

Application Note

Phương pháp chiết QuEChERS tách các hợp chất perfluoroalkyl và polyfluoroalkyl từ thực phẩm với độ nhạy cao trên hệ thống XEVO TQ-XS

Kari L. Organtini, Simon Hird, Stuart Adams

Waters Corporation



Tóm tắt

Nguồn nhiễm các hợp chất perfluoroalkyl và polyfluoroalkyl (PFAS) có thể dẫn tới sự phơi nhiễm trong nguồn gốc thực phẩm. Các sản phẩm trồng trọt sử dụng nguồn nước và đất bị nhiễm PFAS có thể dẫn đến sự hấp thu những hợp chất này vào hoa quả cũng như rau củ. Vì vậy, việc kiểm soát sự tồn tại PFAS có trong những sản phẩm này là cần thiết. Trong báo cáo này, phương pháp FDA C-010.01, dựa trên phương pháp chiết QuEChERS được dùng để chiết PFAS, sử dụng chiết pha rắn phân tán (dSPE) DisQuE, sau đó đem phân tích theo phương pháp LC-MS/MS sử dụng hệ ACQUITY UPLC I-Class PLUS ghép nối XEVO TQ-XS. Phương pháp được đánh giá trên năm loại 5 sản phẩm khác nhau là xà lách, dâu tây, nam việt quất, cà rốt và khoai tây. Với sự thay đổi nhỏ với phương pháp của FDA, hướng tiếp cận này trong việc phân tích PFAS tỏ ra chính xác và mạnh mẽ đối với lớp 30 hợp chất PFAS khác nhau.

Lợi ích

- Quy trình chiết PFAS ra khỏi thực phẩm tiết kiệm thời gian và đơn giản, sử dụng phương pháp chiết QuEChERS và làm sạch bằng dSPE.
- Phương pháp phát hiện PFAS trên hệ thống XEVO TQ-XS cho độ nhạy cao, phát hiện được ở mức nồng độ dưới ng/g (ppb), phù hợp với báo cáo của EFSA và FDA.
- Cho kết quả đáng tin cậy với việc sử dụng kit PFAS với sự thay đổi hệ thống LC nhằm cô lập những chất có thể gây nhiễm bẩn hệ thống cũng như dung môi.

Giới thiệu

Ảnh hưởng tới môi trường của các hợp chất perfluoroalkyl và polyfluoroalkyl (PFAS) đã được biết đến vì sự phổ biến của chúng trong sản phẩm hàng ngày. Và các vấn đề môi trường ảnh hưởng tới nguồn thực phẩm của chúng ta.

Trong các sản phẩm nông nghiệp, PFAS ảnh hưởng lên nước và đất để tưới và những loại cây này có thể bị phơi nhiễm. Nghiên cứu chỉ ra rằng thực vật có hấp thu PFAS, riêng với PFAS chuỗi ngắn như acid perfluorobutanoic (PFBA) và acid perfluoropentanoic (PFPeA) trong bộ phận dùng làm thực phẩm và nhiều chất khác có trong rễ và thân cây.^{1,2} Nước dùng trong tưới tiêu thường là nước sinh hoạt hoặc nước ngầm, nguồn phơi nhiễm có thể đến từ môi trường (chất thải công nghiệp sản xuất, bột cứu hỏa, nước từ các khu xử lý rác thải.³ Ô nhiễm đất có cơ chế tương tự, nhưng việc dùng các sản phẩm sau khi xử lý nước làm phân bón là mối quan tâm chính trong việc phơi nhiễm trong trồng trọt.⁴

Mặc dù nhiều quốc gia đã ban hành quy định về giới hạn PFAS trong nước, giới hạn PFAS trong sản phẩm sau xử lý nước và thực phẩm vẫn chưa có văn bản quy định. Cơ quan An toàn thực phẩm Châu Âu (EFSA) đã nghiên cứu và công bố nguy cơ ảnh hưởng tới sức khỏe con người bởi PFAS trong thực phẩm. Công bố mới nhất vào năm 2020, chỉ ra rằng 27 loại PFAS tồn tại nhiều nhất là ở trong cá, hoa quả và trứng.⁵ Dữ liệu có trong nghiên cứu này có được nhờ sử dụng nhiều kỹ thuật chiết và phân tích khác nhau. Cục Quản lý Thực phẩm và Dược phẩm Hoa Kỳ (FDA) kiểm soát lượng chất gây ô nhiễm bằng phương pháp nghiên cứu tổng thể khẩu phần (Total Diet Study, TDS).⁶ Để có thể bao hàm PFAS trong nghiên cứu này, họ đã xây dựng và thẩm định phương pháp chiết PFAS trong thực phẩm.⁷ Phương pháp này (FDA C-010.01)⁸ sử dụng phương pháp chiết QuEChERS, tiếp theo là làm sạch bằng chiết pha rắn phân tán (dSPE).

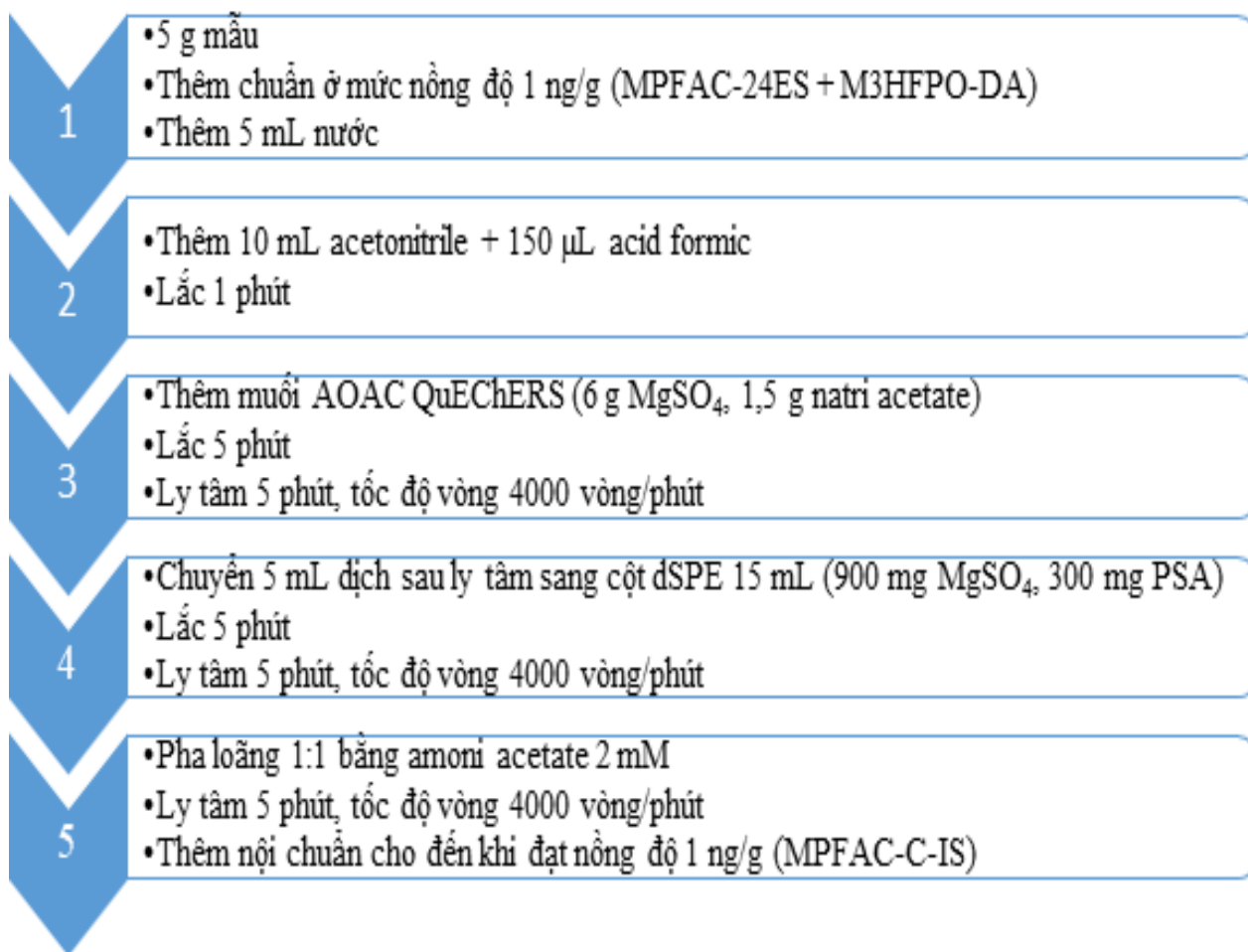
QuEChERS là kỹ thuật chiết được sử dụng rộng rãi để chiết thuốc trừ sâu khỏi thực phẩm và được áp dụng cho cả những chất gây ô nhiễm khác. Kỹ thuật này sử dụng muối và acetonitrile để chiết chất quan tâm bằng cơ chế tạo kết tủa bằng muối và tách pha. Kỹ thuật chiết nhanh và đơn giản này được sử dụng để chiết PFAS từ nhiều loại sản phẩm khác nhau, sử dụng hệ thống ACQUITY UPLC I-Class PLUS ghép nối XEVO TQ-XS.

Thí nghiệm

Xử lý mẫu

Mẫu được thu thập ngoài thị trường. Dâu tây, nam việt quất, xà lách, cà rốt và khoai tây được sử dụng trong nghiên cứu này. Bộ phận ăn được của từng loại được đem đông nhất bằng máy xay. Mẫu được bảo quản trong tủ đông (-20 °C) và rã đông trong tủ lạnh (4 °C) qua đêm trước khi chiết.

5 g mỗi loại mẫu được chiết với muối chiết DisQuE AOAC QuEChERS. 20 chất chuẩn chứa MPFAC-24ES và M3HFPO (Wellington Laboratories) chứa đồng vị được thêm vào 5 g mẫu ở mức nồng độ 1 ng/g. Quy trình chiết QuEChERS và làm sạch bằng dSPE được thể hiện trong hình 1. Chất nội chuẩn MPFAC-C-IS được thêm vào mỗi mẫu trước khi tiêm vào máy sao cho nồng độ đạt 1 ng/g (0,5 ng/mL với vial). Sau đó đem lắc với hệ thống SPEX Sample Prep Geno/Grinder. Chất thêm chuẩn dùng trong pha loãng đồng vị được dùng để tính nồng độ PFAS âm. Chất nội chuẩn, có mặt sau khi chiết, điều chỉnh chuẩn thay thế cho bất kỳ thay đổi nào trong khi tiêm.



Hình 1: Quy trình chiết QuEChERS để chiết PFAS từ mẫu thực phẩm, sử dụng muối DisQuE AOAC (p/n: 186006812 và cột chiết dSPE (p/n: 186008077).

Các dung dịch chuẩn được pha trong khoảng nồng độ 0,01 ng/mL đến 5 ng/mL (tương đương 0,02 - 10 ng/g). Với sự có mặt của chất thêm chuẩn và nội chuẩn, loại bỏ ảnh hưởng nền mẫu là không cần thiết, nhưng cũng có thể được sử dụng khi sử dụng phương pháp pha loãng đồng vị.

Điều kiện của phương pháp

Điều kiện LC

Hệ thống LC:

Hệ ACQUITY UPLC I-Class PLUS FTN và kit phân tích PFAS.

Vial:

Vial tự động tiêm làm bằng nhựa polypropylene, nắp bằng nhựa polyethylene

Cột sắc ký	ACQUITY UPLC BEH C ₁₈ 2.1 x 100 mm, 1.7 μm
Nhiệt độ cột	35 °C
Nhiệt độ mẫu	4 °C
Thể tích tiêm	10 μL
Tốc độ dòng	0.3 mL/phút
Kênh A	Nước + amoni acetate 2 mM
Kênh B	Methanol + amoni acetate 2 mM

Chương trình gradient

Thời gian (phút)	%A	%B
0	95	5
1	75	25
6	50	50
13	15	85
14	5	95
17	5	95
18	95	5
22	95	5

Điều kiện khối phổ

Hệ thống khối phổ

Xevo TQ-XS

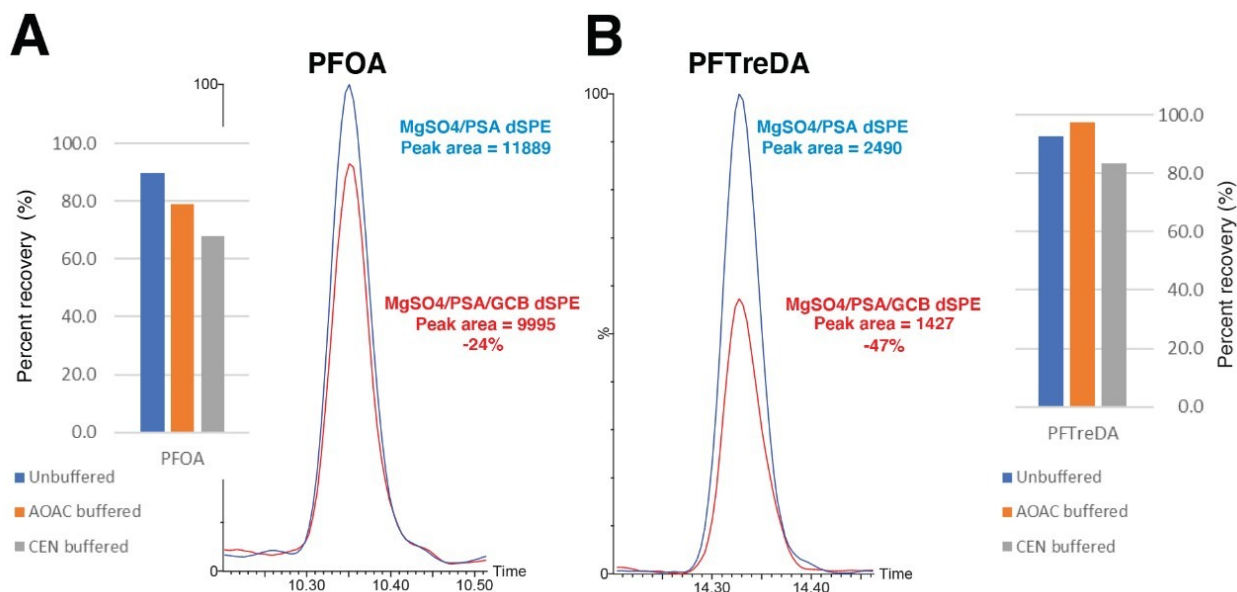
Chế độ ion hóa	ESI-
Thế mao quản	0,50 kV
Nhiệt độ desolvat	350°C
Tốc độ desolvat	900 L/h
Tốc độ cone	150 L/h
Phương pháp MS	Xem Phụ lục

Quản lý dữ liệu

Phần mềm sắc ký	MassLynx v4.2
Phần mềm MS	MassLynx v4.2
Dữ liệu	MassLynx v4.2 with TargetLynx 4.2

Những thay đổi với phương pháp chuẩn của FDA

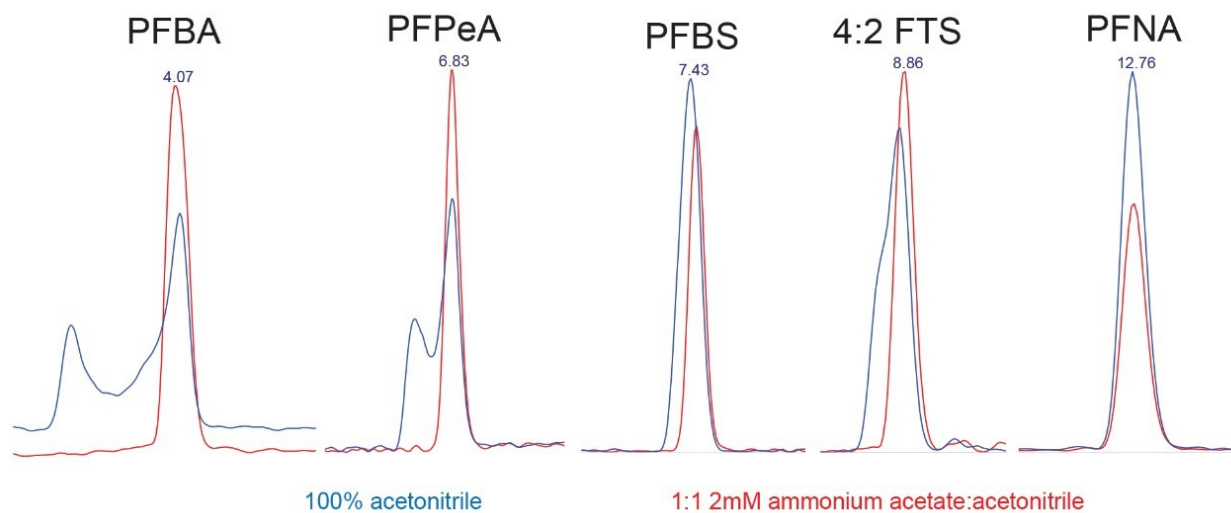
Kỹ thuật QuEChERS của FDA không sử dụng muối có khả năng tạo đệm. Những muối không tạo đệm ($MgSO_4$ và NaCl) được so sánh với hai phương pháp sử dụng muối tạo đệm (AOAC và CEN)^{9,10} để xác định điều kiện chiết PFAS hiệu quả nhất đối với nền mẫu nam việt quất. Hình 2 thể hiện độ thu hồi khi sử dụng ba phương pháp. Có sự thay đổi đối với từng hợp chất, nhưng nói chung ba hỗn hợp muối đều chiết PFAS với hiệu quả tương tự nhau và phương pháp AOAC được lựa chọn.



Hình 2: Đánh giá sự sai khác khi sử dụng các hỗn hợp muối QuEChERS qua độ thu hồi và hiệu quả khi làm sạch bằng dSPE có sử dụng GCB qua peak chồng. (A): PFOA; (B): PFTreDA

Chất hấp thu trong dSPE được đánh giá, tập trung vào lượng carbon đen được graphit hóa (GCB) thêm vào. Trong phép so sánh này, phần còn lại của chất hấp thu được giữ cố định, sử dụng 900 MgSO₄ và 300 PSA (với mỗi cột 15 mL). Cấu hình này được kiểm tra có và không có 150 mg GCB vì GCB được biết đến là chất hấp phụ mạnh, có thể làm giảm độ thu hồi của một số hợp chất. Các peak chồng lán ở hình 2 thể hiện ảnh hưởng khi sử dụng và không sử dụng GCB lên peak. Thông số peak (và độ thu hồi) giảm khi sử dụng GCB. Hiệu ứng này tăng khi độ dài liên kết C-F tăng. Vì vậy, GCB không được sử dụng trong phương pháp làm sạch bằng dSPE.

Thay đổi cuối cùng với phương pháp của FDA là thêm bước pha loãng trước khi phân tích bằng LC-MS/MS. Điều này giúp cải thiện hình dáng peak của hợp chất PFAS được rửa giải sớm, khi tiêm trong 100% acetonitrile sẽ gây ra peak bị chệch và chới với các hợp chất như PFBA, PFPeA và 4:2 FTS. Hình 3 cho thấy tác dụng của bước pha loãng với các chất rửa giải ra sớm (VD: PFNA), nó không gây ảnh hưởng không tốt một cách rõ ràng.



Hình 3: Hình dạng peak khi không qua pha lỏng (xanh) và qua pha lỏng (đỏ)

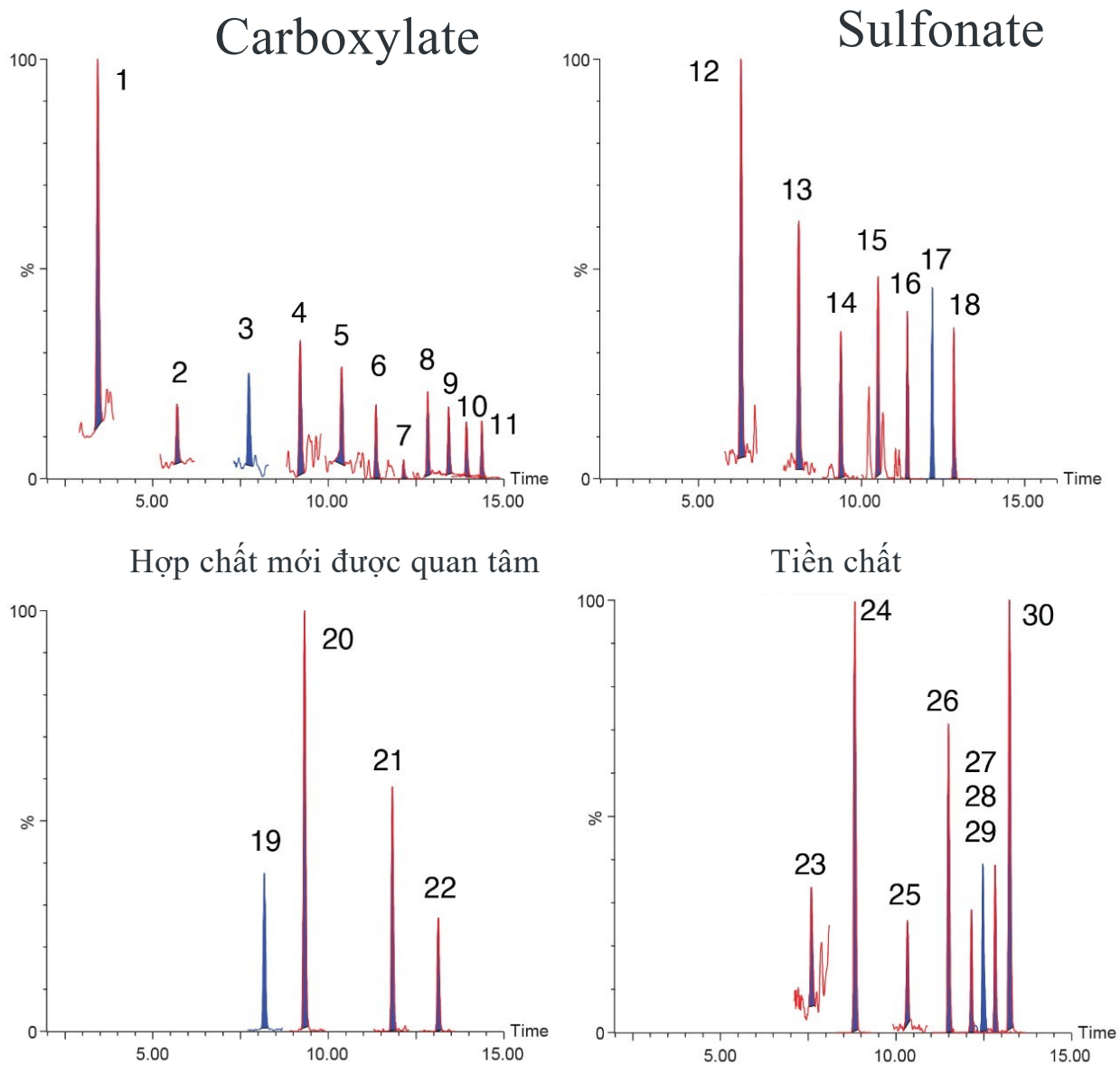
Kết quả, thảo luận

Phương pháp của FDA mới chỉ thẩm định trên nền mẫu rau xà lách. Nghiên cứu này đã mở rộng với 5 loại mẫu khác nhau, thể hiện trong bảng 1. Số lượng chất phân tích tăng từ 16 trong phương pháp của FDA lên đến 30 hợp chất PFAS, trong đó có: carboxylate: C₄ - C₁₄; sulfonate: C₄ - C₁₀; các hợp chất mới được quan tâm: GenX, ADONA, 9Cl-PF3ONS, 11Cl-PF3OUs; các tiền chất: FBSA, FHxSA, FOSA, NMeFOSAA, NEtFOSAA, 4:2 FTS, 6:2 FTS, 8:2 FTS.

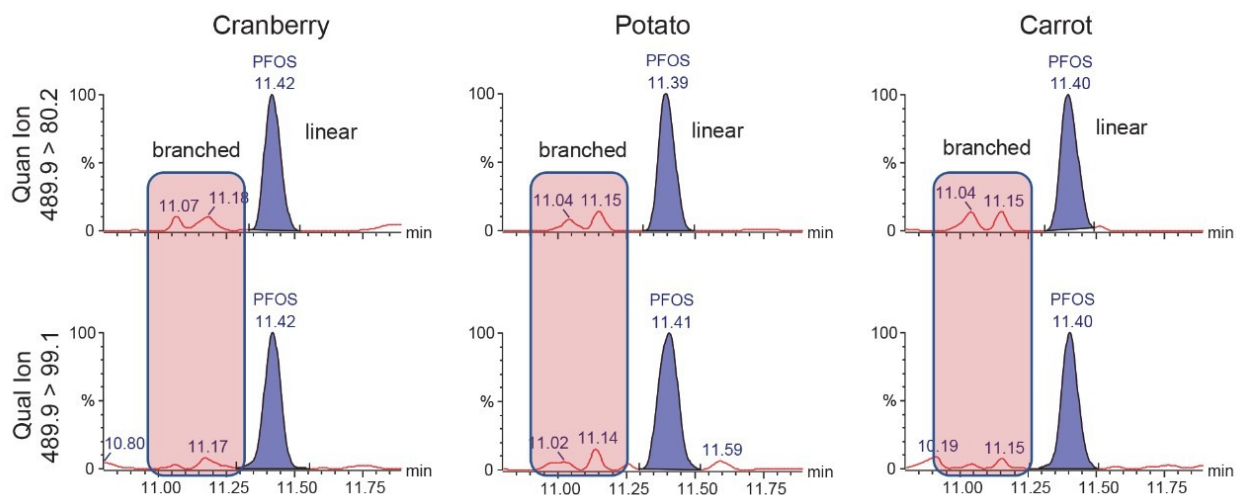
Mẫu	Tính chất mẫu	Nồng độ thêm chuẩn (ng/g)	Carboxylate	Sulfonate	Hợp chất mới được quan tâm	Tiền chất
Xà lách	Giàu nước	0,1	95 – 118 (9,4)	78 – 118 (17)	108 – 121 (12)	87 – 135 (5,7)
		1,0	80 – 90 (4,2)	92 – 101 (4,4)	86 – 95 (5,4)	69 – 99 (3,0)
		5	84 – 95 (4,9)	99 – 104 (5,4)	94 – 103 (6,1)	82 – 108 (6,2)
Khoai tây	Giàu tinh bột	0,1	72 – 121 (7,0)	95 – 111 (12)	95 – 104 (10)	81 – 110 (10)
		1,0	77 – 93 (6,1)	92 – 102 (5,0)	85 – 96 (6,5)	68 – 103 (3,8)
		5	71 – 84 (4,0)	76 – 83 (3,5)	74 – 85 (4,6)	62 – 85 (4,1)
Cà rốt	Nghèo nước	0,1	78 – 132 (6,6)	94 – 110 (12)	90 – 101 (9,5)	94 – 108 (8,9)
		1,0	79 – 98 (6,9)	91 – 103 (5,7)	88 – 106 (6,2)	79 – 102 (5,0)
		5	75 – 89 (8,0)	80 – 87 (4,0)	77 – 86 (5,6)	70 – 89 (4,5)
Dâu tây	Giàu đường	0,1	89 – 110 (10)	89 – 118 (7,9)	100 – 111 (14)	104 – 128 (6,3)
		1,0	82 – 98 (3,2)	92 – 98 (4,2)	86 – 101 (5,6)	75 – 104 (3,0)
		5	90 – 99 (7,4)	99 – 105 (6,5)	95 – 105 (7,3)	86 – 105 (7,3)
Nam việt quất	Giàu acid và đường	0,1	85 – 99 (8,6)	86 – 99 (11)	87 – 102 (19)	83 – 106 (8,1)
		1,0	85 – 101 (8,3)	95 – 103 (5,6)	91 – 101 (8,5)	80 – 101 (4,8)
		5	65 – 93 (5,4)	80 – 89 (2,7)	79 – 93 (5,1)	70 – 89 (3,3)

Bảng 1: Khoảng độ thu hồi (%) trong từng loại nền mẫu khác nhau với ba mức nồng độ thêm chuẩn, $n = 5$ với từng mức nồng độ. (n) là độ lệch chuẩn tương đối trung bình.

5 mẫu từ cùng một nền mẫu được thêm chuẩn ở 3 mức nồng độ: 0,1 ng/g, 1,0 ng/g và 5 ng/g. Sắc ký đồ vết ion của từng hợp chất PFAS trước khi thêm chuẩn với khoai tây ở mức nồng độ 0,1 ng/g thể hiện ở hình 4. Mặt khác, các đồng phân phân nhánh và đồng phân mạch thẳng của PFHxS, PFOS, NMeFOSAA và NETFOSAA được phát hiện trong nền mẫu, thể hiện ở hình 5 cho PFOS trong nền mẫu ở mức nồng độ 0,05 ng/g.

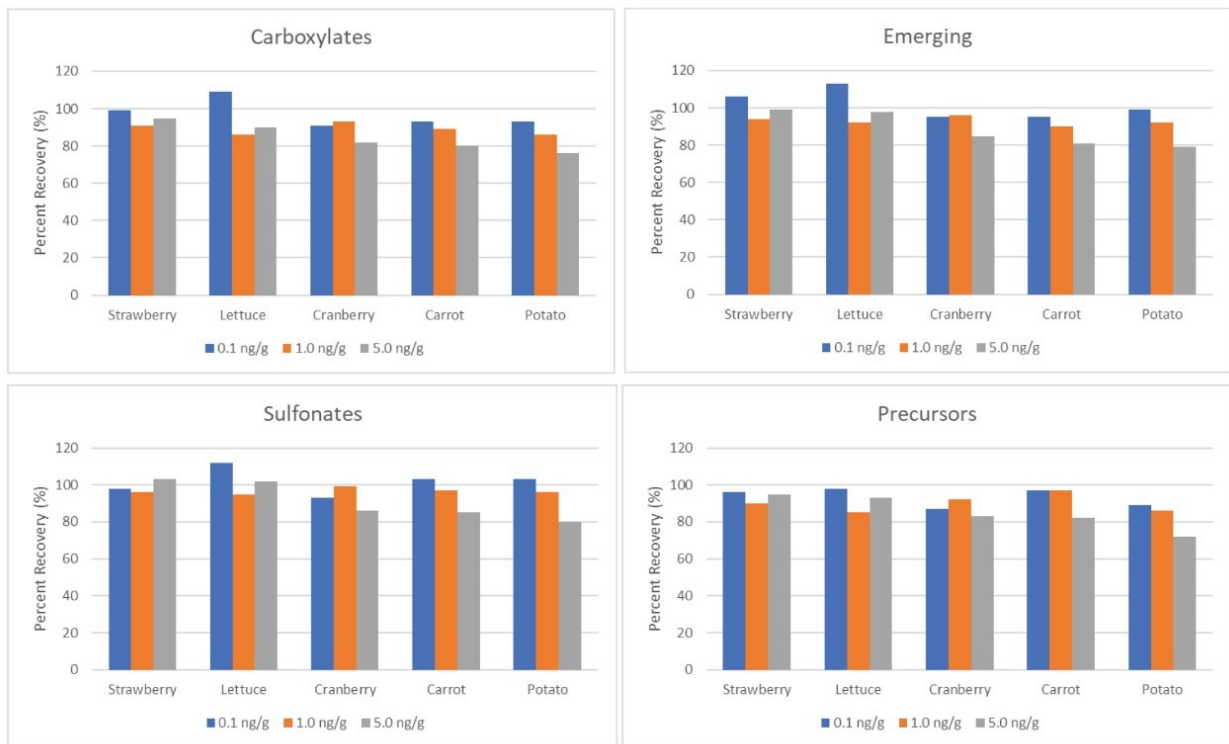


Hình 4: Sắc ký đồ định lượng PFAS trong khoai tây khi thêm chuẩn 0,1 ng/g. Danh sách các chất có trong sắc ký đồ có trong phụ lục



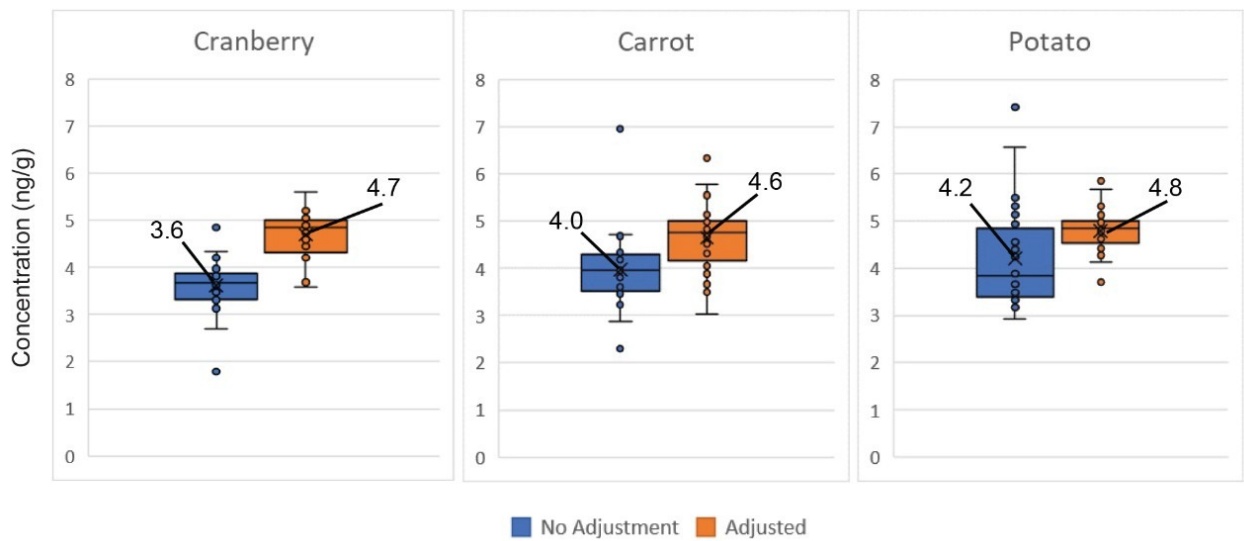
Hình 5: Sự phát hiện đồng phân phân nhánh và mạch thẳng của PFOS tại mức nồng độ 0,05 ng/g với nền mẫu nam việt quất, khoai tây và cà rốt

Độ thu hồi được tính bằng cách so sánh kết quả của giá trị nhận được trước khi thêm chuẩn vào nền mẫu trắng và sau khi thêm chuẩn ở cùng mức nồng độ. Sự hiệu chỉnh duy nhất là trước khi tính độ thu hồi có bước hiệu chỉnh bằng nội chuẩn (Nội chuẩn được thêm sau khi xử lý mẫu nhằm hiệu chỉnh hệ thống và hiệu ứng gây ra bởi nền mẫu). Khoảng độ thu hồi của các hợp chất được thể hiện trong bảng 1 với từng nhóm mẫu khác nhau, chia theo họ các hợp chất PFAS ở từng mức nồng độ khác nhau, cùng với độ lệch chuẩn tương đối trung bình. Khái quát lại, giữa các loại mẫu, độ thu hồi dao động trong khoảng 62 - 135%, độ thu hồi trung bình dao động từ 72% đến 113%. Độ thu hồi trung bình với từng họ hợp chất PFAS ở từng mức nồng độ với các nhóm mẫu khác nhau thể hiện trong hình 6. Các nhóm mẫu đều được thêm chuẩn 1,0 và 5,0 ng/g, cho độ lệch chuẩn tương đối (%RSD) nhỏ hơn 10%. Với mức nồng độ thêm vào là 0,1 ng/g đều cho %RSD nhỏ hơn 20%. FDA khuyến nghị độ thu hồi nằm trong khoảng 40 - 120% ở mức nồng độ 1 ng/g, %RSD tối đa là 22%.¹¹ Báo cáo cho độ thu hồi nằm trong khoảng được chấp nhận, trừ rất ít điểm bất thường vượt quá 120% ở mức nồng độ thấp. Tất cả %RSD đều nằm trong khoảng được chấp nhận. Những giá trị của phép thử nghiệm đều cho kết quả tách và phân tích có độ chính xác và lặp lại cao.



Hình 6: Độ thu hồi trung bình ($n = 5$) ở từng mức nồng độ khác nhau với từng nhóm mẫu khác nhau.

Tính đến ảnh hưởng của nền gây ảnh hưởng đến nồng độ tính được, cũng như thất thoát trong quá trình chiết, chất chuẩn đồng vị được thêm vào mẫu trước khi đem chiết QuEChERS, sử dụng phương pháp pha loãng đồng vị. Hình 7 thể hiện phương pháp này cho kết quả chính xác hơn, trong khi nếu dùng đường chuẩn dung môi, hiệu ứng nền rất lớn: nam việt quất, cà rốt và khoai tây. Nồng độ PFAS trong các mẫu này là 5ng/g. Khi không sử dụng phương pháp pha loãng đồng vị, nồng độ trung bình trong nam việt quất, cà rốt và khoai tây lần lượt là 3,6, 4,0 và 4,2 ng/g và độ phân tán của kết quả thu được cũng rộng hơn. Khi sử dụng pha loãng đồng vị, nồng độ trung bình là 4,7, 4,6 và 4,8 với nam việt quất, cà rốt và khoai tây, độ phân tán hẹp hơn.



Hình 7: Đồ thị kết quả khi không sử dụng pha loãng đồng vị (xanh) và có sử dụng pha loãng đồng vị (da cam).
 Kết quả trên đồ thị là kết quả trung bình thu được.

Kết luận

Chỉ với thay đổi nhỏ ở quy trình chiết, phương pháp C-010.01 sử dụng QuEChERS của FDA đã thành công trong việc phân tích PFAS trong nhiều loại thực phẩm. Kỹ thuật QuEChERS nhanh và đơn giản, sử dụng lượng mẫu nhỏ, tiêu tốn ít dung môi hữu cơ. Phổ các chất có thể phân tích được mở rộng lên 30 chất. Tóm lại, phương pháp dựa trên hướng dẫn của FDA cho độ thu hồi tốt, từ đó cho kết quả chính xác. Phương pháp cũng cho độ lặp lại tốt, % RSD thấp với các mẫu có cùng nền mẫu. Phương pháp cho độ tin cậy cao, quy trình phân tích nhanh và đơn giản, cho phép quản lý dễ dàng hơn và nắm được ảnh hưởng của PFAS tới môi trường trong thực phẩm.

Tài liệu tham khảo

1. Blaine AC, Rich CD, Sedlacko EM, *et al.* Perfluoroalkyl Acid Uptake in Lettuce (*lactuca sativa*) and

- Strawberry (*fragaria ananassa*) Irrigated with Reclaimed Water. *Environ Sci Technol.* 2014;48(24):14361–14368.
2. Lechner M, Knapp H. Carryover of Perfluorooctanoic acid (Pfoa) and Perfluorooctane sulfonate (Pfos) From Soil to Plant and Distribution to the Different Plant Compartments Studied in Cultures of Carrots (*Daucus carota ssp. sativus*), Potatoes (*Solanum tuberosum*), and Cucumbers (*Cucumis sativus*). *J Agric Food Chem.* 2011;59(20):11011–11018.
 3. Brown JB, Conder JM, Arblaster JA, Higgins CP. Assessing Human Health Risks from Per- and Polyfluoroalkyl Substance (PFAS)-Impacted Vegetable Consumption: a Tiered Modeling Approach. *Environ Sci Technol.* 2020; 54(23):15202–15214.
 4. Blaine AC, Rich CD, Hundal LS, *et al.* Uptake of Perfluoroalkyl acids into Edible Crops via Land Applied Biosolids: Field and Greenhouse Studies. *Environ Sci Technol.* 2013;47(24):14062–14069.
 5. EFSA Panel on Contaminants in the Food Chain (EFSA CONTAM Panel), Schrenk D, Bignami M, *et al.* Risk to Human Health Related to the Presence of Perfluoroalkyl Substances in Food. EFS2. 2020;18(9).
 6. Food and Drug Administration. Analytical Results of Testing Food for PFAS from Environmental Contamination. June 2021 [cited 2021 July 14]. Available from: <https://www.fda.gov/food/chemical-contaminants-food/analytical-results-testing-food-pfas-environmental-contamination> <
<https://www.fda.gov/food/chemical-contaminants-food/analytical-results-testing-food-pfas-environmental-contamination>>
 7. Genualdi S, Young W, DeJager L, Begley T. Method Development and Validation of Per- and Polyfluoroalkyl Substances in Foods from FDA’s Total Diet Study Program. *J Agric Food Chem.* 2021;69(20):5599–5606.
 8. Genualdi S, DeJager L. FDA Method Number C-010.01. Determination of 16 Perfluoroalkyl and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS) in Food Using Liquid Chromatography-Tandem Mass Spectrometry (LC-MS/MS). *US Food and Drug Administration.* 2019.
 9. Official Methods of Analysis of AOAC INTERNATIONAL. Official Method 2007.01. Pesticide Residues in Foods by Acetonitrile Extraction and Partitioning with Magnesium Sulfate. 2007.
 10. European Committee for Standardization EN 15662. Foods of Plant Origin - Multimethod for the Determination of Pesticide Residues using GC- and LC-Based Analysis following Acetonitrile Extraction/Partitioning and Clean-up by Dispersive SPE – Modular QuEChERS Method. 2018.
 11. Food and Drug Administration Foods Program. Guidelines for the Validation of Chemical Methods in Food, Feed, Cosmetics, and Veterinary Products, 3rd edition. October 2019.

Phụ lục

Compound	PFAS group	Parent	Fragment	CV	CE	Internal standard	Fig 4 peak assignment
PFBA	carboxylate	213.0	169	8	5	¹³ C-PFBA	1
PFPeA	carboxylate	262.9	218.9	5	5	¹³ C ₆ -PFPeA	2
PFHxA	carboxylate	312.9	268.9	16	6	¹³ C ₆ -PFHxA	3
			118.9	16	21		
PFHpA	carboxylate	362.9	318.9	14	8	¹³ C ₄ -PFHpA	4
			168.9	14	14		
PFOA	carboxylate	412.9	368.9	22	7	¹³ C ₈ -PFOA	5
			168.9	22	15		
PFNA	carboxylate	462.9	418.9	18	9	¹³ C ₉ -PFNA	6
			218.9	18	15		
PFDA	carboxylate	512.9	468.9	6	9	¹³ C ₆ -PFDA	7
			218.9	6	15		
PFUnDA	carboxylate	562.9	518.9	8	8	¹³ C ₇ -PFUnDA	8
			268.9	8	14		
PFDODA	carboxylate	612.9	568.9	12	12	¹³ C-PFDODA	9
			168.9	12	21		
PFTriDA	carboxylate	662.9	168.9	14	22	¹³ C-PFDODA	10
			218.9	14	20		
PFTreDA	carboxylate	712.9	218.9	14	22	PFTreDA	11
			168.9	14	20		
PFBS	sulfonate	298.9	80.1	7	27	¹³ C ₃ -PFBS	12
			99.1	7	27		
PFPeS	sulfonate	348.9	79.9	32	31	¹³ C ₃ -PFHxS	13
			98.9	32	25		
PFHxS	sulfonate	398.9	80.1	38	35	¹³ C ₃ -PFHxS	14
			99.1	38	29		
PFHpS	sulfonate	448.9	79.9	16	34	¹³ C ₈ -PFOS	15
			98.9	16	34		
PFOS	sulfonate	498.9	79.9	30	42	¹³ C ₈ -PFOS	16
			98.9	30	40		
PFNS	sulfonate	548.9	80.1	24	40	¹³ C ₈ -PFOS	17
			99.1	24	36		
PFDS	sulfonate	598.9	80.1	46	46	¹³ C ₈ -PFOS	18
			99.1	46	46		
GenX (HFPO-DA)	emerging	285.0	169	5	7	¹³ C ₃ -GenX	19
			GenX	119	5		
ADONA	emerging	376.9	251	12	10	¹³ C ₃ -GenX	20
			377.3	84.9	12		
9Cl-PF3ONS	emerging	531.0	351	14	22	¹³ C ₈ -PFOS	21
			82.9	14	20		
11Cl-PF3OUdS	emerging	631.0	450.9	16	26	¹³ C ₉ -PFNA	22
			631.2	82.9	16		
4:2 FTS	precursor	326.9	306.9	42	18	¹³ C ₂ -4:2 FTS	23
			327.3	80.9	42		
6:2 FTS	precursor	427.0	406.9	12	22	¹³ C ₂ -6:2 FTS	25
			427.3	80.1	12		
8:2 FTS	precursor	526.9	506.9	28	26	¹³ C ₂ -8:2 FTS	27
			527.3	80.9	28		
FBSA	precursor	297.9	78	25	25	¹³ C ₄ -PFHpA	24
			118.9	25	15		
FHxSA	precursor	398.0	78.1	30	25	¹³ C ₄ -PFHpA	26
			169	30	25		
FOSA	precursor	498.0	77.9	40	29	¹³ C ₈ -FOSA	30
N-MeFOSAA	precursor	569.9	418.9	36	15	D ₃ -N-MeFOSAA	28
			168.9	36	27		
N-EtFOSAA	precursor	584.0	418.9	34	15	D ₆ -N-EtFOSAA	29
			525.9	34	18		
¹³ C-PFBA	-	217	172	7	8	¹³ C ₂ -PFOA	-
¹³ C ₆ -PFPeA	-	268	223	11	7	¹³ C ₂ -PFOA	-
¹³ C ₆ -PFHxA	-	318	273	10	6	¹³ C ₂ -PFOA	-
			120	10	18		
¹³ C ₄ -PFHpA	-	367	322	16	7	¹³ C ₂ -PFOA	-
			172	16	15		
¹³ C ₈ -PFOA	-	421	376	6	8	¹³ C ₂ -PFOA	-
			172	6	16		
¹³ C ₉ -PFNA	-	472	172	7	18	¹³ C ₂ -PFOA	-
			223	7	18		
¹³ C ₆ -PFDA	-	519	473.9	25	7	¹³ C-PFDA	-
			219	25	13		
¹³ C ₇ -PFUnDA	-	569.9	524.9	9	8	¹³ C-PFDA	-
			273.9	9	14		
¹³ C-PFDODA	-	615	569.9	23	10	¹³ C-PFDA	-
			168.9	23	22		
¹³ C ₂ -PFTreDA	-	715	168.9	18	25	¹³ C-PFDA	-
			219	18	25		
¹³ C ₃ -PFBS	-	301.9	80.1	34	28	¹³ C-PFOS	-
			99.1	34	24		
¹³ C ₃ -PFHxS	-	402	80.1	13	38	¹³ C-PFOS	-
			99.1	13	30		
¹³ C ₈ -PFOS	-	507	80.1	36	34	¹³ C-PFOS	-
			99.1	36	34		
¹³ C ₉ -FOSA	-	506	77.9	13	28	¹³ C ₂ -PFOA	-
D ₆ -N-EtFOSAA	-	589	418.9	24	17	¹³ C ₂ -PFOA	-
			482.9	24	13		
D ₃ -N-MeFOSAA	-	573	418.9	17	18	¹³ C ₂ -PFOA	-
			515	17	18		
¹³ C ₂ -4:2 FTS	-	329	309	14	18	¹³ C-PFOS	-
			80.9	14	21		
¹³ C ₂ -6:2 FTS	-	429	409	48	21	¹³ C-PFOS	-
			80.9	48	27		
¹³ C ₂ -8:2 FTS	-	529	509	20	27	¹³ C-PFOS	-
			80.9	20	37		
¹³ C ₃ -GenX	-	287	169	5	12	¹³ C ₂ -PFOA	-
			119	5	12		
¹³ C ₂ -PFOA	-	415	370	10	10	-	-
			169	10	15		
¹³ C-PFOS	-	503	80.1	5	40	-	-
			99.1	5	40		
¹³ C-PFDA	-	515	470	20	10	-	-
			219	20	15		

Featured Products

[ACQUITY UPLC I-Class PLUS System <https://www.waters.com/134613317>](https://www.waters.com/134613317)

[Xevo TQ-XS Triple Quadrupole Mass Spectrometry <https://www.waters.com/134889751>](https://www.waters.com/134889751)

[MassLynx MS Software <https://www.waters.com/513662>](https://www.waters.com/513662)

720007333, August 2021

© 2021 Waters Corporation. All Rights Reserved.