

NEUTRALE EN VLUCHTIGE PFAS

Hendrik Van De Weghe / Griet Jacobs
Werkgroep Water (OR) - 28/11/2023

DOEL

Op punt stellen van een analytische meetmethode voor de analyse van neutrale en vluchtige PFAS in milieu en atmosfeer. Deze PFAS werden ontwikkeld als alternatief voor ionische PFAS (PFOS en afgeleiden). Ze worden in het milieu echter omgezet naar meer toxische (o.a. PFOS).

NEUTRALE EN VLUCHTIGE COMPONENTEN (LITERATUUR)

- **Fluorotelomeeralcoholen (FTOH) (-> analyse met GC en LC)**
 - 4:2 FTOH (CAS 2043-47-2) 2-perfluorobutyl ethanol -> Norman suspect list
 - 5:2 FTOH (no CAS) 1-perfluoropentyl ethanol
 - 6:2 FTOH (CAS 647-42-7) 2-perfluorohexyl ethanol -> in voorstel EC voor RL Prioritaire stoffen (MKN OW en GW)
 - 7:2 FTOH (no CAS) 1-perfluoroheptyl ethanol
 - 8:2 FTOH (CAS 678-39-7) 2-perfluorooctyl ethanol -> in voorstel EC voor RL Prioritaire stoffen (MKN OW en GW)
 - 10:2 FTOH (CAS 865-86-1) 2-(perfluorodecyl)ethanol

- **Fluorotelomeer acetaten (FTOAC)**
 - 8:2 FTOAc (CAS 37858-04-1) 2-perfluorooctylethyl acetate
 - 10:2 FTOAc (CAS 37858-05-2) 1H,1H,2H,2H-perfluorododecyl acetate

- **Fluorotelomeeracrylaten en metacrylaten (FTAC en FTMAC) (-> analyse met GC)**
 - 6:2 FTAC (CAS 17527-29-6) perfluorooctyl acrylate
 - 8:2 FTAC (CAS 27905-45-9) perfluorodecyl acrylate
 - 10:2 FTAC (CAS 17741-60-5) perfluorododecyl acrylate
 - 6:2 FTMAC (CAS 2144-53-8) perfluorooctylmethacrylate
 - 8:2 FTMAC (CAS 1996-88-9) heptadecafluorodecylmethacrylate

NEUTRALE EN VLUCHTIGE COMPONENTEN (LITERATUUR)

- Fluorotelomeer carboxylzuren (FTCA) (-> analyse met LC)
 - 6:2 FTCA (CAS 53826-12-3) 2-perfluorohexyl ethanoic acid
 - 8:2 FTCA (CAS 27854-31-5) 2-perfluorooctyl ethanoic acid
 - 10:2 FTCA (no CAS) 2-perfluorodecyl ethanoic acid
 - FPrPA (no CAS) 3-perfluoropropyl propanoic acid -> Norman suspect list
 - FPePA (no CAS) 3-perfluoropentyl propanoic acid -> Norman suspect list
 - FHpA (no CAS) 3-perfluoroheptyl propanoic acid -> Norman suspect list

- Fluorotelomeer onverzadigde carboxylzuren (FTUCA) (-> analyse met LC)
 - FHUEA (CAS 70887-88-6) 2H-perfluoro-2-octenoic acid
 - FOUEA (CAS 70887-84-2) 2H-perfluoro-2-decenoic acid
 - FDUEA (CAS 70887-94-4) 2H-perfluoro-2-dodecenoic acid

- Perfluorooctanesulfonamidoethanols (FOSE) (-> analyse met LC en GC)
 - N-MePFOSE (CAS 24448-09-7) N-methylperfluorooctanesulfonamidoethanol
 - N-EtPFOSE (no CAS) N-ethylperfluorooctanesulfonamidoethanol -> Norman suspect list

NEUTRALE EN VLUCHTIGE COMPONENTEN (LITERATUUR)

- Perfluorooctanesulfonamides (FOSA) (-> analyse met LC en GC)
 - N-MePFOSA (CAS 31506-32-8) N-methylperfluor-n-octaansulfonamide
 - N-EtPFOSA (CAS 4151-50-2) N-ethylperfluor-n-octaansulfonamide

- Fluorotelomeer olefins (FTO) (-> analyse met GC)
 - 4:2 FTO (CAS) nonafluoro-1-hexene
 - 6:2 FTO (CAS) tridecafluoro-1-octene
 - 8:2 FTO (CAS) heptadecafluoro-1-decene

RELEVANTE COMPONENTEN

- Buitenlucht:
 - FTOH zijn meest voorkomende PFAS in buitenlucht (met 6:2 en 8:2 dominant)
 - Daarnaast worden ook FOSA en FOSE aangetroffen
 - FTOAC en FTMAC: korte levensduur in lucht

- Binnenlucht:
 - vooral FTOH
 - soms ook FOSE (MeFOSE dominant)

- zeer weinig gegevens over voorkomen van overige vluchtige en neutrale PFAS

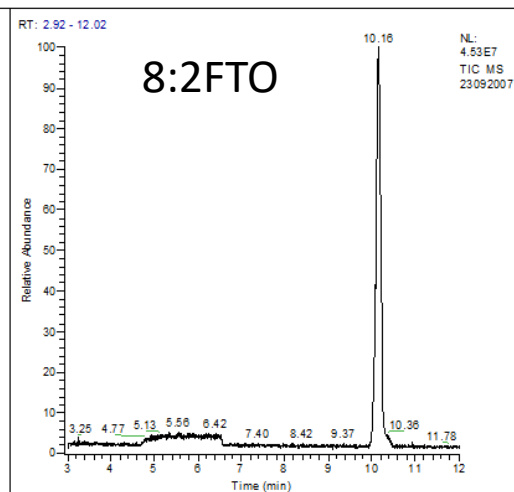
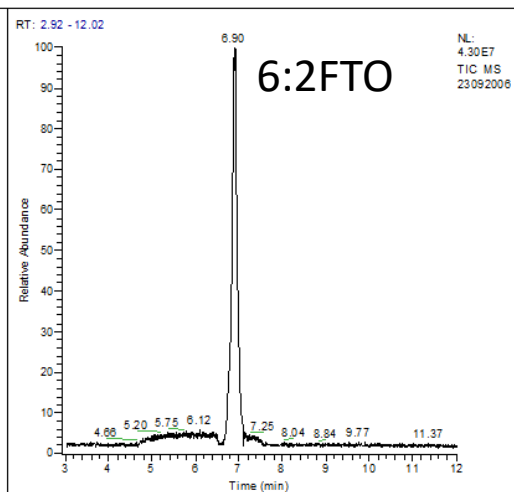
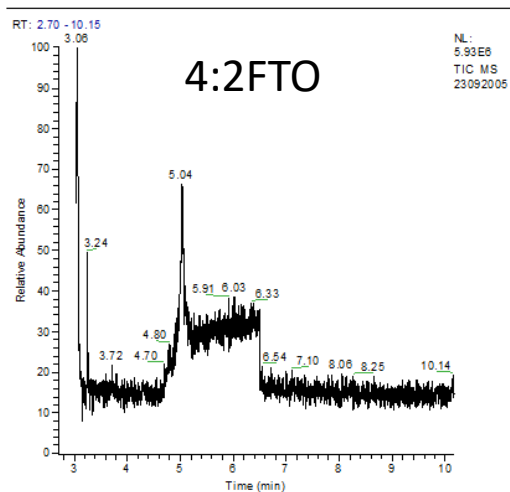
UITGEVOERDE EXPERIMENTEN

- Mogelijkheden GC voor neutrale en vluchtige PFAS onderzoeken
- In eerste instantie focus op FTOH, FOSE, FOSA, FTOAC, FTAC
Ionisatie: PCI (met NCI slecht signaal)
- Injectiesolvent: MeOH, GC-kolom: WAX

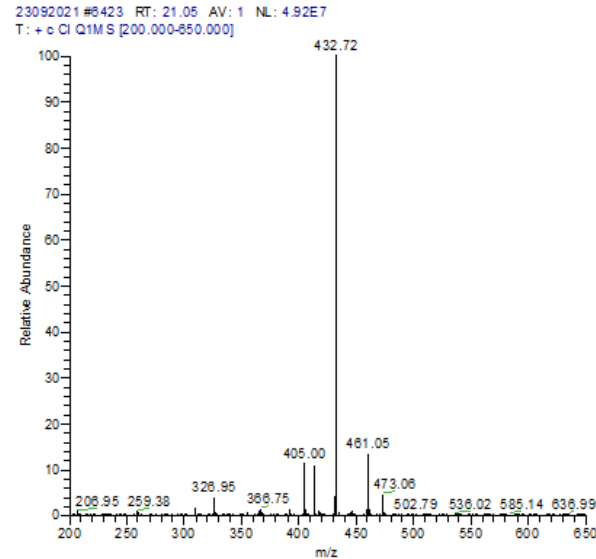
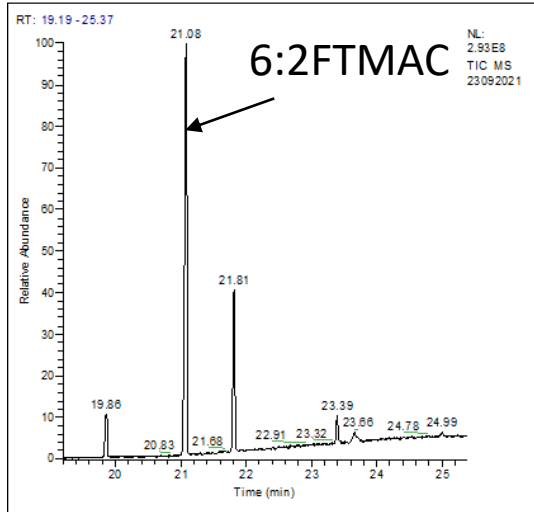
-> Besluit mei 2023:

- soms slechte piekvormen op WAX kolom
(8:2 FTOH, 10:2 FTOH, MeFOSA, EtFOSA, MeFOSE en EtFOSE)
- daarom ook DB-624 kolom evalueren
- methode uitbreiden met FTO (olefins) en FTMAC (methacrylaten)

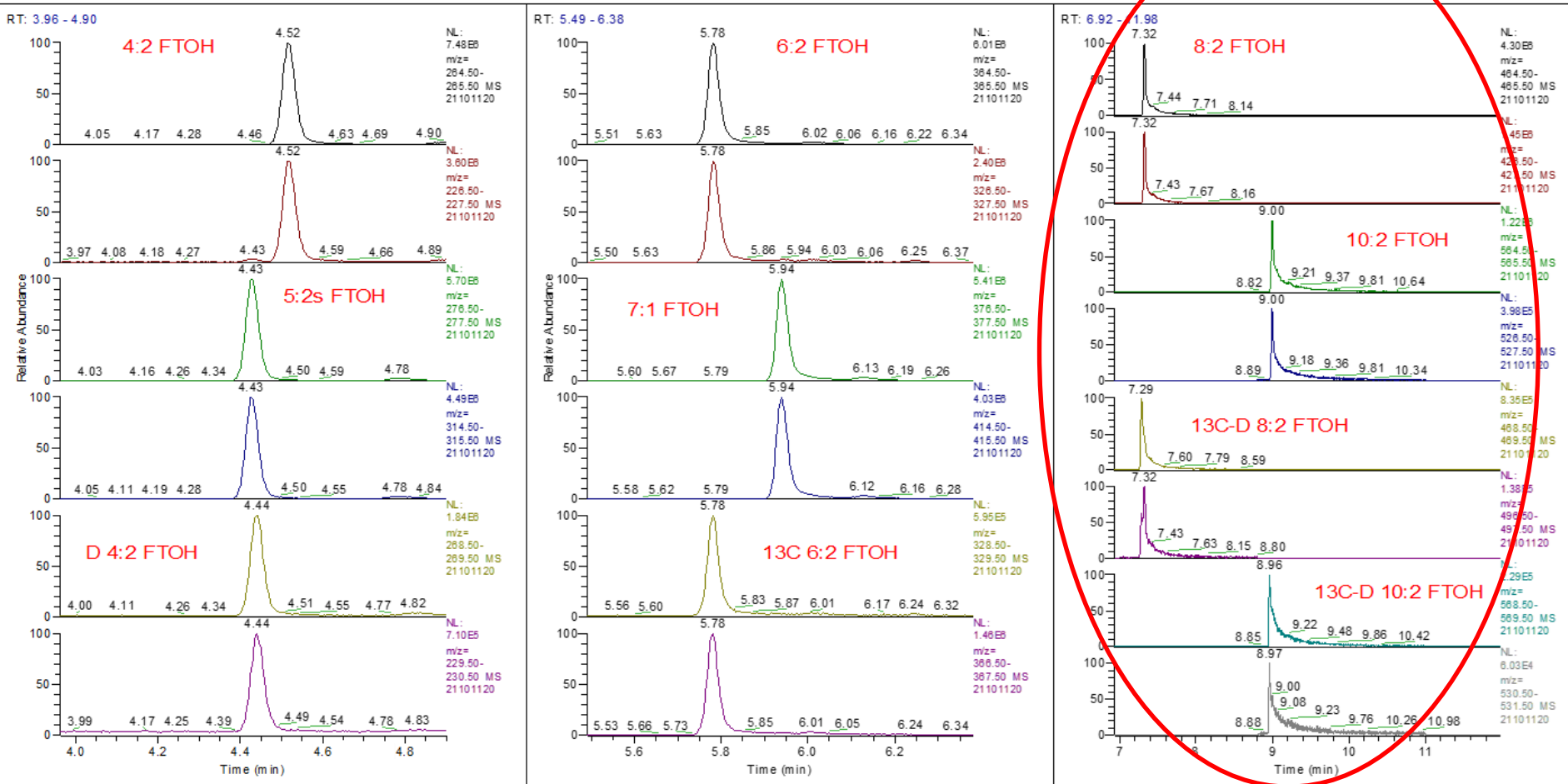
Standaard in DCM; FTO hebben op DB-624 voldoende retentie en zijn detecteerbaar



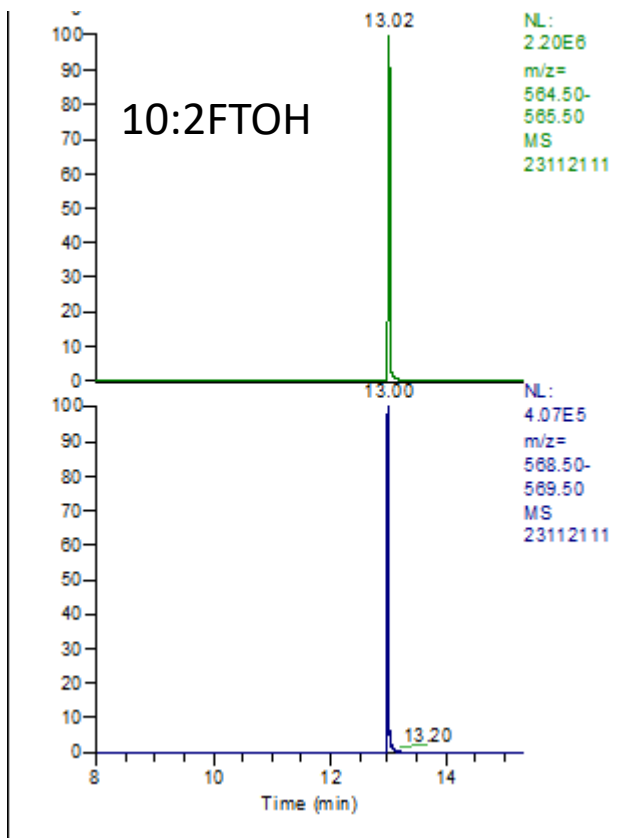
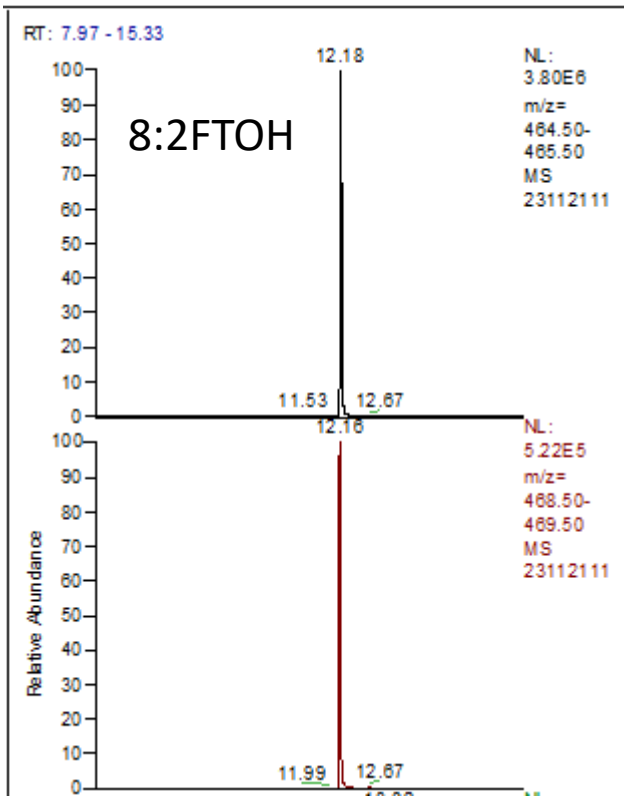
FTMAC ook toegevoegd aan standaard



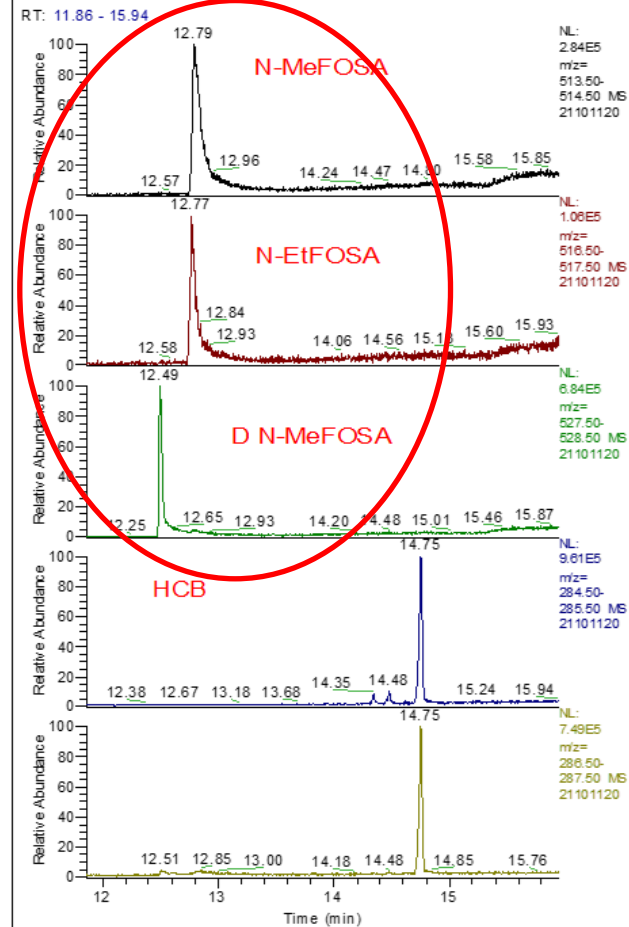
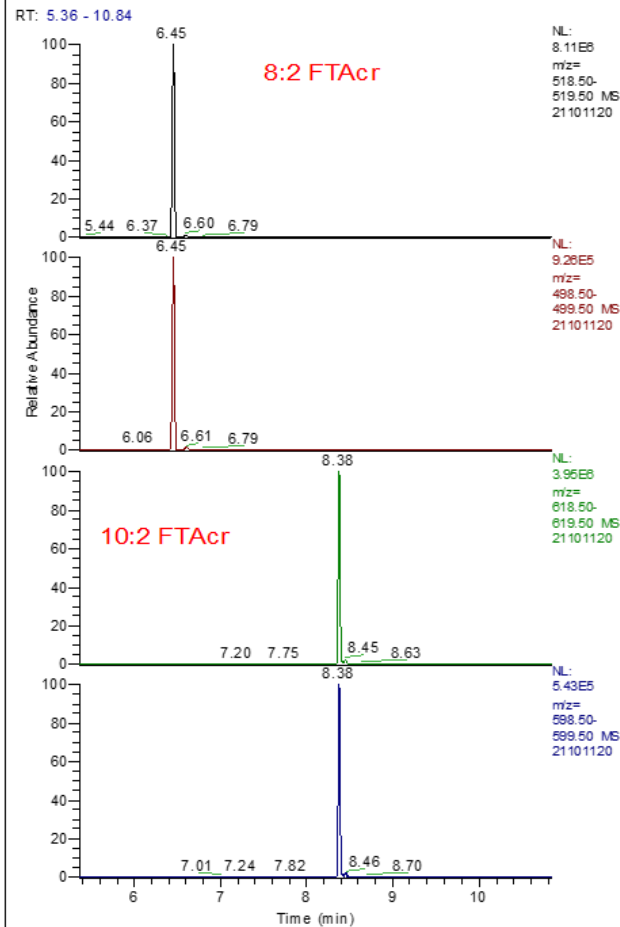
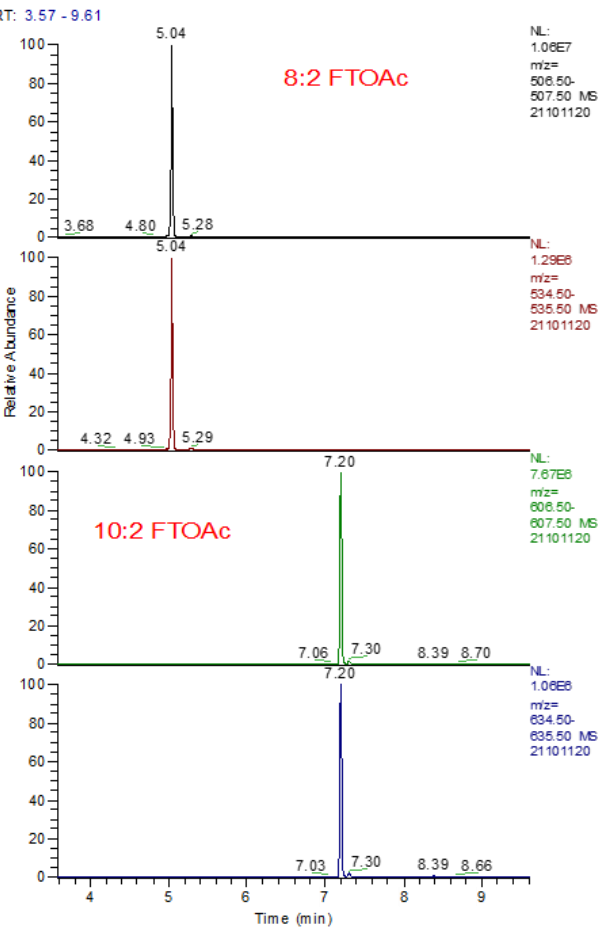
VERGELIJKING PIEKVORMEN OP DB-624 TOV WAX KOLOM



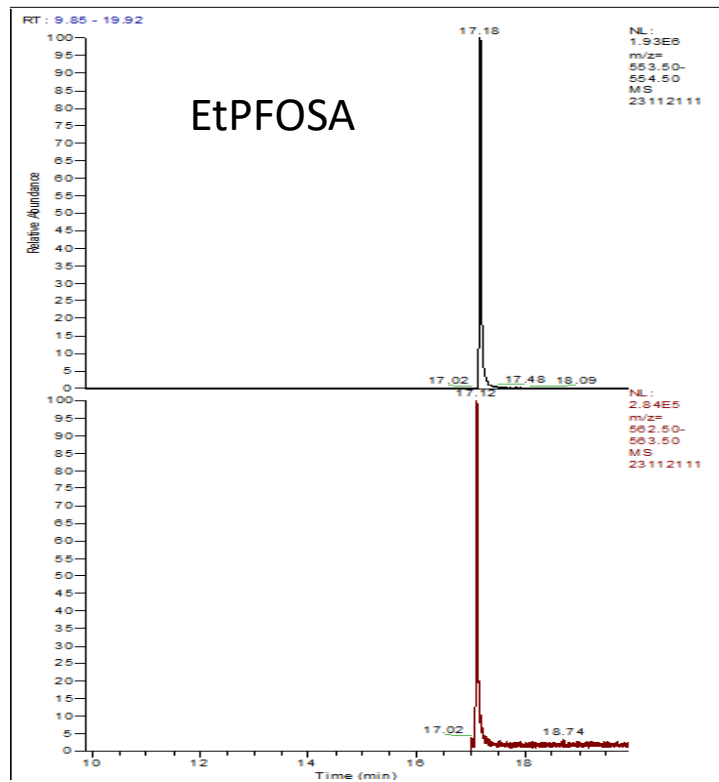
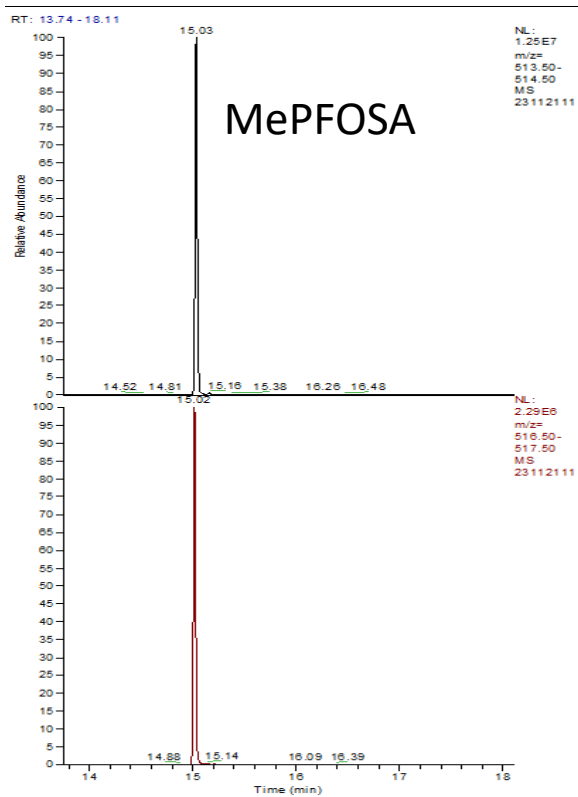
VERGELIJING PIEKVORMEN OP DB-624 TOV WAX KOLOM



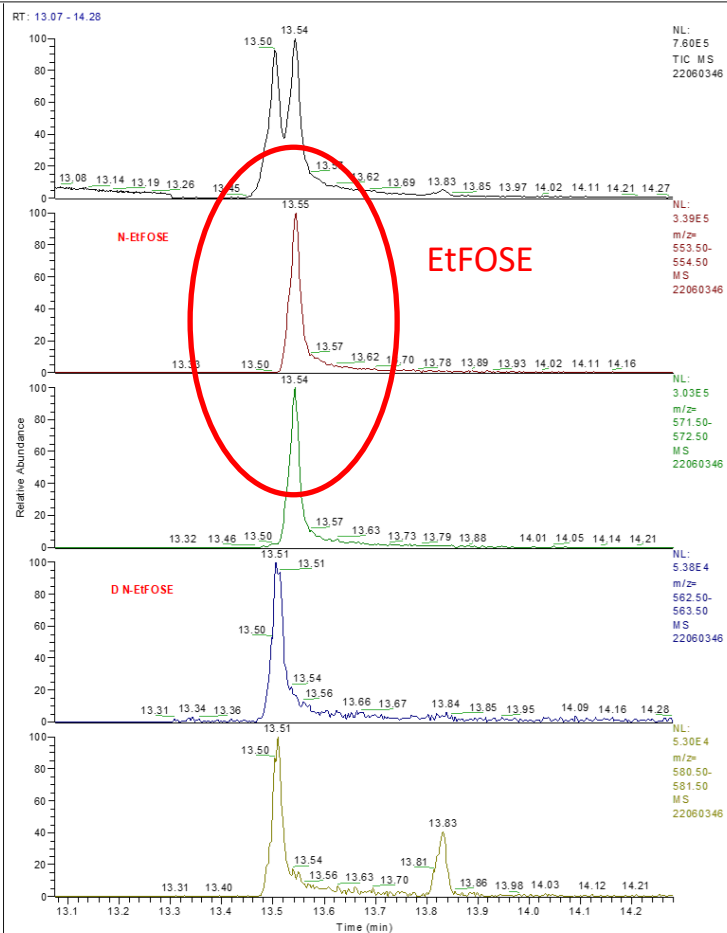
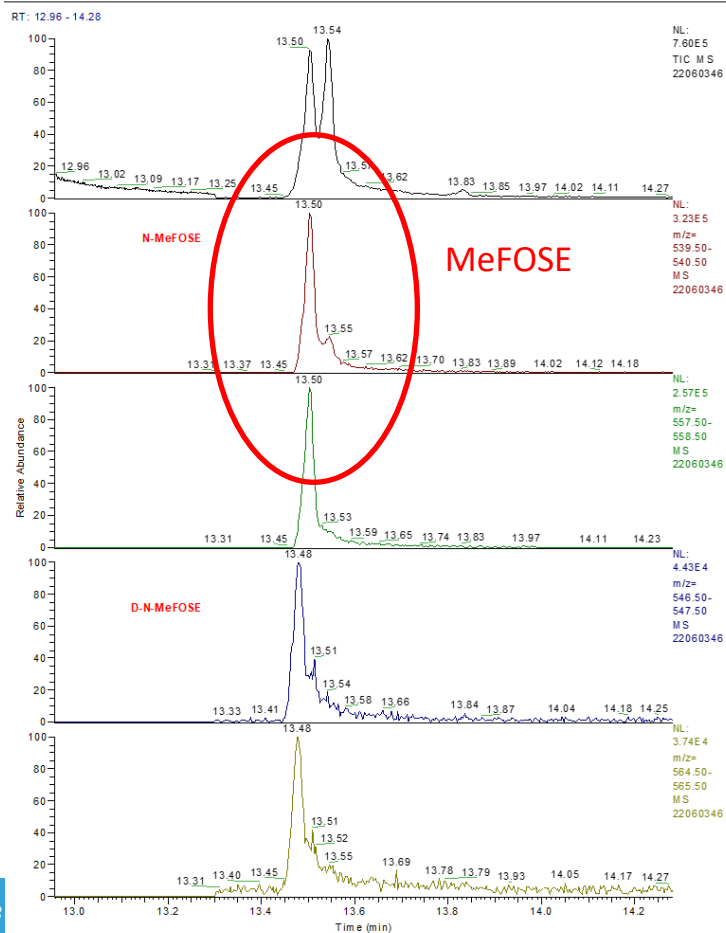
VERGELIJKING PIEKVORMEN OP DB-624 TOV WAX KOLOM



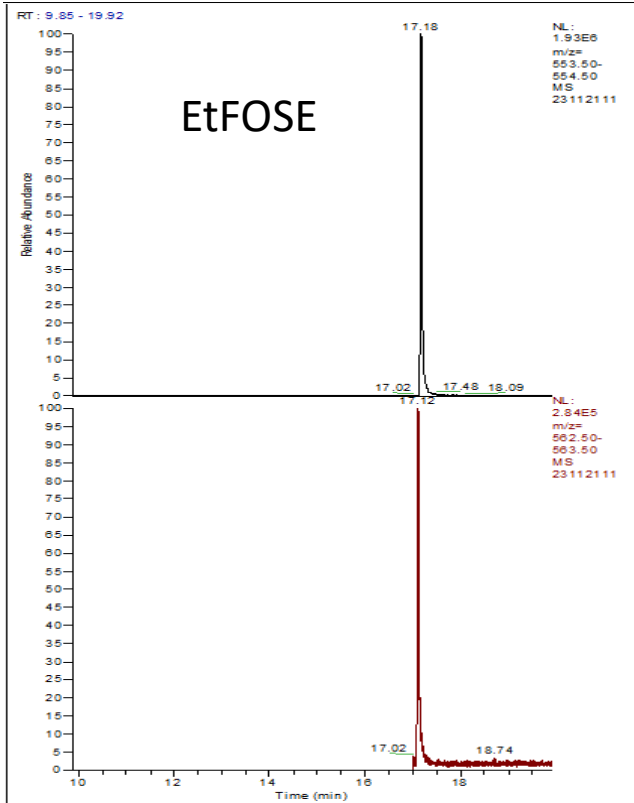
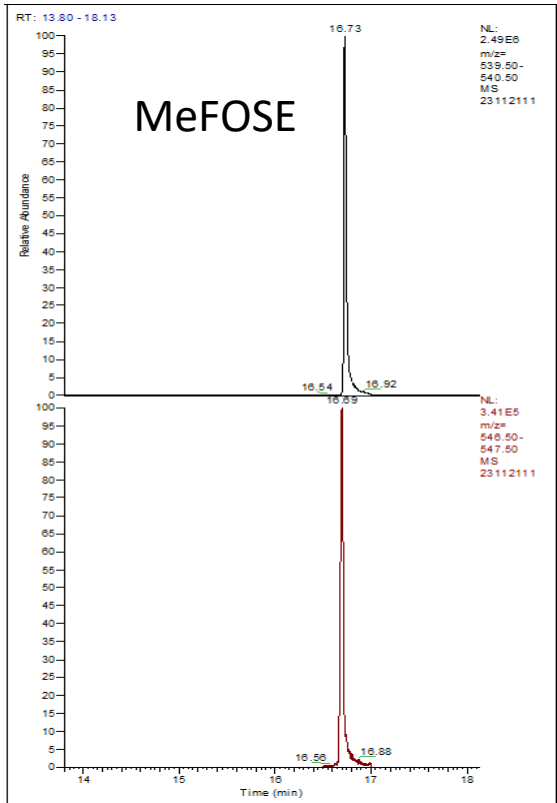
VERGELIJKING PIEKVORMEN OP DB-624 TOV WAX KOLOM



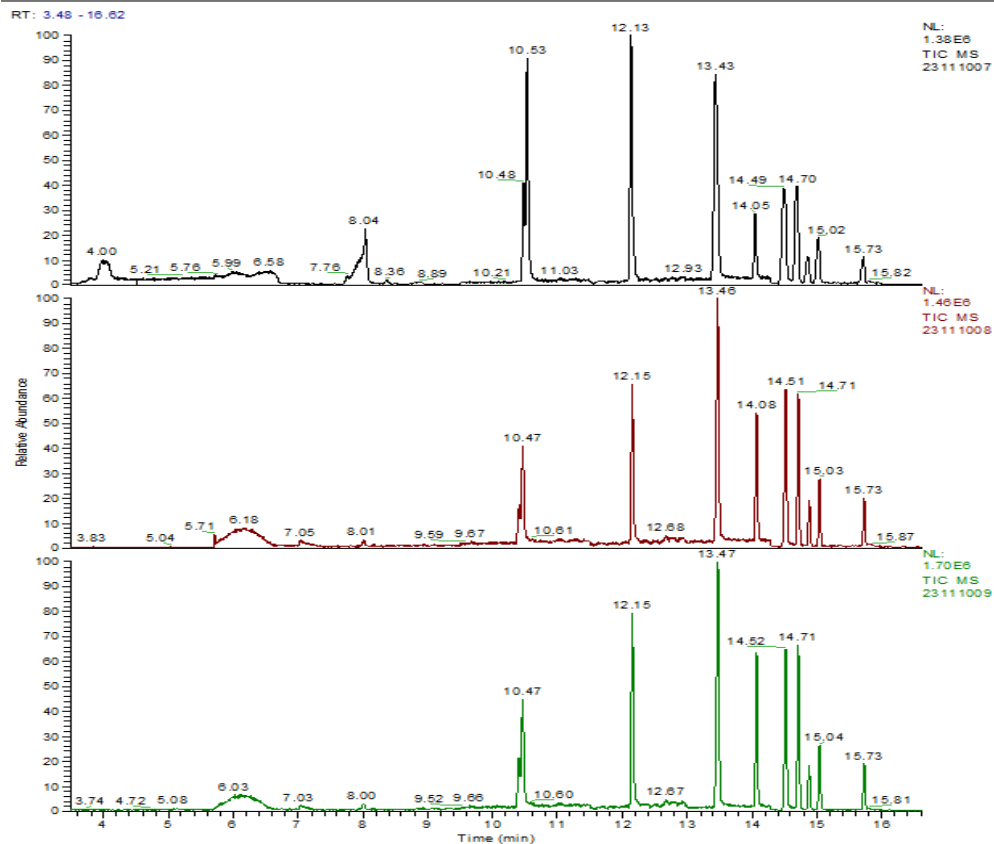
VERGELIJKING PIEKVORMEN OP DB-624 TOV WAX KOLOM



VERGELIJKING PIEKVORMEN OP DB-624 TOV WAX KOLOM



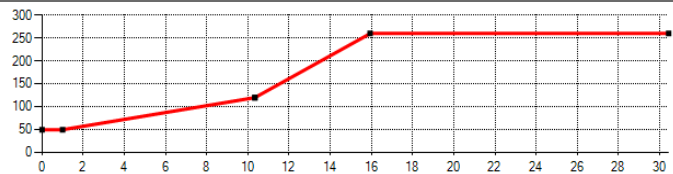
TEST: INDAMPVERLIES / EXTRACTIERENDEMENT DCM (WATERSTAAL)



Standaard in DCM

Standaard in DCM
na indampen
-> FTO gaan verloren

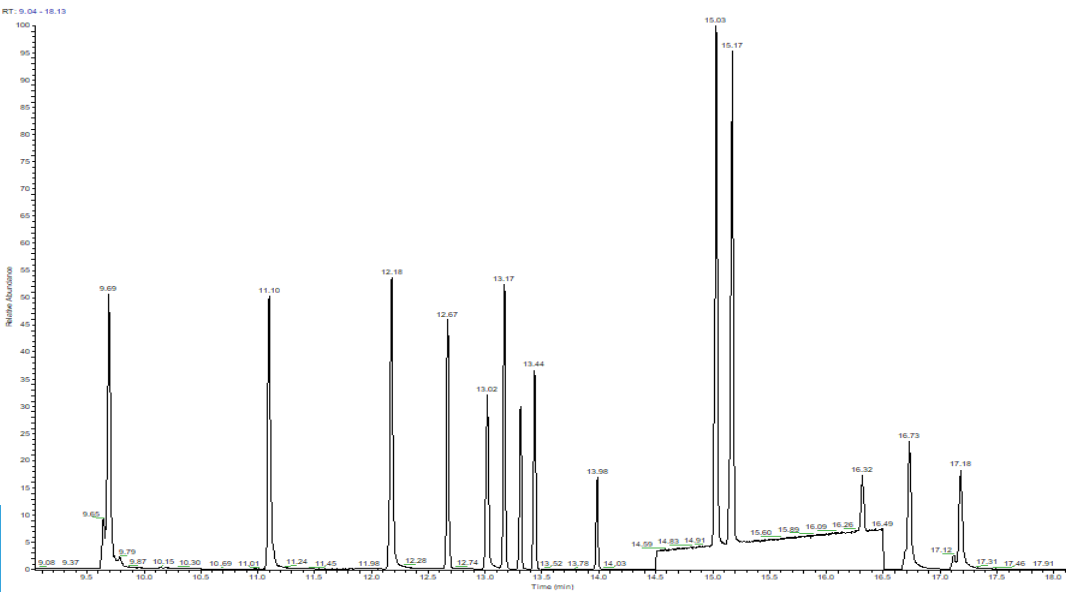
DCM-extract van gedopeerd
waterstaal (ingedampt)
-> alle PFAS worden teruggevonden
behalve FTO



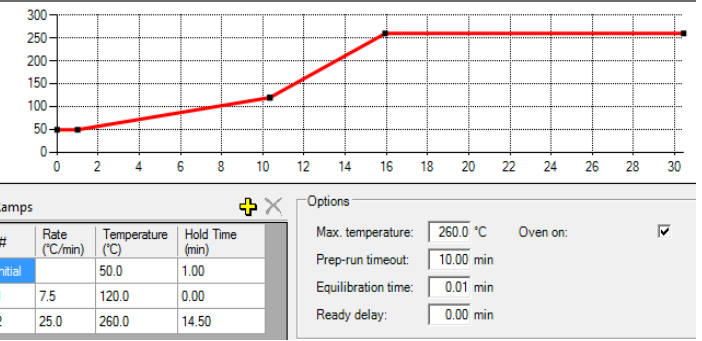
CI methane 1.5 ml/min
inj. 250 °C
1 µl splitless

#	Rate (°C/min)	Temperature (°C)	Hold Time (min)
Initial	50.0	120.0	1.00
1	7.5	120.0	0.00
2	25.0	260.0	14.50

Options	
Max. temperature:	260.0 °C
Oven on:	<input checked="" type="checkbox"/>
Prep-run timeout:	10.00 min
Equilibration time:	0.01 min
Ready delay:	0.00 min



	RT	m1	m2
D-4:2 FTOH	9.74	269	230
4:2 FTOH	9.78	265	227
13C-6:2 FTOH	11.13	367	329
6:2 FTOH	11.13	365	327
13C-D-8:2 FTOH	12.18	469	431
8:2 FTOH	12.20	465	427
8:2 FTOAC	12.69	507	487
13C-D-10:2 FTOH	13.00	569	531
10:2 FTOH	13.04	565	527
6:2 FTMAC	13.19	433	405
8:2 FTAC	13.33	519	499
10:2 FTOAC	13.46	607	587
10:2 FTAC	14.00	619	599
D3-MePFOSA	15.04	517	-
MePFOSA	15.06	514	-
D5-EtPFOSA	15.18	533	-
EtPFOSA	15.20	528	-
13C-TCIBz	16.00	223	225
D7-MePFOSE	16.70	547	565
MePFOSE	16.76	540	558
D9-EtPFOSE	17.20	563	581
EtPFOSE	17.21	554	572



Methode wordt momenteel gevalideerd voor waterstalen (GW, OW, AW)

