ色の棒はカートリッジのすすぎ液で測定された平均残留 PFAS であり、青色の棒は砂壤土の 2 つの抽出物ブランクで測定された平均残留 PFAS です。緑色の破線は 2 g の土壌の低濃度スパイクの濃度であり、大部分のターゲット化合物に対して 0.625 ng/g にしました。ただし、例外があり、N-MeFOSA、N-EtFOSA、6:2/8:2 diPAP、8:8 PFPi、8:2 diPAP では 1.25 ng/g、EtFOSE、N-MeFOSE、PFHxDA、PFODA、diSAmPAP

では 2.5 ng/g、6:2 FTCA、8:2 FTCA、10:2 FTCA では 6.25 ng/g にしました。図 5 の赤色の破線は、バックグラウンドの上限を示しています。ブランク中の PFAS のバックグラウンド濃度は、低濃度スパイクを MRL として規定したすべてのターゲット PFAS において、MRL 閾値の 3 分の 1 を十分に下回っていました。

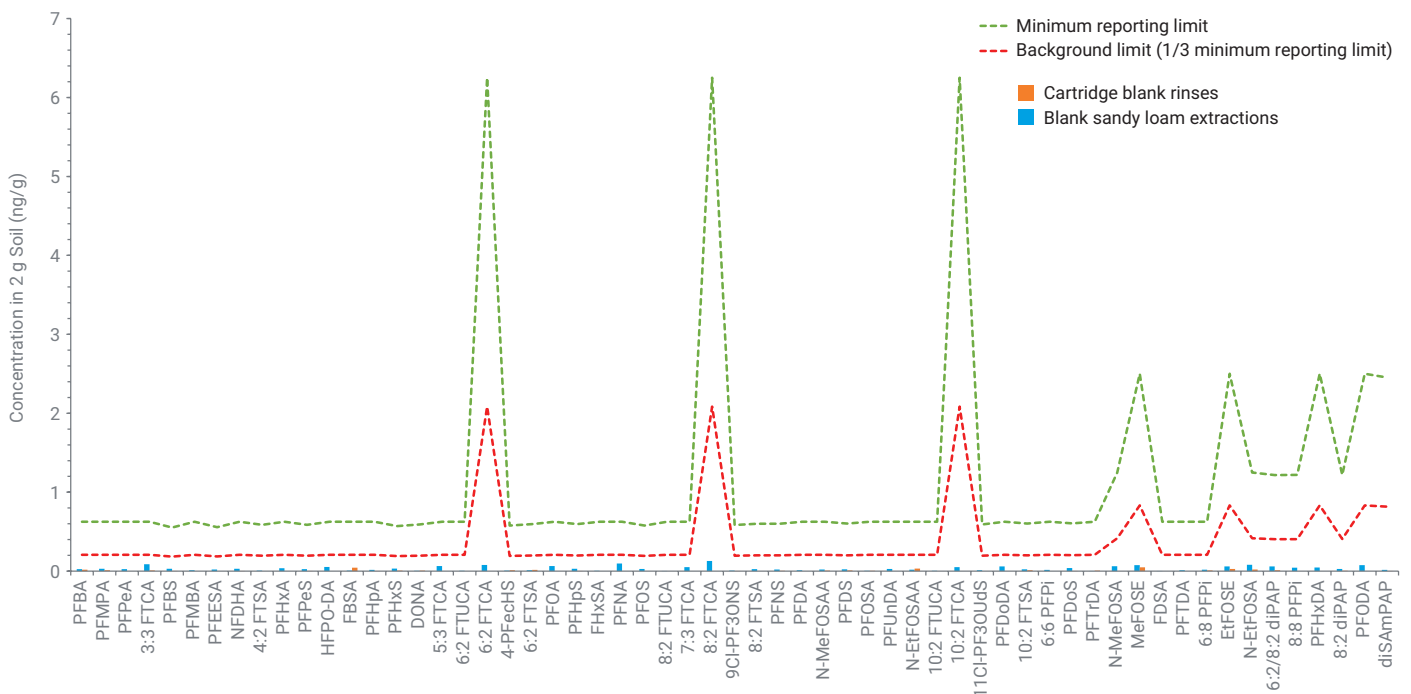


図 5. 2 つの繰り返し抽出したカートリッジブランク洗浄液と 2 つの繰り返し抽出したブランク砂壤土抽出物の平均値。緑色の破線は、低濃度スパイクと最小報告レベルの濃度を表しています。赤色の破線は、バックグラウンドの上限を示しています。

図 6 に、ブランクカートリッジ洗浄液のターゲット化合物のトータル MRM クロマトグラムを示します。これらの結果は、低濃度スパイクを上回るとして報告可能な PFAS が存在しないことを実証しており、サンプル前処理時に PFAS 汚染物が混入していないことを示しています。

砂壌土の添加

低濃度スパイクおよび高濃度スパイクで、砂壌土の 5 回繰り返し抽出を実行しました。図 7 では、青色の棒は低濃度スパイクでの平均回収率を表しており、黄色の線はパーセント相対標準偏差 (RSD) を表しています。すべての化合物の回収率は 50 ~ 150 % 以内に収まっており、3:3 FTCA、PFDoS を除くすべての化合物の RSD は 30 % を下回っていました。すべての化合物の平均回収率は 99.3 % であり、RSD は 13.5 % でした。図 8 に、高濃度スパイクの平均回収率と RSD を示します。

3:3 FTCA、5:3 FTCA、6:2 FTUCA、8:2 FTUCA を除くすべての化合物の回収率は 70 ~ 130 % 以内でした。すべての高濃度スパイクの RSD は 30 % を下回っていました。すべての化合物の平均回収率は 99.2 % であり、RSD は

8.5 % でした。これらの結果は、両方のスパイクレベル濃度において添加回収率が良好であることを実証しています。

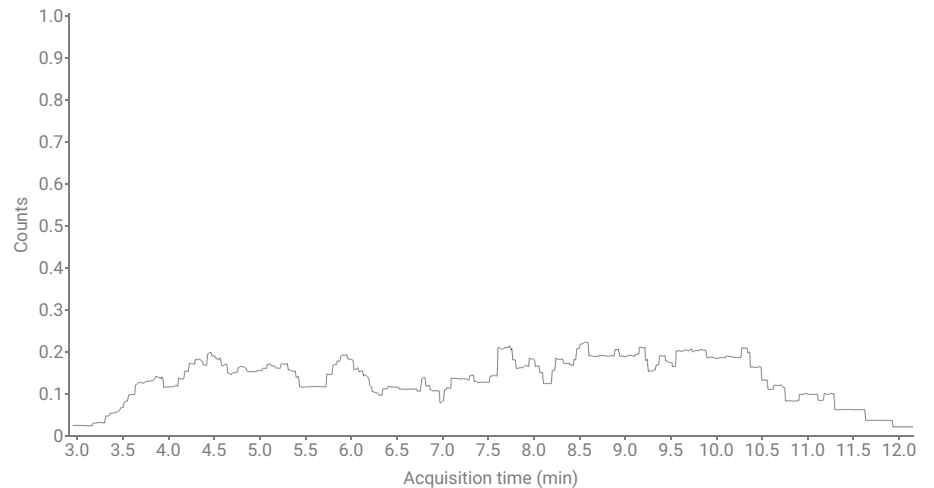


図 6. カートリッジブランク洗浄液のトータル MRM クロマトグラム

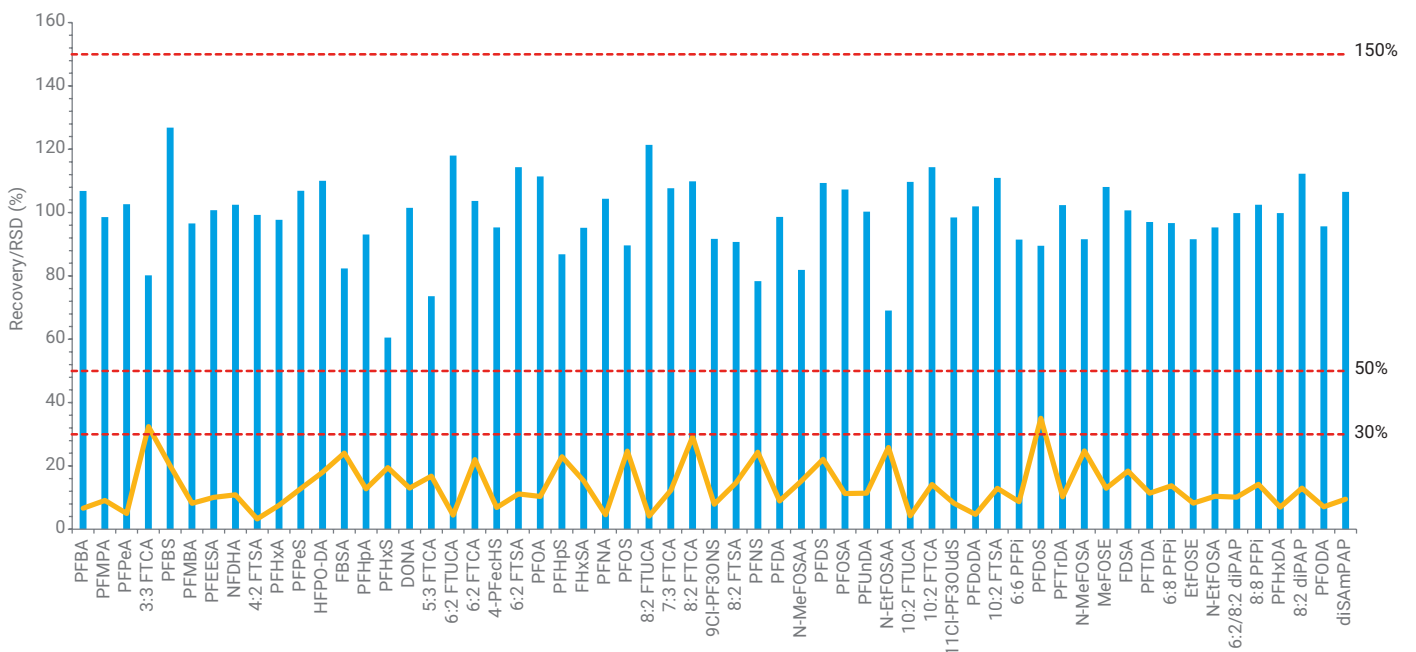


図 7. 低濃度スパイクにおける砂壌土の 5 回繰り返し抽出の平均回収率 (青色の棒) と RSD (黄色の線)

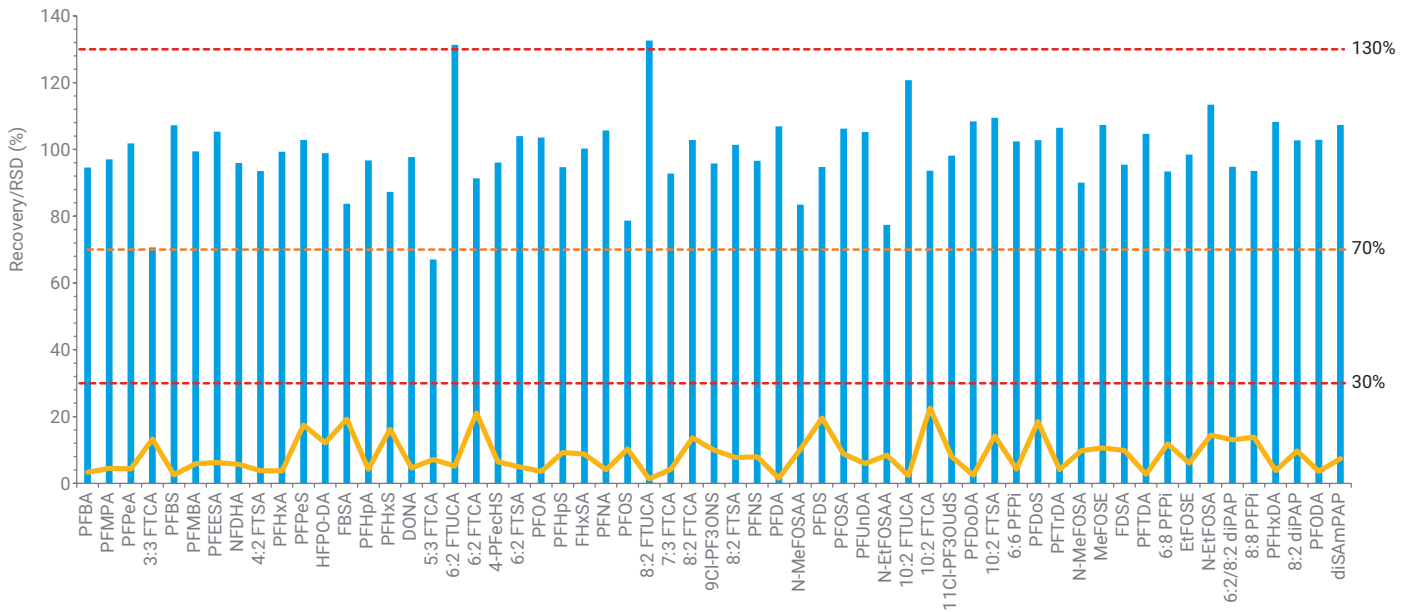


図 8. 高濃度スパイクにおける砂壤土の 5 回繰り返し抽出の平均回収率（青色の棒）と RSD（黄色の線）

アシスゲ泥炭および表土の分析

PFAS 残留物の分析において、2 社の商用サプライヤのアシスゲ泥炭および表土の 2 種類の土壌を選択しました。泥炭を選択したのは、主に高濃度の有機酸と低ミネラルの物質

が含まれる有機物質で構成されているためです。表土を選択したのは、泥炭と比較して容積密度が高く、無機ミネラル物質が含まれているためです。

それぞれの種類の土壌に対して、3 回の抽出を実行しました。表 4 に、分析結果を示します。MRL を上回る濃度の PFAS が検出されたのは、泥炭サンプルのみでした。泥炭サンプルで測定された PFBA、PFPeA、および

表 4. 土壌サンプルで測定された PFAS の平均濃度

略語	アシスゲ泥炭	表土
10:2 FTCA	< MRL	< MRL
10:2 FTSA	< MRL	< MRL
10:2 FTUCA	< MRL	< MRL
11Cl-PF3OUdS	< MRL	< MRL
3:3 FTCA	< MRL	< MRL
4:2 FTSA	< MRL	< MRL
4-PFecHS	< MRL	< MRL
5:3 FTCA	< MRL	< MRL
6:2 FTCA	< MRL	< MRL
6:2 FTSA	< MRL	< MRL
6:2 FTUCA	< MRL	< MRL
6:2/8:2 diPAP	< MRL	< MRL
6:6 PFPI	< MRL	< MRL
6:8 PFPI	< MRL	< MRL
7:3 FTCA	< MRL	< MRL
8:2 diPAP	< MRL	< MRL
8:2 FTCA	< MRL	< MRL
8:2 FTSA	< MRL	< MRL
8:2 FTUCA	< MRL	< MRL
8:8 PFPI	< MRL	< MRL

略語	アシスゲ泥炭	表土
9Cl-PF3ONS	< MRL	< MRL
diSAMpAP	< MRL	< MRL
DONA	< MRL	< MRL
EtFOSE	< MRL	< MRL
FBSA	< MRL	< MRL
FDSA	< MRL	< MRL
FHxSA	< MRL	< MRL
HFPO-DA	< MRL	< MRL
MeFOSE	< MRL	< MRL
N-EtFOSA	< MRL	< MRL
N-EtFOSAA	< MRL	< MRL
NFDHA	< MRL	< MRL
N-MeFOSA	< MRL	< MRL
N-MeFOSAA	< MRL	< MRL
PFBA	4.5 ng/g	< MRL
PFBS	< MRL	< MRL
PFDA	< MRL	< MRL
PFDoDA	< MRL	< MRL
PFDoS	< MRL	< MRL
PFDS	< MRL	< MRL

略語	アシスゲ泥炭	表土
PFEESA	< MRL	< MRL
PFHpA	0.83 ng/g	< MRL
PFHpS	< MRL	< MRL
PFHxA	< MRL	< MRL
PFHxDA	< MRL	< MRL
PFHxS	< MRL	< MRL
PFMBA	< MRL	< MRL
PFMPA	< MRL	< MRL
PFNA	< MRL	< MRL
PFNS	< MRL	< MRL
PFOA	< MRL	< MRL
PFODA	< MRL	< MRL
PFOS	< MRL	< MRL
PFOSA	< MRL	< MRL
PFPeA	2.98 ng/g	< MRL
PFPeS	< MRL	< MRL
PFTDA	< MRL	< MRL
PFTTrDA	< MRL	< MRL
PFUnDA	< MRL	< MRL

PFHpA の濃度はそれぞれ、4.51、2.98、および 0.83 ng/g でした。表土で測定された PFAS 残留物の濃度はすべて、MRL を下回っていました。

マトリックス除去の効率

泥炭および表土サンプルのマトリックス除去の効率を、Carbon S によるパススルークリーンアップ前後のサンプル抽出物の色素を目視検査することにより、定性的に評価しました (図 9)。両方のマトリックス抽出物に対して、大幅な色素除去を達成しました。泥炭では (図 9A)、Carbon S によるクリーンアップ前の抽出物はオレンジ色/茶色でしたが、充填剤を通過した後はやっと認識できるほどの黄色に変色しました。表土では (図 9B)、クリーンアップ前の抽出物は淡い黄色でしたが、クリーンアップ後は完全に透明になりました。

Carbon S によるクリーンアップを使用した場合と使用しない場合のマトリックス抽出物間で、トータルイオンクロマトグラムを比較しました。Carbon S によるクリーンアップを使用していない泥炭抽出物は Carbon S によるクリーンアップを使用した抽出物と比較して、最も初期に溶出したピーク (PFBA) のピーク形状が歪んでおり、リテンションタイムがシフトしていました。図 10 に、Carbon S によるクリーンアップを使用した場合と使用しない場合の $^{13}\text{C}_3$ -PFBA の抽出 MRM 定量イオンクロマトグラムの例を示します。Carbon S によるクリーンアップを使用しない場合の泥炭抽出物中の $^{13}\text{C}_3$ -PFBA の分離ピーク形状 (図 10A) は、Carbon S によるクリーンアップを使用した場合の抽出物中の $^{13}\text{C}_3$ -PFBA のピーク (図 10B) と比較して、幅が広く一部が割れているように見えます。さらに、泥炭抽出物のリテンションタイムは、0.5 分だけ前にシフトしていました。これらの結果は、Carbon S によるパススルークリーンアップで得られたマトリックスクリーンアップ度の効率が高いため、一部のターゲットではマトリックス効果を低減できると同時に、データの品質と一貫性が向上できることを実証しています。

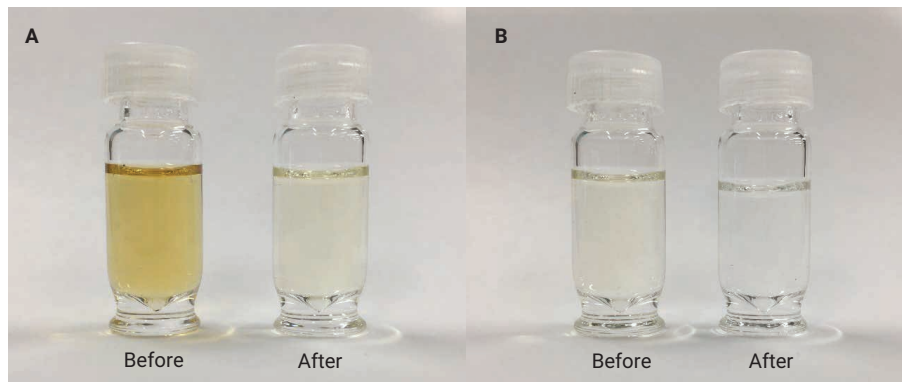


図 9. (A) 泥炭および (B) 表土の Carbon S によるパススルークリーンアップ前後の色素除去の定性的な比較

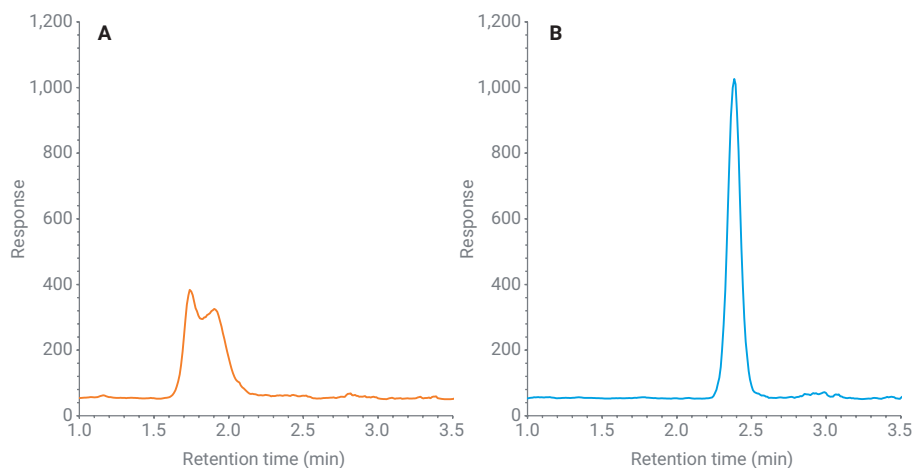


図 10. Carbon S によるクリーンアップを使用しない場合 (A) および Carbon S によるクリーンアップを使用した場合 (B) の泥炭マトリックス間の $^{13}\text{C}_3$ -PFBA 定量イオン分離ピーク形状とリテンションタイムの差の比較

結論

結果は、Agilent Bond Elut Carbon S SPE カートリッジを使用した場合、土壌サンプル中の PFAS の分析において効率的なマトリックスパススルークリーンアップを実現したことを示しています。実験した 59 種類の PFAS の平均回収率は、大部分の化合物において 99 % の範囲内であり、RSD は 30 % を下回っていました。アシシゲ泥炭の抽出物では、Carbon S を使用した場合、Carbon S によるクリーンアップを使用しない場合の抽出物と比較して、PFBA のピーク形状の完全性とリテンションの一貫性が向上しました。

参考文献

- Weil, R. R.; Brady, N. C. Soil Architecture and Physical Properties. The Nature and Properties of Soils, 15th Ed. Pearson: Harlow, 2017, p. 122. Elements of the Nature and Properties of Soils, Prentice Hall 2017.
- Zhao, L.; Wei, T. スプリングリーフミックス中のマルチクラス、多成分残留農薬の測定 - Capitva EMR-HCF パススルークリーンアップと LC/MS/MS による分析, Agilent Technologies application note, publication number 5994-4765JAJ, **2022**.
- Giardina, M. 土壤抽出物中のペルフルオロアルキル化合物およびポリフルオロアルキル化合物の分析, Agilent Technologies application note, publication number 5994-2999JAJ, **2021**.
- Giardina, M.; Sun, N. L. Analysis of Per- and Polyfluoroalkyl Substances in Drinking Water using SampliQ Weak Anion Exchange Solid Phase Extraction 150 mg Cartridge, Agilent Technologies application note, publication number 5994-3616EN, **2021**.
- Method 533: Determination of Perand Polyfluoroalkyl Substances in Drinking Water by Isotope Dilution Anion Exchange Solid Phase Extraction and Liquid Chromatography/Tandem Mass Spectrometry. United States Environmental Protection Agency, **2019**.

付表 A

表 A1. マトリックスに添加したターゲットスパイク物質

ターゲット化合物	CAS	リテンション タイム (分)	ターゲット定量イオン MRM トランジション	同位体の類似物	同位体 MRM トランジション
PFBA	375-22-4	2.43	213 -> 169	¹³ C ₄ -PFBA	217 -> 172
PFMPA	377-73-1	3.57	229 -> 85	¹³ C ₅ -PFPeA	268 -> 223
3:3 FTCA	356-02-5	3.88	241 -> 177	¹³ C ₅ -PFPeA	268 -> 223
PFPeA	2706-90-3	3.89	263 -> 219	¹³ C ₅ -PFPeA	268 -> 223
PFBS	375-73-5	3.97	299 -> 80	¹³ C ₃ -PFBS	302 -> 80
PFMBA	863090-89-5	4.01	279 -> 85	¹³ C ₅ -PFPeA	268 -> 223
PFEESA	113507-82-7	4.12	315 -> 135	¹³ C ₃ -PFBS	302 -> 80
NFDHA	151772-58-6	4.25	295 -> 85	¹³ C ₅ -PFHxA	318 -> 273
4:2 FTSA	757124-72-4	4.29	327 -> 307	¹³ C ₂ -4:2 FTSA	329 -> 309
PFHxA	307-24-4	4.33	313 -> 269	¹³ C ₅ -PFHxA	318 -> 273
PFPeS	2706-91-4	4.39	349 -> 80	¹³ C ₃ -PFHxS	402 -> 80
HFPO-DA	13252-13-6	4.48	285 -> 169	¹³ C ₃ -HFPO-DA	287 -> 169
FBSA	30334-69-1	4.58	298 -> 78	¹³ C ₃ -PFHxS	402 -> 80
PFHpA	375-85-9	4.90	363 -> 319	¹³ C ₄ -PFHpA	367 -> 322
PFHxS	355-46-4	4.95	399 -> 80	¹³ C ₃ -PFHxS	402 -> 80
DONA	919005-14-4	4.98	377 -> 251	¹³ C ₄ -PFHpA	367 -> 322
5:3 FTCA	914637-49-3	5.04	341 -> 237	¹³ C ₅ -PFHxA	318 -> 273
6:2 FTUCA	70887-88-6	5.06	357 -> 293	¹³ C ₂ -6:2 FTUCA	359 -> 294
6:2 FTCA	53826-12-3	5.11	377 -> 293	¹³ C ₂ -6:2 FTCA	379 -> 294
4-PFecHS	646-83-3	5.52	461 -> 381	¹³ C ₈ -PFOS	507 -> 80
6:2 FTSA	27619-97-2	5.57	427 -> 407	¹³ C ₂ -6:2 FTSA	429 -> 409
PFOA	335-67-1	5.60	413 -> 369	¹³ C ₈ -PFOA	421 -> 376
PFHpS	375-92-8	5.63	449 -> 80	¹³ C ₈ -PFOS	507 -> 80
FHxSA	41997-13-1	6.10	398 -> 78	¹³ C ₈ -PFOS	507 -> 80
PFNA	375-95-1	6.15	463 -> 419	¹³ C ₉ -PFNA	472 -> 427
PFOS	1763-23-1	6.17	499 -> 80	¹³ C ₈ -PFOS	507 -> 80
8:2 FTUCA	70887-84-2	6.36	457 -> 393	¹³ C ₂ -8:2 FTUCA	459 -> 394
7:3 FTCA	812-70-4	6.37	441 -> 337	¹³ C ₅ -PFHxA	318 -> 273
8:2 FTCA	27854-31-5	6.40	477 -> 393	¹³ C ₂ -8:2 FTCA	479 -> 394
9Cl-PF3ONS	756426-58-1	6.55	531 -> 351	¹³ C ₈ -PFOS	507 -> 80
8:2 FTSA	39108-34-4	7.02	527 -> 507	¹³ C ₂ -8:2 FTSA	529 -> 509
PFDA	335-76-2	7.07	513 -> 469	¹³ C ₆ -PFDA	519 -> 474
PFNS	68259-12-1	7.09	549 -> 80	¹³ C ₈ -PFOS	507 -> 80
N-MeFOSAA	2355-31-9	7.73	570 -> 419	d ₃ -N-MeFOSAA	573 -> 419
PFDS	335-77-3	8.10	599 -> 80	¹³ C ₈ -PFOS	507 -> 80
PFUnDA	2058-94-8	8.11	563 -> 519	¹³ C ₇ -PFUnDA	570 -> 525
N-EtFOSAA	2991-50-6	8.13	584 -> 419	d ₆ -N-EtFOSAA	589 -> 419
PFOSA	754-91-6	8.32	498 -> 78	¹³ C ₈ -PFOSA	506 -> 78
10:2 FTUCA	70887-94-4	8.36	557 -> 493	¹³ C ₂ -10:2 FTUCA	559 -> 494
10:2 FTCA	53826-13-4	8.40	577 -> 493	¹³ C ₂ -10:2 FTCA	579 -> 494
11Cl-PF30Uds	763051-92-9	8.48	631 -> 451	¹³ C ₈ -PFOS	507 -> 80
PFDoDA	307-55-1	8.70	613 -> 569	¹³ C ₂ -PFDoDA	615 -> 570
10:2 FTSA	120226-60-0	8.71	627 -> 607	¹³ C ₂ -8:2 FTSA	529 -> 509

ターゲット化合物	CAS	リテンション タイム (分)	ターゲット定量イオン MRM トランジション	同位体の相当物質	同位体 MRM トランジション
6:6 PFPI	40143-77-9	8.90	701 -> 401	¹³ C ₂ -PFDoDA	615 -> 570
PFDoS	79780-39-5	9.09	699 -> 80	¹³ C ₈ -PFOS	507 -> 80
PFTDA	72629-94-8	9.12	663 -> 619	¹³ C ₂ -PFDoDA	615 -> 570
PFTDA	376-06-7	9.49	713 -> 669	¹³ C ₂ -PFTDA	715 -> 670
N-MeFOSA	31506-32-8	9.50	512 -> 219	d ₅ -N-MeFOSA	515 -> 169
FDSA	—	9.52	598 -> 78	¹³ C ₈ -PFOSA	506 -> 78
6:8 PFPI	610800-34-5	9.54	801 -> 401	(¹³ C ₂) ₂ -6:2 diPAP	993 -> 97
MeFOSE	24448-09-7	9.54	616 -> 59	d ₇ -MeFOSE	623.1 -> 59
N-EtFOSA	4151-50-2	9.88	526 -> 219	d ₅ -N-EtFOSA	531 -> 169
EtFOSE	1691-99-2	9.89	630 -> 59	d ₉ -EtFOSE	639.1 -> 59
6:2/8:2 diPAP	943913-15-3	10.02	889 -> 443	(¹³ C ₂) ₂ -6:2 diPAP	793 -> 97
8:8 PFPI	40143-79-1	10.11	901 -> 501	(¹³ C ₂) ₂ -6:2 diPAP	793 -> 445
PFHxDA	67905-19-5	10.18	813 -> 269	¹³ C ₂ -PFHxDA	815 -> 770
8:2 diPAP	678-41-1	10.55	989 -> 543	(¹³ C ₂) ₂ -8:2 diPAP	993 -> 97
PFODA	16517-11-6	10.81	913 -> 369	¹³ C ₂ -PFHxDA	815 -> 770
diSAmPAP	2965-52-8	11.10	1,203 -> 526	(¹³ C ₂) ₂ -8:2 diPAP	993 -> 97

ホームページ

www.agilent.com/chem/jp

カスタムコンタクトセンタ

0120-477-111

email_japan@agilent.com

本製品は一般的な実験用途での使用を想定しており、医薬品医療機器等法に基づく登録を行っていません。本文書に記載の情報、説明、製品仕様等は予告なしに変更されることがあります。

DE25278998

アジレント・テクノロジー株式会社
© Agilent Technologies, Inc. 2022
Printed in Japan, April 29, 2022
5994-4770JAJP