

EPA ドラフトメソッド 1633 に基づく 水性サンプル中のパーフルオロアルキル物質と ポリフルオロアルキル物質 (PFAS) の分析

Agilent Bond Elut PFAS WAX SPE カートリッジ

著者

Kathy Hunt and Ralph Hindle
Vogon Laboratory Services
Ltd.
Cochrane, AB, Canada
Tarun Anumol, Matthew
Giardina, Megan Juck, Emily
Parry
Agilent Technologies, Inc.

概要

米国環境保護庁 (EPA) ドラフトメソッド 1633 (2022 年 6 月)¹ は、廃水・土壌・固形物・組織などの多くのマトリックス中のパーフルオロアルキル物質およびポリフルオロアルキル物質 (PFAS) の検出と定量のために提案された分析メソッドです。以前のアプリケーションノート² では、既存の固相抽出 (SPE) 技術を使用し、アジレント機器の性能に焦点を当てました。このアプリケーションノートでは、Agilent Bond Elut PFAS WAX SPE カートリッジを使用した EPA ドラフトメソッドに基づく、水性廃水サンプルの PFAS 試験について説明します。分析用の機器としては、Agilent 6470 トリプル四重極 (TQ) 質量分析計 (LC/TQ) に接続された Agilent 1290 Infinity II 液体クロマトグラフ (LC) システムを利用しました。本研究では、分析成分の抽出回収率、感度 (メソッド検出限界)、および再現性の観点から、メソッドの性能を検証しました。

はじめに

飲料水、非飲用水、土壌、堆積物、埋立地浸出液、およびその他の潜在的に複雑なマトリックス中の PFAS の分析をするには、多くのメソッドがあります。EPA ドラフトメソッド 1633 (2022 年 6 月) は、9 つの化合物クラスにわたる 40 種類の PFAS の定量のための方法論の標準化を目指す同位体希釈メソッドです。これらのクラスには、非飲用の水性、固体、バイオリソリッド、および組織サンプル中の直鎖および分岐異性体が含まれます。EPA 飲料水メソッド 533 および 537.1 にリストされているすべての分析成分が、ドラフトメソッドにも含まれています。サンプルはマトリックスに従って調製・抽出されますが、EPA ドラフトメソッド 1633 の中のメソッドはすべて、弱アニオン交換 (WAX) および炭素クリーナップを使用する SPE を指定しています。

このアプリケーションノートでは、SPE 用に 150 mg、6 mL の Agilent Bond Elut PFAS WAX カートリッジと、クリーナップ用にカーボン S を使用する水性マトリックス用の新しい EPA ドラフトメソッド 1633 (2022 年 6 月) に焦点を当てます。Bond Elut PFAS WAX SPE カートリッジは、PFAS 分析用に特別に設計されており、厳しい規制項目に準拠しています。カートリッジは PFAS に特化した QC テストを受け、最適な清浄度と回収率が保証されています。500 mg、6 mL の Bond Elut PFAS WAX カートリッジは、以前に EPA メソッド 533 および拡張パネルで検討され、優れた結果が得られています。³カーボン S は、炭素含有量とポア構造が最適化された先進的なハイブリッド炭素材料であり、従来の GCB 吸着剤よりも分析成分の回収率とマトリックス除去効率のバランスに優れています。⁴

精度・回収率・検出限界などの初期性能テストでは、Agilent 1290 Infinity II LC システムを Agilent 6470 トリプル四重極 LC/MS (LC/TQ) に接続して使用しました。廃水流出物分析のメソッド性能も評価しました。ドラフトメソッドに厳密に従い、変更は消耗品と機器パラメータのうち許可されたもののみで行いました。サンプルサイズは 500 mL としました。メソッドのマルチラボ検証が完了し、ドラフト段階から出版に移行した後、抽出手順をさらに最適化することが考えられます。

実験方法

消耗品

ラボでメソッドを実行する際の準備をサポートするために、このアプリケーションノートで使用するアジレントの消耗品のリストを付録に記載します。

抽出方法

試薬水と廃水流出物グラブサンプルに対して、EPA ドラフトメソッド 1633 に記載されている水性サンプルの抽出方法を適用しました (図 1)。簡単に述べると、保存されていない 500 mL の水性サンプルにサロゲート (抽出された内部標準 [EIS]) を添加しました。シラン化ガラスウールを充填した Bond Elut PFAS WAX SPE カートリッジを、メタノール性水酸化アンモニウム、続いてギ酸でコンディショニングしました。サンプルをゆっくりとした流速で SPE カートリッジにロードし、試薬水と 1:1 ギ酸/メタノールですすぎました。サンプルボトルをすすぎ、カートリッジを 1 % メタノール性水酸化アンモニウムで溶出しました。溶出液を酢酸で処理し、緩いカーボン S でクリーナップしました。遠心分離後、サンプルをナイロンシリンジフィルターでろ過し、内部標準 (非抽出内部標準 [NIS]) を含むコレクションチューブに入れました。

LC/TQ 機器条件

LC/TQ 分析は、6470 トリプル四重極 LC/TQ に接続された 1290 Infinity II LC システムを使用して実施しました。LC の構成とメソッドパラメータを表 1 に示します。PFAS 専用のディレイカラムをポンプとマルチサンブラの間に配置して、背圧を大幅に上昇させることなく、サンプルバイアルに由来する化合物からバックグラウンドコンタミネーションを分離しました。システムは、Agilent MassHunter Acquisition ソフトウェアによって制御されました。一貫性を保つために、移動相は EPA ドラフトメソッド 1633 に一致させました。ただし、グラジエントは、メソッドで必要な分離を維持しながらスループットを向上させるために単純化しました。MS メソッドパラメータ (表 2) は、Agilent Source Optimizer を使用して最適化しました。ネガティブエレクトロスプレーイオン化モードでのダイナミックマルチプルリアクションモニタリング (dMRM) をデータ取り込みに使用しました。アジレントのトリプル四重極機器の dMRM メソッドは、多成分系の分析の高速 1290 Infinity UHPLC 分離からの非常に狭いピークの正確な定量を可能にします。MRM トランジションの数は、LC 実行中は常に動的に調整され、関連するリテンションタイムウィンドウを持つトランジションのみが選択されます。選択された分析成分のトランジション (付録に記載) は、ドラフトメソッドに記載されているトランジションとほぼ同一でした。データ処理は、QQQ用の MassHunter Quantitative Analysis ソフトウェアバージョン 10.1 で行いました。

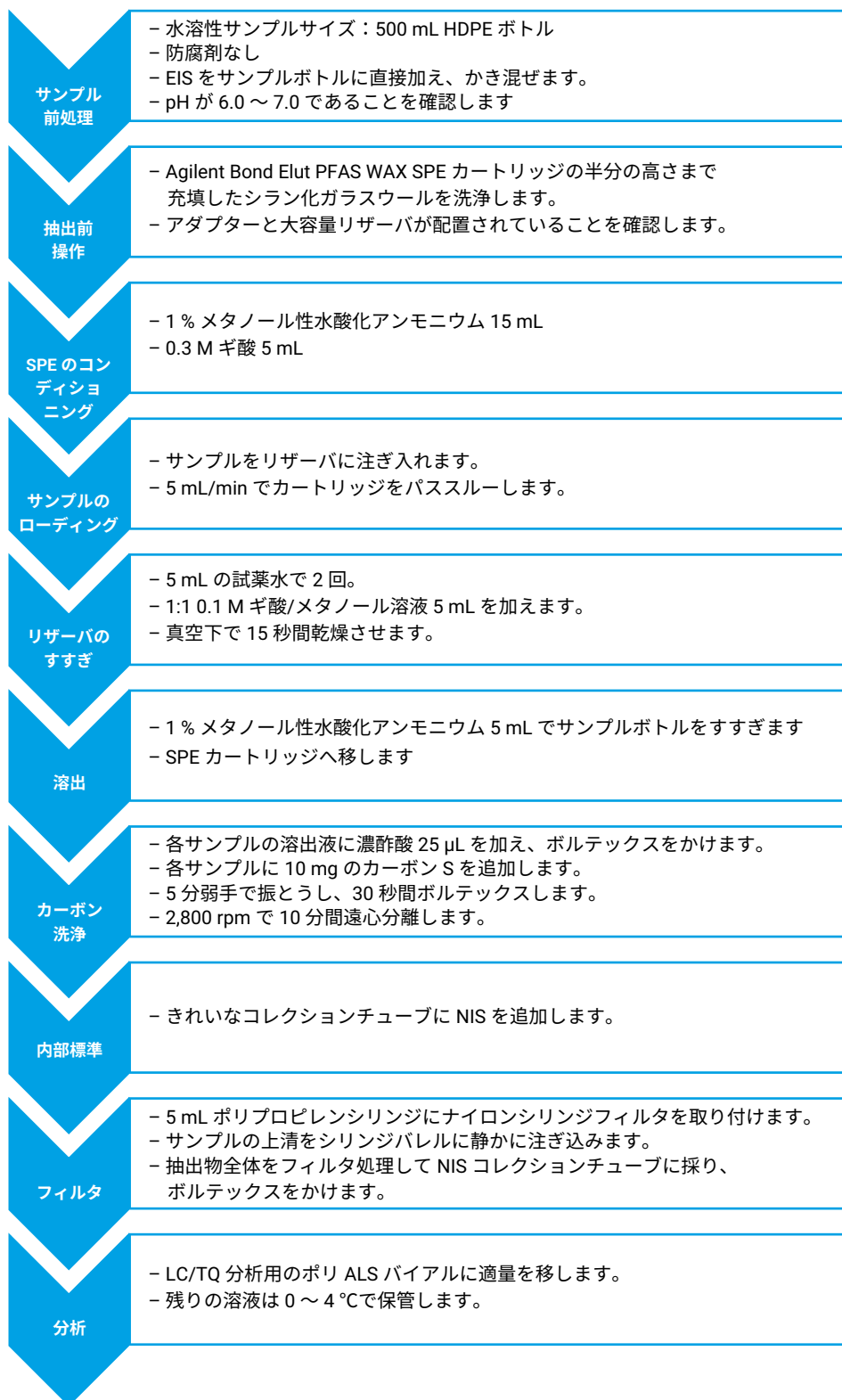


図 1. 抽出方法

標準液

標準混合物は、Wellington Laboratories から購入しました。続いて標準の混合と希釈を行い、分析物の濃度がドラフトメソッドの高キャリブレーション標準の濃度に厳密に従う高キャリブレータ（レベル 10）を調製しました。希釈を繰り返し、ドラフトメソッドの低標準濃度よりも低い最終キャリブレータ濃度になるように調製しました。

結果と考察

キャリブレーション性能

機器の直線性は、ドラフトメソッドのガイドラインに従って確立されており、別の箇所でも説明されています。²簡単に言えば、すべての分析成分で、RSD が 3 % 未満の安定したリテンションタイムと、0.998 を超える優れた R² 値が得られています。分析成分の相対標準誤差 (RSE) は 10 % 未満でした。EPA ドラフトメソッド 1633 では、胆汁酸塩 (TDCA) と PFOS 間のクロマトグラフィーによる分離は少なくとも 1 分なければならないと指定されています。使用した分析条件では、TDCA および PFOS がそれぞれ 5.7 分および 7.1 分で溶出するため、基準を満たしました。

サロゲートの回収率

n = 21 のレプリケート（ラボ試薬ブランク、正確度と精度のスパイク、MDL を決定するための低レベルのスパイク）の試薬水中での抽出サロゲート回収率は、63 ~ 121 % という範囲でした。回収率の RSD も 20 % 未満でした。通常承諾される EPA サロゲート回収率は 50 ~ 150 %、RSD は 20 % 未満なので、十分範囲内です。

表 1. LC 機器条件

パラメータ	設定値
LC	G7120A 高速ポンプ (G7120A)、マルチサンブラ (G7167B)、マルチカラムサーモスタットカラムコンパートメント (G7116B) を装備した Agilent 1290 Infinity II LC
UHPLC ガードカラム	Agilent ZORBAX Eclipse Plus C18、2.1 × 5 mm、1.8 μm (部品番号 821725-901)
分析カラム	Agilent ZORBAX Eclipse Plus C18、2.1 × 100 mm、1.8 μm (部品番号 959758-902)
ディレイカラム	Agilent InfinityLab PFC ディレイカラム、4.6 × 30 mm (部品番号 5062-8100)
カラム温度	40 °C
注入量	5 μL
移動相	A) 95 % 水 (LC グレード)、5 % アセトニトリル溶液中 2 mM 酢酸アンモニウム B) アセトニトリル (LC グレード)
グラジエント流量	0.4 mL/分
グラジエント	時間 (分) % B 0.0 2 0.2 2 10 95
ストップタイム	12.2 分
ポストタイム	2.0 分

表 2. TQ 機器条件

パラメータ	設定値
MS	Agilent Jet Stream ESI ソース搭載の Agilent 6470B LC/TQ
イオン源パラメータ	
ガス温度	230 °C
ガス流量	6 L/分
ネブライザ	20 psi
シースガス温度	355 °C
シースガス流量	10 L/分
キャピラリー電圧 (負)	2,500 V
ノズル電圧 (負)	0 V

メソッド検出下限

メソッド検出限界 (MDL) は、40 CFR Part 136、付録 B の MDL 手順に従って決定しました。Bond Elut PFAS WAX SPE を用いて低レベルのスパイクおよびラボ試薬ブランク (LRB) の抽出後に達成された初期 MDL は、ドラフトメソッドに記載されているものと同等またはそれより優れていました。詳細については表 3 を参照してください。

正確度と精度

中間レベルの濃度での正確度と精度の抽出の検討では、優れた再現性が得られました。すべての RSD は 9 % 未満で、回収率 (精度として表され、図 2 に示されています) は 70 ~ 116 % の範囲でした。

表 3. Agilent Bond Elut PFAS WAX SPE による微量スパイクおよびラボ試薬ブランク (LRB) の抽出により達成された初期のメソッド検出限界

分析成分	Bond Elut PFAS WAX 初期 MDL (ng/L)	EPA ドラフト 1633 Aq.MDL (ng/L)	分析成分	Bond Elut PFAS WAX 初期 MDL (ng/L)	EPA ドラフト 1633 Aq.MDL (ng/L)
PFBA	0.38	0.33	6:2FTS	0.58	3.973
PFPeA	0.71	0.196	8:2FTS	0.84	1.566
PFHxA	0.09	0.318	PFOSA	0.20	0.227
PFHpA	0.19	0.221	NMeFOSA	0.09	0.196
PFOA	0.23	0.302	NEtFOSA	0.17	0.585
PFNA	0.15	0.221	NMeFOSAA	0.27	0.586
PFDA	0.15	0.333	NEtFOSAA	0.34	0.324
PFUnA	0.13	0.264	NMeFOSE	1.41	1.191
PFDoA	0.29	0.379	NEtFOSE	1.97	1.022
PFTTrDA	0.33	0.238	HFPO-DA	0.60	0.406
PFTeDA	0.38	0.264	ADONA	0.26	0.779
PFBS	0.12	0.245	PFMPA	0.36	0.137
PFPeS	0.15	0.204	PFMBA	0.13	0.177
PFHxS	0.26	0.217	NFDHA	0.38	0.117
PFHpS	0.21	0.137	9Cl-PF3ONS	0.52	1.384
PFOS	0.39	0.327	11Cl-PF3OUdS	1.38	0.871
PFNS	0.15	0.303	PFEESA	0.26	0.819
PFDS	0.23	0.334	3:3 FTCA	0.82	0.721
PFDoS	0.44	0.179	5:3 FTCA	3.77	5.066
4:2FTS	0.43	2.281	7:3 FTCA	3.27	5.942

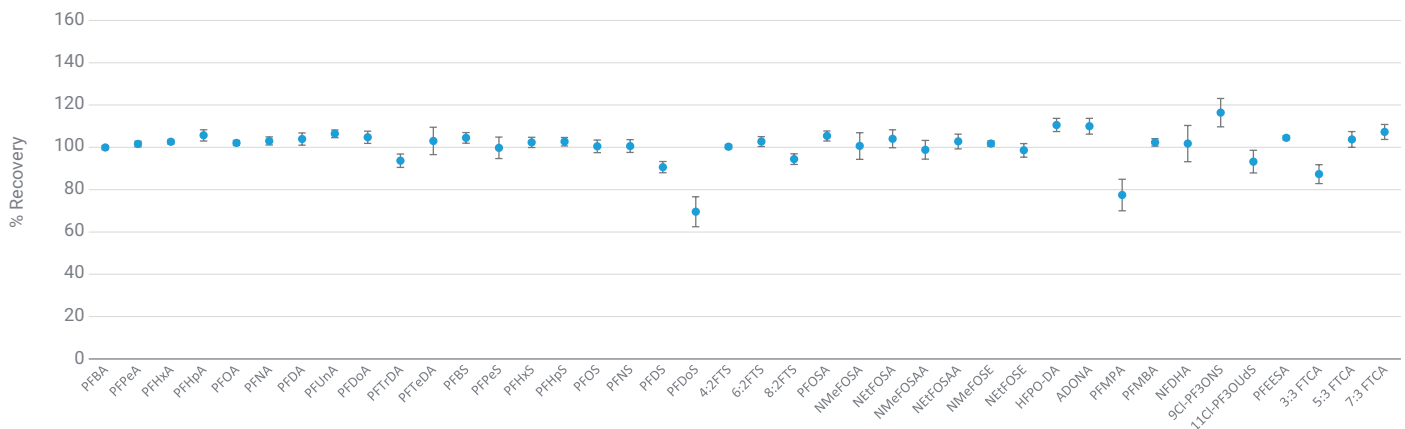


図 2. Agilent Bond Elut PFAS WAX SPE カートリッジを使用した試薬水中の正確度と精度によって実証された性能

排水流出物のサンプル

EPA ドラフトメソッド 1633 と Bond Elut PFAS WAX SPE カートリッジの実際の適用性を実証するために、3 種類の個別の廃水流出サンプルの繰り返し分析を行いました。図 3 に示すように、各サンプルで複数の PFAS が検出されました。パーフルオロアルキルカルボン酸が検出された最も一般的なグループであり、PFHxA が一貫して酸の中で最も高い濃度の成分でした。また、6:2 FTS (フルオロテロマースルホン酸塩) が、すべてのサンプルで最大 34 ng/L の濃度で検出されました。

3 つの廃水流出物サンプルのそれぞれのレプリケート (3 つまたは 4 つ) にターゲット分析成分をスパイクし、メソッド手順に従って抽出しました。スパイクされていない廃水サンプルの平均バックグラウンドレベルを、スパイクさ

れたサンプルの測定濃度から差し引き、回収率 (精度) を計算しました。表 4 は、スパイクされた濃度、平均回収率 (精度)、およびバッチの回収率の範囲を示しています。

廃水流出物のサロゲート回収率 (n = 24) は、概ね 50 ~ 150 % で、再現性は良好でした。ただし PFAS 抽出サロゲートの FTS クラスは、マトリックスで一貫して高い回収率を示し、マトリックス効果を正確に補正するためには、適合および標識された内部標準が重要であることを示しています。

このメソッドはまだドラフト段階であり、すべての分析成分に同位体希釈類似体がある訳ではなく、マトリックス向上や干渉に関する問題が生じることに注意してください。廃水流出物からの回収率が低いまたは高いことが見出された分析成分はすべて、同位体標識された類似体を含まない成分でした。類似体を含まな

いものについては、抽出された内部標準を慎重に検討する必要があります。例えば、PFDS と PFDoS はどちらも EPA ドラフトメソッドで ¹³C₈-PFOS を使用しますが、最も近い溶出 (リテンションタイム) のカルボン酸類似体 (PFDS の場合は ¹³C₂-PFDoA、PFDoS の場合は ¹³C₂-PFTeDA) でより適切に表せる可能性があります。表 4 に示すデータでは、酸類似体を使用すると、PFDS と PFDoS の平均回収率がそれぞれ 84 % と 85 % に向上します。最後に、NFDHA は、遷移 295 & 201 に対してさまざまな程度のマトリックス効果があることがわかり、その結果、回収率が低くなりました。295 & 85 トランジションを使用して定量した場合、平均回収率は 105 % になります。

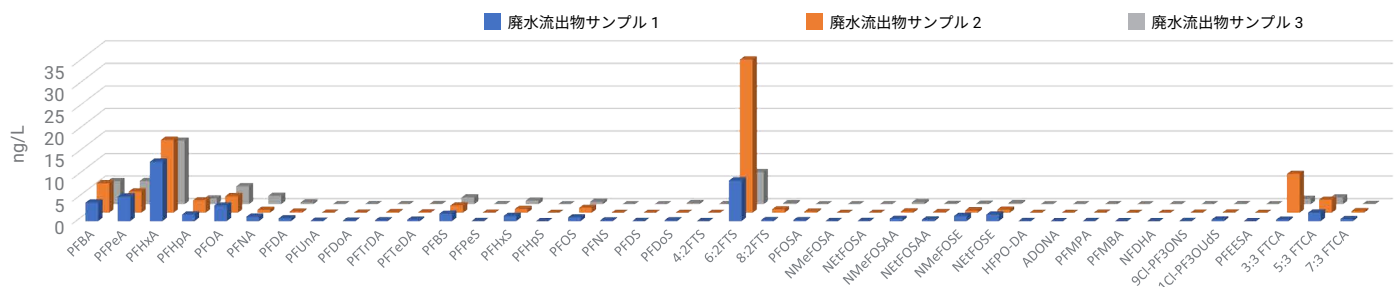


図 3. 廃水流出物で検出されたPFAS

表 4. 廃水サンプル中の PFAS のスパイク濃度、平均回収率（精度）、および回収率の範囲

分析成分	スパイク濃度 (ng/L)	平均精度 (回収率)	平均回収率範囲の低値	平均回収率範囲の高値
PFBA	50	91 %	86 %	99 %
PFPeA	25	88 %	84 %	95 %
PFHxA	12.5	93 %	85 %	103 %
PFHpA	12.5	97 %	91 %	104 %
PFOA	12.5	96 %	87 %	107 %
PFNA	12.5	94 %	85 %	101 %
PFDA	12.5	96 %	90 %	103 %
PFUnA	12.5	95 %	90 %	101 %
PFDoA	12.5	92 %	87 %	95 %
PFTTrDA	12.5	90 %	85 %	96 %
PFTTeDA	12.5	96 %	88 %	103 %
PFBS	12.5	104 %	92 %	114 %
PFPeS	12.5	92 %	86 %	98 %
PFHxS	12.5	91 %	88 %	94 %
PFHpS	12.5	99 %	90 %	105 %
PFOS	12.5	97 %	84 %	105 %
PFNS	12.5	82 %	76 %	87 %
PFDS	12.5	70 %	65 %	76 %
PFDoS	12.5	48 %	45 %	50 %
4:2FTS	50	95 %	90 %	104 %
6:2FTS	50	95 %	92 %	99 %
8:2FTS	50	89 %	77 %	105 %
PFOSA	12.5	96 %	88 %	103 %
NMeFOSA	12.5	89 %	83 %	93 %
NEtFOSA	12.5	92 %	81 %	99 %
NMeFOSAA	12.5	105 %	100 %	115 %
NEtFOSAA	12.5	96 %	92 %	103 %
NMeFOSE	125	92 %	86 %	101 %
NEtFOSE	125	93 %	89 %	98 %
HFPO-DA	50	109 %	90 %	120 %
ADONA	50	111 %	91 %	122 %
PFMPA	25	103 %	95 %	111 %
PFMBA	25	102 %	93 %	106 %
NFDHA	25	48 %	39 %	54 %
9Cl-PF3ONS	50	100 %	82 %	109 %
11Cl-PF3OUdS	50	74 %	61 %	84 %
PFEESA	25	96 %	93 %	101 %
3:3 FTCA	50	114 %	97 %	127 %
5:3 FTCA	250	153 %	136 %	169 %
7:3 FTCA	250	141 %	117 %	156 %

結論

このアプリケーションノートでは、EPA ドラフトメソッド 1633 に従って得られた実験性能の例を紹介しました。性能評価は、Agilent Bond Elut PFAS WAX SPE カートリッジを使用した、水性サンプル中の抽出された 25 種類の内部標準（サロゲート）および 40 種類のターゲット PFAS の分析に関して行いました。ドラフトメソッドの検証は、6470 LC/TQ に接続された Agilent 1290 Infinity II LC により、最適化された固相サンプル抽出と分析を使用して行いました。中間濃度レベルの正確度と精度は、RSD が 9 % 未満、回収率が 70 ~ 130 % という優れた性能を示しました。初期のメソッド検出限界（MDL）は、ドラフトメソッドの検出限界と同等でした。廃水流出物で検出された PFAS の例を説明し、すべての分析成分をスパイクした廃水流出物中のサロゲート分析成分とターゲット分析成分の両者の回収率を実証しました。

付録

EPA ドラフトメソッド 1633 で、 このアプリケーションノートで使用した アジレントの消耗品

消耗品の推奨事項については、PFAS 消耗品
注文ガイド (5994-2357JAJP) を参照してく
ださい。

説明	仕様	部品番号
PFC ディレイカラム	Agilent InfinityLab PFC ディレイカラム4.6 × 30 mm	5062-8100
UHPLC ガードカラム	Agilent ZORBAX Eclipse Plus C18, 2.1 × 5 mm, 1.8 μm	821725-901
分析カラム	Agilent ZORBAX Eclipse Plus C18, 2.1 × 100 mm, 1.8 μm	959758-902
オートサンブラバイアル	バイアル、スクリュー、2 mL、ポリプロピレン、PFAS 認定済み、100 個/箱	5191-8150
オートサンブラキャップ	キャップ、9 mm、スクリュー、透明、薄膜ポリプロピレン/シリコンセパタム、PFAS 認定済み、100 個/箱	5191-8151
SPE カートリッジ	Bond Elut PFAS WAX SPE カートリッジ、150 mg、6 mL、30 個/箱	5610-2150
ガラスウール	ガラスウール、シラン処理、50g	8500-1572
遠心分離チューブ	遠心分離チューブおよびキャップ、15 mL、50 個/箱	5610-2039
カーボン	カーボン S パルク、25 g ボトル	5610-2093
シリンジ	5 mL ディスポーザブルシリンジ、100 個/箱	9301-6476
ナイロンフィルタ	Agilent Captiva プレミアムシリンジフィルタ、ナイロン、25 mm、0.2 μm、100 個/箱	5190-5092

モニタリングした dMRM トランジション

化合物グループ	化合物名	プリカーサ イオン	プロダクト イオン	RT (分)	フラグメンタ	コリジョン エネルギー	セル加速電圧
酸	PFBA	213	168.9	3.5	60	8	2
酸	PFPeA	263	219	4.5	72	4	2
酸	PFHxA	313	268.9	5.2	70	8	2
酸	PFHxA	313	119	5.2	70	18	2
酸	PFHpA	362.9	319	5.7	72	4	2
酸	PFHpA	362.9	169	5.7	72	14	2
酸	PFOA	413	369	6.2	69	4	2
酸	PFOA	413	169	6.2	69	12	2
酸	PFNA	463	419	6.6	66	4	2
酸	PFNA	463	219	6.6	66	17	2
酸	PFDA	513	469	7.0	72	12	2
酸	PFDA	513	219	7.0	72	20	2
酸	PFUnA	563	519	7.5	100	12	2
酸	PFUnA	563	269	7.5	100	20	2
酸	PFDoA	613	569	7.9	100	8	2
酸	PFDoA	613	319	7.9	100	20	2
酸	PFTTrDA	663	619	8.2	100	12	2
酸	PFTTrDA	663	169	8.2	100	32	2
酸	PFTeDA	712.9	669	8.6	100	12	2
酸	PFTeDA	712.9	169	8.6	100	32	2
エーテルスルホン酸	PFEESA	314.9	134.9	5.6	110	24	2
エーテルスルホン酸	PFEESA	314.9	83	5.6	124	20	5
エーテルスルホン酸	PFEESA	314.9	69	5.6	110	60	2
エーテルスルホン酸	9Cl-PF3ONS	530.9	350.9	7.6	145	28	2
エーテルスルホン酸	9Cl-PF3ONS	530.9	83	7.6	145	32	2
エーテルスルホン酸	11Cl-PF3OUdS	630.9	83	8.4	160	32	2
エーテルスルホン酸	11Cl-PF3OUdS	630.9	450.9	8.4	165	32	2
フルオロテロマーカルボン酸	3-3 FTCA	241	177	4.2	74	4	3
フルオロテロマーカルボン酸	3-3 FTCA	241	117	4.2	74	44	3
フルオロテロマーカルボン酸	5-3 FTCA	341	237	5.6	84	12	3

化合物グループ	化合物名	プリカーサ イオン	プロダクト イオン	RT (分)	フラグメンタ	コリジョン エネルギー	セル加速電圧
フルオロテロマーカルボン酸	5-3 FTCA	341	217	5.6	84	24	3
フルオロテロマーカルボン酸	7-3 FTCA	441	337	6.6	76	12	3
フルオロテロマーカルボン酸	7-3 FTCA	441	317	6.6	76	24	3
FTS	4:2FTS	327	306.9	5.0	125	20	2
FTS	4:2FTS	327	80.9	5.0	125	36	2
FTS	6:2FTS	427	406.8	6.0	125	24	2
FTS	6:2FTS	427	80.9	6.0	125	40	2
FTS	8:2FTS	527	507	6.8	200	30	4
FTS	8:2FTS	527	80.9	6.8	170	40	2
ISTD	13C3-PFBA	216	171.9	3.5	65	8	2
ISTD	13C2-PFHxA	315	270	5.2	70	8	2
ISTD	13C4-PFOA	417	172	6.2	69	12	2
ISTD	18O2-PFHxS	403	83.9	6.4	100	49	2
ISTD	13C5-PFNA	468	423	6.6	66	4	2
ISTD	13C2-PFDA	515	470	7.0	81	4	2
ISTD	13C4-PFOS	503	80	7.3	148	54	2
ISTD	13C4-PFOS	502.9	98.9	7.3	180	48	2
パーフルオロオクタンスルホンアミドエタノール	NMeFOSE	616	59	9.8	82	15	4
パーフルオロオクタンスルホンアミドエタノール	NEtFOSE	630	59	10.1	124	45	4
パーフルオロオクタンスルホンアミド	PFOSA	497.9	478	8.6	150	36	3
パーフルオロオクタンスルホンアミド	PFOSA	497.9	78	8.6	150	36	3
パーフルオロオクタンスルホンアミド	PFOSA	497.9	48	8.6	150	110	3
パーフルオロオクタンスルホンアミド	NMeFOSA	512	219	9.9	156	28	5
パーフルオロオクタンスルホンアミド	NMeFOSA	512	169	9.9	156	32	5
パーフルオロオクタンスルホンアミド	NEtFOSA	526	269	10.3	160	28	5
パーフルオロオクタンスルホンアミド	NEtFOSA	526	219	10.3	160	28	5
パーフルオロオクタンスルホンアミド	NEtFOSA	526	169	10.3	160	28	5
パーフルオロオクタンスルホンアミド酢酸	NMeFOSAA	570	482.9	7.1	150	16	2
パーフルオロオクタンスルホンアミド酢酸	NMeFOSAA	570	419	7.1	150	20	2
パーフルオロオクタンスルホンアミド酢酸	NEtFOSAA	584	526	7.3	100	20	2
パーフルオロオクタンスルホンアミド酢酸	NEtFOSAA	584	419	7.3	100	20	2
ポリフルオロエーテルカルボン酸	PFMPA	229	84.9	4.0	60	12	2
ポリフルオロエーテルカルボン酸	PFMBA	279	235	4.8	80	1	5
ポリフルオロエーテルカルボン酸	PFMBA	279	84.9	4.8	70	12	2
ポリフルオロエーテルカルボン酸	NFDHA	295	201	5.1	75	5	2
ポリフルオロエーテルカルボン酸	NFDHA	295	85	5.1	120	32	5
ポリフルオロエーテルカルボン酸	NFDHA	201	85	5.1	70	15	5
ポリフルオロエーテルカルボン酸	HFPO-DA	285	185	5.4	50	20	5
ポリフルオロエーテルカルボン酸	HFPO-DA	285	169	5.4	50	4	5
ポリフルオロエーテルカルボン酸	ADONA	377	250.9	5.9	80	12	2
ポリフルオロエーテルカルボン酸	ADONA	377	85	5.9	80	36	2
スルホン酸塩	PFBS	298.9	98.9	5.3	100	29	2
スルホン酸塩	PFBS	298.9	80	5.3	100	45	2
スルホン酸塩	PFPeS	348.9	98.9	5.9	135	40	2
スルホン酸塩	PFPeS	348.9	79.9	5.9	135	40	2
スルホン酸塩	PFHxS	398.9	99	6.4	100	45	2

化合物グループ	化合物名	プリカーサ イオン	プロダクト イオン	RT (分)	フラグメンタ	コリジョン エネルギー	セル加速電圧
スルホン酸塩	PFHxS	398.9	80	6.4	100	49	2
スルホン酸塩	PFHpS	448.9	98.7	6.9	100	44	2
スルホン酸塩	PFHpS	448.9	80	6.9	148	50	2
スルホン酸塩	PFOS	498.9	99	7.3	100	50	2
スルホン酸塩	PFOS	498.9	80	7.3	100	50	2
スルホン酸塩	PFNS	548.9	99	7.7	148	52	2
スルホン酸塩	PFNS	548.9	80	7.7	148	56	2
スルホン酸塩	PFDS	598.9	99	8.1	148	56	2
スルホン酸塩	PFDS	598.9	80	8.1	148	60	2
スルホン酸塩	PFDoS	698.9	99	8.8	156	62	2
スルホン酸塩	PFDoS	698.9	80	8.8	156	67	2
サロゲート	13C4-PFBA	217	172	3.5	60	8	2
サロゲート	13C5-PFPeA	268	223	4.5	60	8	2
サロゲート	13C2-4:2FTS	329	309	5.0	125	20	2
サロゲート	13C2-4:2FTS	329	81	5.0	150	32	2
サロゲート	13C5-PFHxA	318	273	5.2	70	8	2
サロゲート	13C5-PFHxA	318	120	5.2	72	24	2
サロゲート	13C3-PFBS	302	99	5.3	130	32	2
サロゲート	13C3-PFBS	302	80	5.3	130	44	2
サロゲート	13C3-HFPO-DA	287	185	5.4	64	20	5
サロゲート	13C3-HFPO-DA	287	169	5.4	64	4	5
サロゲート	13C4-PFHpA	367	322	5.7	72	4	2
サロゲート	13C4-PFHpA	367	169	5.7	72	16	2
サロゲート	13C2-6:2FTS	429	409	6.0	125	24	2
サロゲート	13C2-6:2FTS	429	81	6.0	150	40	2
サロゲート	13C8-PFOA	421	376	6.2	69	4	2
サロゲート	13C8-PFOA	421	172	6.2	72	20	2
サロゲート	13C3-PFHxS	402	99	6.4	156	44	2
サロゲート	13C3-PFHxS	402	80	6.4	100	45	2
サロゲート	13C9-PFNA	472	427	6.6	66	4	2
サロゲート	13C9-PFNA	472	223	6.6	72	16	2
サロゲート	13C2-8:2FTS	529	509	6.8	170	28	2
サロゲート	13C2-8:2FTS	529	81	6.8	200	52	4
サロゲート	13C6-PFDA	519	474	7.0	72	8	2
サロゲート	D3-NMeFOSAA	573.2	419	7.1	150	20	2
サロゲート	D5-NEtFOSAA	589.2	419	7.2	100	20	2
サロゲート	13C8-PFOS	507	99	7.3	148	52	2
サロゲート	13C8-PFOS	507	80	7.3	100	50	2
サロゲート	13C7-PFUnA	570	525	7.5	100	8	2
サロゲート	13C2-PFDoA	615	570	7.9	90	12	2
サロゲート	13C2-PFTeDA	715	670	8.6	90	12	2
サロゲート	13C8-PFOSA	506	78	8.6	150	36	3
サロゲート	D7-NMeFOSE	623.2	59	9.8	82	15	4
サロゲート	D3-NMeFOSA	515	219	9.9	156	28	5
サロゲート	D9-NEtFOSE	639.2	59	10.1	124	45	4
サロゲート	D5-NEtFOSA	531	219	10.2	160	28	5
TDCA	TDCA	498.3	79.9	6.0	165	32	2

参考文献

1. United States Environmental Protection Agency, Department of Water. 2nd Draft Method 1633 Analysis of Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS) in Aqueous, Solid, Biosolids, and Tissue Samples by LC/MS/MS, **2022**.
https://www.epa.gov/system/files/documents/2021-09/method_1633_draft_aug-2021.pdf (accessed April 30, 2022).
2. Hunt, K. *et al.* Analysis of Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS) in Aqueous Samples Per EPA Draft Method 1633 Using the Agilent 6470 Triple Quadrupole Mass Spectrometer, *Agilent Technologies application note*, publication number 5994-4926EN, **2022**.
3. Giardina, M. Determination of Per and Polyfluoroalkyl Substances in Drinking Water Using Agilent Bond Elut PFAS WAX SPE and LC/MS/MS, *Agilent Technologies application note*, publication number 5994-4960EN, **2022**.
4. Giardina, M. Determination of Per and Polyfluoroalkyl Substances in Soils Using Carbon S SPE by LC/MS/MS, *Agilent Technologies application note*, publication number 5994-4770EN, **2022**.

その他のリソース

Bond Elut PFAS WAX カートリッジ :

製品紹介ページ

PFAS 消耗品オーダーガイド :

<https://www.chem-agilent.com/pdf/brochure-PFAS-consumables-5994-2357ja-jp-agilent.pdf>

ホームページ

www.agilent.com/chem/jp

カスタマコンタクトセンタ

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おりません。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。

DE54740787

アジレント・テクノロジー株式会社

© Agilent Technologies, Inc. 2022

Printed in Japan, August 23, 2022

5994-5226JAJP