

EPA 1633 に準拠したパー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（PFAS）の分析、パート 3： 土壌および組織の分析

Kari L. Organtini, Kenneth J. Rosnack, Chelsea Plummer, Peter Hancock, Oliver Burt

Waters Corporation

要約

US EPA メソッド 1633 は、米国における非飲料水マトリックス、土壌、バイオソリッド、組織中の PFAS の分析の基本的な分析法になっています。この分析法は、弱陰イオン交換（WAX）固相抽出（SPE）を使用するサンプル前処理とグラファイトカーボンブラック（GCB）クリーンアップを使用したサンプル前処理で構成されています。このアプリケーションノートは、EPA メソッド 1633 を実行するための包括的なソリューションを実証するアプリケーションノートシリーズの第 3 弾です。このノートでは、Xevo™ TQ Absolute タンデム四重極質量分析計と結合した ACQUITY™ Premier BSM FTN LC システムで、2 層構造の 2 相 SPE カートリッジおよび LC-MS/MS 分析法を利用した土壌および魚の組織サンプルの前処理および分析に焦点を当てています。

アプリケーションのメリット

- EPA メソッド 1633 に従った土壌サンプルおよび魚の組織サンプル中の PFAS 分析用のエンドツーエンドのワークフローの紹介
- WAX および GCB を含む 2 層構造の 2 相 SPE カートリッジを活用することにより、分散型 GCB での作業に伴う残渣や危険性が低減するだけでなく、サンプル前処理にかかる時間をさらに短縮可能に
- 固体および組織について EPA 1633 の性能基準が満たされており、使用したワークフローの同等性を実証

- ワークフローの性能は、Waters™ ERA 認定レファレンス物質の適格性評価に容易に合格したことによって実証されている

はじめに

US EPA メソッド 1633 は、2021 年 8 月に初めて導入されて以来、非飲料水マトリックス、土壌、バイオソリッド、組織中の PFAS の基本的な分析法となっています¹。EPA 1633 の最終バージョンは 2024 年 1 月にリリースされ、分析法に含まれるサンプルマトリックスの種類ごとに、複数のラボでバリデーションされています²。この分析法では、同位体希釈キャリブレーションおよび定量を利用して 40 種類の PFAS をカバーします。必要なサンプル前処理はサンプルの種類によって多少異なりますが、すべての種類のサンプルで、弱陰イオン交換（WAX）カートリッジでの固相抽出（SPE）をグラファイトカーボンブラック（GCB）クリーンアップと組み合わせて使用します。EPA 1633 は、水質浄化法（CWA）および国防総省（DoD）が行うモニタリングおよび修復のためのサンプル分析をサポートするために作成されたものですが、非常に幅広いマトリックスおよび化合物をカバーしているため、その適用範囲が拡張すると期待されます。

このアプリケーションノートは、ウォーターズのテクノロジーの包括的なワークフローを使用した EPA 1633 のサンプル前処理、分析、分析法性能に対処するアプリケーションノートシリーズの第 3 弾です。このアプリケーションノートでは、Part 1 で確立した LC-MS/MS 分析法を利用した真正の土壌および組織サンプルの前処理および分析に焦点を当てています。分析は、Xevo TQ Absolute 質量分析計に結合した ACQUITY Premier BSM FTN UPLC システムで実行されます³。WAX および GCB を組み合わせたサンプル抽出およびクリーンアップワークフローの使用が、土壌と魚の組織で実証されています。

実験方法

サンプル前処理

このアプリケーションノートで説明するサンプルには、土壌と魚の組織が含まれます。地元の市場で調達した鮭を、魚の組織マトリックスとして使用しました。魚の組織は、サブサンプリングする前に、ブレンダーを使用して均質化しました。土壌は、ERA が作成したカスタム土壌レファレンス物質で、現在提供されている PFAS 含有土壌 CRM と同様のものでした（項目番号 603 <<https://www.eraqc.com/pfas-in-soil-soil-era001675?returnurl=%2fsearch%3fq%3d603%26analytesearchonly%3dfalse>>）。濃度既知の 40 種の EPA 1633 の PFAS が含まれています。サンプルは、EPA 1633 ガイドラインおよびホールド時間に従って、分析するまで冷凍しました。

分散型 GCB を使用する代わりに、サンプルクリーンアップに必要な WAX 吸着剤と GCB 吸着剤の両方を含む、PFAS 分析用 Oasis GCB/WAX 2 相 SPE カートリッジ（製品番号：186011112 <<https://www.waters.com/nextgen/global/shop/sample-preparation--filtration/186011112-oasis-gcb-wax-for-pfas-analysis-6cc-vac-cartridge-50-mg-gcb-200-.html>>）を使用しました。土壌および組織の分析では、WAX 吸着剤の上に GCB を充填することにより、WAX SPE の前にサンプルを GCB でクリーニングする EPA 1633 の手順が再現されます。

完全なサンプル前処理の詳細を図 1 および 図 2 に記載しています。これらは EPA メソッド 1633 から直接引用したものです。図 1 では、土壌/固体および組織に使用する 2 種類の抽出手順の詳細を説明しています。図 2 では、すべての種類のサンプルに使用できる SPE 手順の詳細を説明しています。前述したように、分散型 GCB ステップを SPE カートリッジに組み込むことで、粉末状 GCB 物質の使用に伴う複雑さが最小限に抑えられ、分析法性能を損なうことなくサンプル前処理のステップ数を減らすことができます。

土壌サンプルには、抽出前に 0.25 ~ 2 ng/L（サンプル濃度と同等）の抽出内部標準（EIS）をスパイクし、抽出後に必須の非抽出内部標準（NIS）0.25 ~ 1.0 ng/L（サンプル濃度と同等）をスパイクしました。組織サンプルには、抽出前に 0.625 ~ 5 ng/L（サンプル濃度と同等）の抽出内部標準（EIS）をスパイクし、抽出後に必須の非抽出内部標準（NIS）0.625 ~ 2.5 ng/L（サンプル濃度と同等）をスパイクしました。個々の濃度は、Wellington 標準試料混合物の各成分の濃度によって異なります。各分析種の検量線範囲（バイアル内等価濃度）は付録の表 2 に記載されています。これは、本アプリケーションノートシリーズのパート 1 で紹介したように、取り込まれたデータにより決定された範囲です³。すべての標準試料は、Wellington Laboratories 社から混合物として入手しました。

土壌/固体	組織
<ul style="list-style-type: none"> • サンプルを 5 g 秤量して 50 mL のチューブに入れる <ul style="list-style-type: none"> • 内部標準混合物（Wellington 社の MPFAC-HIF-ES）をスパイクする • 0.3% 水酸化アンモニウムメタノール溶液 10 mL を添加する <ul style="list-style-type: none"> • 30 分間振とうし、遠心分離して、上清をきれいなチューブに移す • 0.3% 水酸化アンモニウムメタノール溶液 15 mL を添加する <ul style="list-style-type: none"> • 30 分間振とうし、遠心分離して、上清を移す（前のステップと組み合わせる） • 0.3% 水酸化アンモニウムメタノール溶液 5 mL を添加する <ul style="list-style-type: none"> • 5 分間振とうし、遠心分離して、上清を移す（前のステップと組み合わせる） • 窒素下で 7 mL に濃縮する • 最大 50 mL の水に再溶解する • pH を確認し、約 pH 6 に調整する • SPE 手順に進む 	<ul style="list-style-type: none"> • サンプルを 2 g 秤量して 15 mL のチューブに入れる <ul style="list-style-type: none"> • 内部標準混合物（Wellington 社の MPFAC-HIF-ES）をスパイクする • 0.05 M KOH メタノール溶液 10 mL を添加する <ul style="list-style-type: none"> • 16 時間穏やかに振とうし、遠心分離して、上清をきれいなチューブに移す • 10 mL のアセトニトリルを添加する <ul style="list-style-type: none"> • 30 分間超音波処理し、遠心分離して、上清を移す（前のステップと組み合わせる） • 0.05 M KOH メタノール溶液 5 mL を添加する <ul style="list-style-type: none"> • 5 分間振とうし、遠心分離して、上清を移す（前のステップと組み合わせる） • 1 mL の水を添加する • 窒素下で 2.5 mL に濃縮する • 最大 50 mL の水に再溶解する • pH を確認し、約 pH 6 に調整する • SPE 手順に進む

図 1. 土壌および組織に使用した抽出手順の完全なメソッドの詳細。EPA メソッド 1633 から引用しました。



図 2. 土壌および組織に使用した SPE 手順の完全なメソッドの詳細。EPA メソッド 1633 から引用しました。

LC 条件

LC システム:	ACQUITY Premier BSM (FTN を搭載)
バイアル:	700 µL ポリプロピレン製ねじ蓋バイアル (製品番号: 186005219)
分析カラム:	ACQUITY Premier BEH™ C ₁₈ 、2.1 × 50 mm、1.7 µm (製品番号: 186009452)
アイソレーターカラム:	Atlantis Premier BEH C18 AX 2.1 × 50 mm、5.0 µm (製品番号: 186009407)
カラム温度:	35 °C

サンプル温度:	10 °C
PFAS キット:	OASIS™ WAX 150 mg を含む PFAS インストールキット (製品番号: 176004548)
注入量:	2 µL
流速:	0.3 mL/分
移動相 A:	2 mM 酢酸アンモニウム水溶液
移動相 B:	2 mM 酢酸アンモニウムアセトニトリル溶液

グラジエントテーブル

時間 (分)	%A	%B	曲線
0	95	5	初期条件
0.5	75	25	6
3	50	50	6
6.5	15	85	6
7	5	95	6
8.5	5	95	6
9	95	5	6
11	95	5	6

MS 条件

MS システム:	Xevo TQ Absolute 質量分析計
イオン化モード:	ESI-
キャピラリー電圧:	0.5 kV

イオン源温度:	100 °C
脱溶媒温度:	350 °C
脱溶媒流量:	900 L/時間
コーンガス流量:	150 L/時間
MRM メソッド:	MRM メソッドの詳細については、付録を参照してください

データ管理

ソフトウェア:	定量のための waters_connect™
---------	------------------------

結果および考察

土壌サンプルおよび組織サンプルにおける回収率

EPA 1633 は性能に基づいた分析法であり、分析法に示されている性能基準がすべて満たされているかぎり、変更が可能です。この論文で示した唯一の変更点は、分散型 GCB クリーンアップステップを WAX SPE カートリッジに組み込んだ 2 層構造の 2 相 SPE カートリッジを使用したことでした。GCB は、作業が難しく、正確な測定も困難ですが、2 層カートリッジを使用することで、厄介な分散型 GCB ステップが不要になります。さらに重要な点として、GCB クリーンアップステップを SPE 抽出に組み入れることで、サンプル前処理プロセスにかかるラボでの貴重な時間を節約できます。さらに、前処理ステップが少ないため、意図しない PFAS サンプル汚染が導入される可能性が低くなります。この研究では、WAX の上に GCB を積み重ねたカートリッジを使用することで、WAX カートリッジにサンプルがロードされる前に GCB クリーンアップが行われる EPA 1633 のワークフローを再現しました。

このアプローチの同等性を証明するために確立する必要がある重要な性能基準の 1 つは、ターゲット分子種（ネイティブ）および抽出内部標準（EIS）の回収率の許容範囲です（同ドキュメント内の表 7 を参照）¹。2 層構造の 2 相 SPE カートリッジの土壌および魚の組織における個別の回収率を、各 EIS について表 1 に記載しています。表 1 で報告しているデータは、各種類のマトリックスの 3 回繰り返し抽出から得られた平均回収率と %RSD です。土壌サンプルおよび組織サンプルから抽出したすべての EIS の平均回収率はそれぞれ 81% および 85% で、土壌および組織の平均 RSD は

それぞれ 2.8% および 9.2% でした。

図 3 に、各種類のサンプル中の EIS の平均回収率を、EPA 1633 の表 7 の許容回収率と直接比較しています。この試験で分析した土壌および魚の組織中の PFAS はすべて、各化合物の回収率の許容範囲内に十分収まっており、いずれのケースも最小回収率のレベルを大幅に上回っていました。このことは、2 層構造の GCB/WAX SPE カートリッジが、分散型 GCB を使用する場合と同等の性能を発揮し、目的に適合していることを示しています。

化合物	土壌		魚の組織	
	平均回収率 (%)	%RSD	平均回収率 (%)	%RSD
¹³ C ₄ -PFBA	93.9	1.6	79.8	13.0
¹³ C ₅ -PFPeA	91.4	2.3	80.5	13.4
¹³ C ₅ -PFHxA	89.1	2.7	79.5	14.8
¹³ C ₄ -PFHpA	93.1	1.8	89.2	12.4
¹³ C ₈ -PFOA	92.4	1.1	81.9	14.7
¹³ C ₉ -PFNA	92.3	2.5	77.0	9.3
¹³ C ₆ -PFDA	88.7	0.5	77.8	5.7
¹³ C ₇ -PFUnDA	90.3	1.6	87.1	6.8
¹³ C-PFDoDA	83.0	2.1	87.4	5.3
¹³ C ₂ -PFTreDA	64.6	14.8	95.2	8.2
¹³ C ₃ -PFBS	89.1	11.4	81.3	16.1
¹³ C ₃ -PFHxS	88.8	5.6	108.8	12.7
¹³ C ₈ -PFOS	88.0	2.1	80.3	8.4
¹³ C ₂ -4:2 FTS	89.0	5.7	82.5	19.2
¹³ C ₂ -6:2 FTS	84.9	2.0	129.6	13.7
¹³ C ₂ -8:2 FTS	85.2	0.9	133.3	14.4
¹³ C ₈ -FOSA	93.7	4.3	92.9	4.9
¹³ C ₃ -GenX	89.3	4.5	81.0	12.7
D ₅ -N-EtFOSAA	88.2	1.0	141.5	4.8
D ₃ -N-MeFOSAA	88.7	1.3	152.7	7.6
d ₃ -NMeFOSA	58.5	4.8	70.3	6.7
d ₅ -NEtFOSA	51.9	2.1	26.7	6.6
d ₇ -NMeFOSE	57.6	10.6	66.5	5.3
d ₉ -NEtFOSE	52.2	10.3	63.2	5.0

表 1. 土壌および魚の組織に 2 層構造の 2 相 SPE カートリッジを使用した場合の抽出内部標準 (EIS) の平均回収率 ($n = 3$)

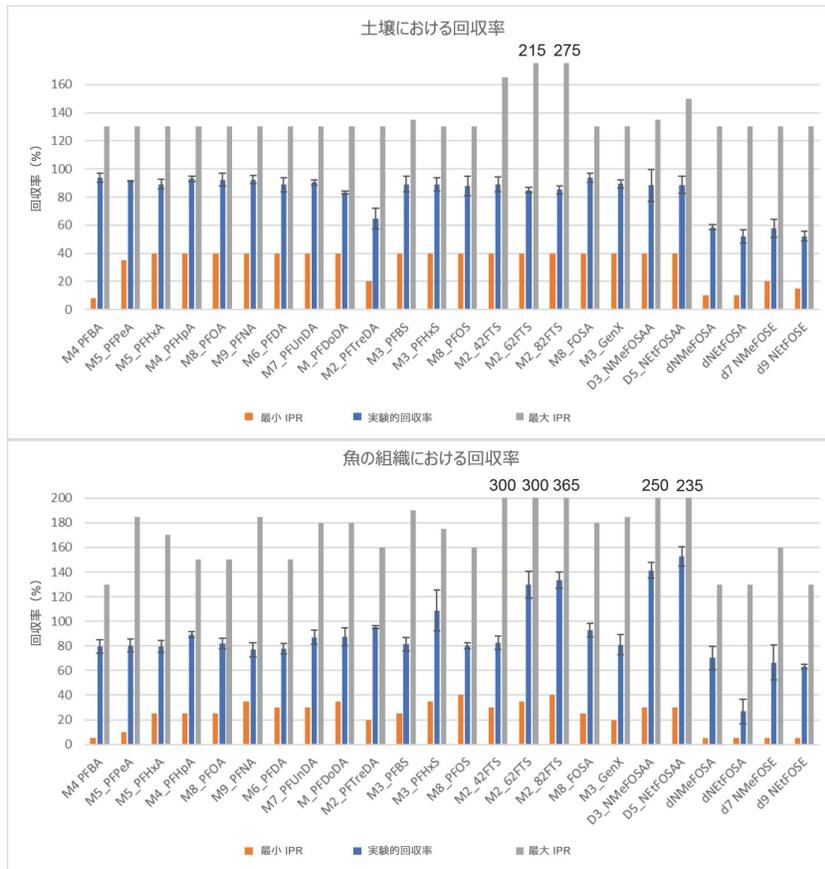


図3. 土壤（上）および魚の組織（下）からの抽出内部標準（EIS）の平均回収率。実験値（青色）を、EPA メソッド 1633 で許容されている最小回収率（オレンジ色）および最大回収率（灰色）と比較しています。各サンプルマトリックスについての繰り返し数 $n = 3$ 。グラフのスケールから外れているバーにラベル付けしています。

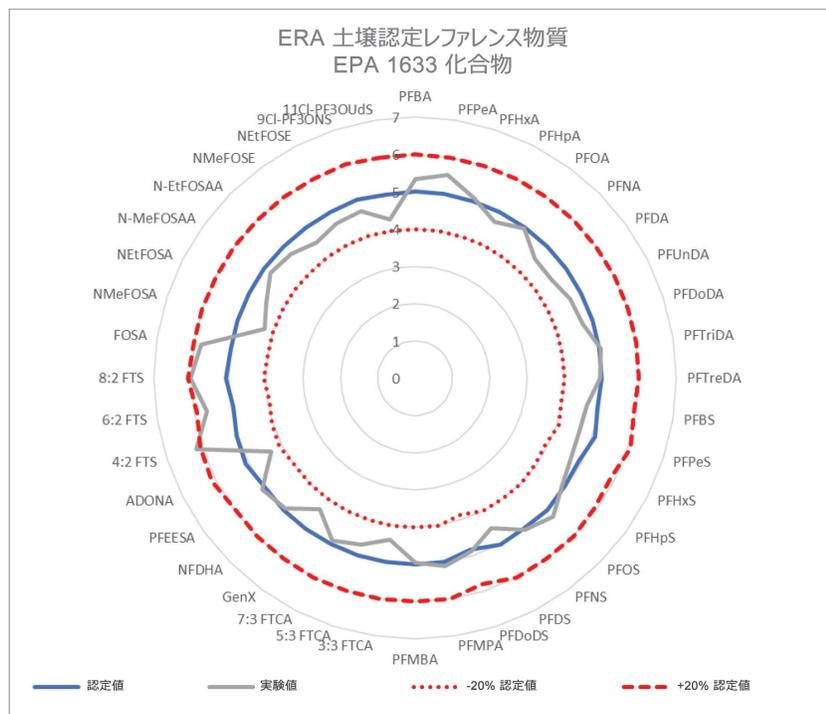


図 5. カスタム Waters ERA PFAS 含有土壤 CRM 中の 40 種の EPA 1633 ターゲット分析種すべての定量値。赤色の線は CRM の認証値範囲の ±20% を表しています。青色の線は認証値を表しています。灰色の実線は、平均の実験定量値 ($n = 3$) を表しています。

結論

土壤サンプルおよび魚の組織サンプルについて、EPA 1633 手順を使用して、サンプル前処理および分析を行いました。分散型 GCB を使用して 2 つの別々のステップで抽出とクリーンアップを行う代わりに、WAX と GCB の両方を含む Oasis GCB/WAX 2 層 SPE カートリッジを使用してサンプルの抽出とクリーンアップを行いました。このカートリッジにより、ユーザーエクスペリエンスが向上し、サンプル前処理にかかる時間が短縮しました。回収率はすべて許容基準の範囲内であり、土壤および魚の組織の平均の EIS 回収率はそれぞれ 81% および 85% でした。土壤と組織の平均 RSD はそれぞれ 2.8% と 9.2% でした。これにより、EPA 1633 に記載されているマルチステップ抽出およびクリーンアップの適切なシングルステップの代替法として、2 層構造の 2 相 SPE カートリッジの同等性が実証されました。さらに、同じメソッドを使用して処理および分析した Waters ERA 土壤レファレンス物質は、十分に認定レファレンス値の

範囲内に収まっていたことから、メソッドの正確性について、高い信頼性が得られました。示したデータから、PFAS 用 Oasis GCB/WAX SPE カートリッジを LC-MS/MS システムと組み合わせることにより、EPA 1633 の固体および組織の分析に関するすべての要件を容易に満たせることが実証されました。

参考文献

1. US Environmental Protection Agency. Analysis of Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS) in Aqueous, Solid, Biosolids, and Tissue Samples by LC-MS/MS. January 2024.
2. US Environmental Protection Agency. Clean Water Act Analytical Methods: CWA Analytical Methods for Per- and Polyfluorinated Alkyl Substances (PFAS). <https://www.epa.gov/cwa-methods/cwa-analytical-methods-and-polyfluorinated-alkyl-substances-pfas#documents> <<https://www.epa.gov/cwa-methods/cwa-analytical-methods-and-polyfluorinated-alkyl-substances-pfas#documents>> Accessed 31 Jan, 2024.
3. K Organtini, K Rosnack, P Hancock. Analysis of Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS) in Accordance with EPA 1633 Part 1: Establishing and Assessing the Method. Waters Application Note [720008117](#). 2023

付録

化合物	ブライカーサー	フラグメント	CV	CE	ソフト透過	内部標準	内部標準の種類
PFBA	213.0	169	10	10	いいえ	¹³ C ₃ -PFBA	-
PFPeA	262.9	219	10	5	いいえ	¹³ C ₅ -PFPeA	-
PFHxA	312.9	269	5	10	いいえ	¹³ C ₆ -PFHxA	-
		119	5	20			
PFHpA	362.9	319	15	10	いいえ	¹³ C ₄ -PFHpA	-
		169	15	15			
PFOA	412.9	369	10	10	いいえ	¹³ C ₈ -PFOA	-
		169	10	15			
PFNA	462.9	419	10	10	いいえ	¹³ C ₉ -PFNA	-
		219	10	15			
PFDA	512.9	468.9	15	9	いいえ	¹³ C ₆ -PFDA	-
		219	15	15			
PFUnDA	562.9	518.9	25	10	いいえ	¹³ C ₇ -PFUnDA	-
		269	25	20			
PFDoDA	612.9	568.9	30	10	いいえ	¹³ C-PFDoDA	-
		169	30	25			
PFTriDA	662.9	618.9	5	10	いいえ	¹³ C-PFDoDA + ¹³ C ₂ -PFTreDA	-
		169	5	30			
PFTreDA	712.9	668.9	10	25	いいえ	¹³ C ₂ -PFTreDA	-
		169	10	15			
PFBS	298.9	80.1	15	30	いいえ	¹³ C ₃ -PFBS	-
		99.1	15	30			
PFPeS	348.9	79.9	10	30	いいえ	¹³ C ₃ -PFHxS	-
		98.9	10	30			
PFHxS	398.9	80.1	10	35	いいえ	¹³ C ₃ -PFHxS	-
		99.1	10	30			
PFHpS	448.9	80.1	15	35	いいえ	¹³ C ₈ -PFOS	-
		99.1	15	35			
PFOS	498.9	80.1	15	40	いいえ	¹³ C ₈ -PFOS	-
		99.1	15	40			
PFNS	548.9	80.1	20	40	いいえ	¹³ C ₈ -PFOS	-
		99.1	20	40			
PFDS	598.9	80.1	46	46	いいえ	¹³ C ₈ -PFOS	-
		99.1	46	46			
PFDoDS	699.1	80	40	55	いいえ	¹³ C ₈ -PFOS	-
		99	40	55			
GenX (HFPO-DA)	285.0	169	5	7	はい	¹³ C ₃ -HFPO-DA	-
		119	5	35			
ADONA	376.9	251	10	10	いいえ	¹³ C ₃ -HFPO-DA	-
		85	10	25			
9Cl-PF3ONS	530.9	350.9	15	25	いいえ	¹³ C ₃ -HFPO-DA	-
		82.9	15	25			
11Cl-PF3OUdS	630.9	450.9	30	30	いいえ	¹³ C ₃ -HFPO-DA	-
		82.9	30	30			
4:2 FTS	326.9	306.9	15	15	いいえ	¹³ C ₂ -4:2 FTS	-
		80.9	15	35			
6:2 FTS	426.9	407	10	20	いいえ	¹³ C ₂ -6:2 FTS	-
		80.1	12	32			

化合物	リカーサー	フラグメント	CV	CE	ソフト透過	内部標準	内部標準の種類																																																																																																																																																																																																																																																																															
8:2 FTS	526.9	506.8	15	25	いいえ	¹³ C ₂ -8:2 FTS	-																																																																																																																																																																																																																																																																															
		80.9	15	37				FOSA	497.9	78	40	30	いいえ	¹³ C ₈ -FOSA	-	N-MeFOSA	511.9	168.9	40	30	いいえ	d ₃ NMeFOSA	-	218.9	40	25	N-EtFOSA	525.9	168.9	5	25	いいえ	d ₅ NEtFOSA	-	218.9	5	25	N-MeFOSAA	569.9	418.9	35	25	いいえ	d ₃ -N-MeFOSAA	-	219.1	35	20	N-EtFOSAA	584.0	418.9	15	20	いいえ	d ₅ -N-EtFOSAA	-	525.9	15	20	N-MeFOSE	616.0	59	15	15	いいえ	d ₇ -NMeFOSE	-	N-EtFOSE	630.0	59	15	15	いいえ	d ₉ -NEtFOSE	-	3:3 FTCA	241.0	116.9	5	40	いいえ	¹³ C ₅ -PFPeA	-	176.9	5	10	5:3 FTCA	340.9	216.9	5	25	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA	-	237	5	10	7:3 FTCA	440.9	316.9	10	22	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA	-	337	10	17	PFMPA	228.9	84.9	23	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFPeA		PFMBA	278.9	84.9	10	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA		PFEESA	314.9	82.9	15	20	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA	-	134.9	15	20	NFDHA	295.0	84.9	5	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA	-	200.9	5	10	¹³ C ₄ -PFBA	216.8	171.9	10	10	いいえ	¹³ C ₃ -PFBA	抽出 IS	¹³ C ₅ -PFPeA	267.9	223	10	5	いいえ	¹³ C ₂ -PFHxA	抽出 IS	¹³ C ₅ -PFHxA	317.9	272.9	10	5	いいえ	¹³ C ₂ -PFHxA	抽出 IS	119.9	10	20	¹³ C ₄ -PFHpA	366.9	321.9	15	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFHxA	抽出 IS	169	15	15	¹³ C ₈ -PFOA	420.9	375.9	5	15	いいえ	¹³ C ₄ -PFOA	抽出 IS	172	5	10	¹³ C ₉ -PFNA	471.9	426.9	10	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFNA	抽出 IS	223	10	15	¹³ C ₈ -PFDA	519	473.9	5	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	219	5	15	¹³ C ₇ -PFUnDA	569.9	524.9	5	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	274	5	15	¹³ C-PFDoDA	614.9	569.9	10	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	169	10	25	¹³ C ₂ -PFTreDA	714.9	169	25	35	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	669.9	25	10	¹³ C ₃ -PFBS	301.9	80.1	10	30	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	25	¹³ C ₃ -PFHxS	401.9	80.1	10	40	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	35	¹³ C ₈ -PFOS	506.9	80.1	15	40	いいえ
FOSA	497.9	78	40	30	いいえ	¹³ C ₈ -FOSA	-																																																																																																																																																																																																																																																																															
N-MeFOSA	511.9	168.9	40	30	いいえ	d ₃ NMeFOSA	-																																																																																																																																																																																																																																																																															
		218.9	40	25				N-EtFOSA	525.9	168.9	5	25	いいえ	d ₅ NEtFOSA	-	218.9	5	25	N-MeFOSAA	569.9	418.9	35	25	いいえ	d ₃ -N-MeFOSAA	-	219.1	35	20	N-EtFOSAA	584.0	418.9	15	20	いいえ	d ₅ -N-EtFOSAA	-	525.9	15	20	N-MeFOSE	616.0	59	15	15	いいえ	d ₇ -NMeFOSE	-	N-EtFOSE	630.0	59	15	15	いいえ	d ₉ -NEtFOSE	-	3:3 FTCA	241.0	116.9	5	40	いいえ	¹³ C ₅ -PFPeA	-	176.9	5	10	5:3 FTCA	340.9	216.9	5	25	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA	-	237	5	10	7:3 FTCA	440.9	316.9	10	22	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA	-	337	10	17	PFMPA	228.9	84.9	23	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFPeA		PFMBA	278.9	84.9	10	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA		PFEESA	314.9	82.9	15	20	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA	-	134.9	15	20	NFDHA	295.0	84.9	5	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA	-	200.9	5	10	¹³ C ₄ -PFBA	216.8	171.9	10	10	いいえ	¹³ C ₃ -PFBA	抽出 IS	¹³ C ₅ -PFPeA	267.9	223	10	5	いいえ	¹³ C ₂ -PFHxA	抽出 IS	¹³ C ₅ -PFHxA	317.9	272.9	10	5	いいえ	¹³ C ₂ -PFHxA	抽出 IS	119.9	10	20	¹³ C ₄ -PFHpA	366.9	321.9	15	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFHxA	抽出 IS	169	15	15	¹³ C ₈ -PFOA	420.9	375.9	5	15	いいえ	¹³ C ₄ -PFOA	抽出 IS	172	5	10	¹³ C ₉ -PFNA	471.9	426.9	10	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFNA	抽出 IS	223	10	15	¹³ C ₈ -PFDA	519	473.9	5	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	219	5	15	¹³ C ₇ -PFUnDA	569.9	524.9	5	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	274	5	15	¹³ C-PFDoDA	614.9	569.9	10	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	169	10	25	¹³ C ₂ -PFTreDA	714.9	169	25	35	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	669.9	25	10	¹³ C ₃ -PFBS	301.9	80.1	10	30	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	25	¹³ C ₃ -PFHxS	401.9	80.1	10	40	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	35	¹³ C ₈ -PFOS	506.9	80.1	15	40	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	99.1	15	40														
N-EtFOSA	525.9	168.9	5	25	いいえ	d ₅ NEtFOSA	-																																																																																																																																																																																																																																																																															
		218.9	5	25				N-MeFOSAA	569.9	418.9	35	25	いいえ	d ₃ -N-MeFOSAA	-	219.1	35	20	N-EtFOSAA	584.0	418.9	15	20	いいえ	d ₅ -N-EtFOSAA	-	525.9	15	20	N-MeFOSE	616.0	59	15	15	いいえ	d ₇ -NMeFOSE	-	N-EtFOSE	630.0	59	15	15	いいえ	d ₉ -NEtFOSE	-	3:3 FTCA	241.0	116.9	5	40	いいえ	¹³ C ₅ -PFPeA	-	176.9	5	10	5:3 FTCA	340.9	216.9	5	25	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA	-	237	5	10	7:3 FTCA	440.9	316.9	10	22	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA	-	337	10	17	PFMPA	228.9	84.9	23	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFPeA		PFMBA	278.9	84.9	10	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA		PFEESA	314.9	82.9	15	20	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA	-	134.9	15	20	NFDHA	295.0	84.9	5	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA	-	200.9	5	10	¹³ C ₄ -PFBA	216.8	171.9	10	10	いいえ	¹³ C ₃ -PFBA	抽出 IS	¹³ C ₅ -PFPeA	267.9	223	10	5	いいえ	¹³ C ₂ -PFHxA	抽出 IS	¹³ C ₅ -PFHxA	317.9	272.9	10	5	いいえ	¹³ C ₂ -PFHxA	抽出 IS	119.9	10	20	¹³ C ₄ -PFHpA	366.9	321.9	15	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFHxA	抽出 IS	169	15	15	¹³ C ₈ -PFOA	420.9	375.9	5	15	いいえ	¹³ C ₄ -PFOA	抽出 IS	172	5	10	¹³ C ₉ -PFNA	471.9	426.9	10	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFNA	抽出 IS	223	10	15	¹³ C ₈ -PFDA	519	473.9	5	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	219	5	15	¹³ C ₇ -PFUnDA	569.9	524.9	5	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	274	5	15	¹³ C-PFDoDA	614.9	569.9	10	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	169	10	25	¹³ C ₂ -PFTreDA	714.9	169	25	35	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	669.9	25	10	¹³ C ₃ -PFBS	301.9	80.1	10	30	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	25	¹³ C ₃ -PFHxS	401.9	80.1	10	40	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	35	¹³ C ₈ -PFOS	506.9	80.1	15	40	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	99.1	15	40																									
N-MeFOSAA	569.9	418.9	35	25	いいえ	d ₃ -N-MeFOSAA	-																																																																																																																																																																																																																																																																															
		219.1	35	20				N-EtFOSAA	584.0	418.9	15	20	いいえ	d ₅ -N-EtFOSAA	-	525.9	15	20	N-MeFOSE	616.0	59	15	15	いいえ	d ₇ -NMeFOSE	-	N-EtFOSE	630.0	59	15	15	いいえ	d ₉ -NEtFOSE	-	3:3 FTCA	241.0	116.9	5	40	いいえ	¹³ C ₅ -PFPeA	-	176.9	5	10	5:3 FTCA	340.9	216.9	5	25	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA	-	237	5	10	7:3 FTCA	440.9	316.9	10	22	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA	-	337	10	17	PFMPA	228.9	84.9	23	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFPeA		PFMBA	278.9	84.9	10	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA		PFEESA	314.9	82.9	15	20	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA	-	134.9	15	20	NFDHA	295.0	84.9	5	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA	-	200.9	5	10	¹³ C ₄ -PFBA	216.8	171.9	10	10	いいえ	¹³ C ₃ -PFBA	抽出 IS	¹³ C ₅ -PFPeA	267.9	223	10	5	いいえ	¹³ C ₂ -PFHxA	抽出 IS	¹³ C ₅ -PFHxA	317.9	272.9	10	5	いいえ	¹³ C ₂ -PFHxA	抽出 IS	119.9	10	20	¹³ C ₄ -PFHpA	366.9	321.9	15	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFHxA	抽出 IS	169	15	15	¹³ C ₈ -PFOA	420.9	375.9	5	15	いいえ	¹³ C ₄ -PFOA	抽出 IS	172	5	10	¹³ C ₉ -PFNA	471.9	426.9	10	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFNA	抽出 IS	223	10	15	¹³ C ₈ -PFDA	519	473.9	5	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	219	5	15	¹³ C ₇ -PFUnDA	569.9	524.9	5	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	274	5	15	¹³ C-PFDoDA	614.9	569.9	10	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	169	10	25	¹³ C ₂ -PFTreDA	714.9	169	25	35	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	669.9	25	10	¹³ C ₃ -PFBS	301.9	80.1	10	30	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	25	¹³ C ₃ -PFHxS	401.9	80.1	10	40	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	35	¹³ C ₈ -PFOS	506.9	80.1	15	40	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	99.1	15	40																																				
N-EtFOSAA	584.0	418.9	15	20	いいえ	d ₅ -N-EtFOSAA	-																																																																																																																																																																																																																																																																															
		525.9	15	20				N-MeFOSE	616.0	59	15	15	いいえ	d ₇ -NMeFOSE	-	N-EtFOSE	630.0	59	15	15	いいえ	d ₉ -NEtFOSE	-	3:3 FTCA	241.0	116.9	5	40	いいえ	¹³ C ₅ -PFPeA	-	176.9	5	10	5:3 FTCA	340.9	216.9	5	25	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA	-	237	5	10	7:3 FTCA	440.9	316.9	10	22	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA	-	337	10	17	PFMPA	228.9	84.9	23	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFPeA		PFMBA	278.9	84.9	10	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA		PFEESA	314.9	82.9	15	20	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA	-	134.9	15	20	NFDHA	295.0	84.9	5	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA	-	200.9	5	10	¹³ C ₄ -PFBA	216.8	171.9	10	10	いいえ	¹³ C ₃ -PFBA	抽出 IS	¹³ C ₅ -PFPeA	267.9	223	10	5	いいえ	¹³ C ₂ -PFHxA	抽出 IS	¹³ C ₅ -PFHxA	317.9	272.9	10	5	いいえ	¹³ C ₂ -PFHxA	抽出 IS	119.9	10	20	¹³ C ₄ -PFHpA	366.9	321.9	15	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFHxA	抽出 IS	169	15	15	¹³ C ₈ -PFOA	420.9	375.9	5	15	いいえ	¹³ C ₄ -PFOA	抽出 IS	172	5	10	¹³ C ₉ -PFNA	471.9	426.9	10	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFNA	抽出 IS	223	10	15	¹³ C ₈ -PFDA	519	473.9	5	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	219	5	15	¹³ C ₇ -PFUnDA	569.9	524.9	5	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	274	5	15	¹³ C-PFDoDA	614.9	569.9	10	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	169	10	25	¹³ C ₂ -PFTreDA	714.9	169	25	35	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	669.9	25	10	¹³ C ₃ -PFBS	301.9	80.1	10	30	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	25	¹³ C ₃ -PFHxS	401.9	80.1	10	40	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	35	¹³ C ₈ -PFOS	506.9	80.1	15	40	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	99.1	15	40																																															
N-MeFOSE	616.0	59	15	15	いいえ	d ₇ -NMeFOSE	-																																																																																																																																																																																																																																																																															
N-EtFOSE	630.0	59	15	15	いいえ	d ₉ -NEtFOSE	-																																																																																																																																																																																																																																																																															
3:3 FTCA	241.0	116.9	5	40	いいえ	¹³ C ₅ -PFPeA	-																																																																																																																																																																																																																																																																															
		176.9	5	10				5:3 FTCA	340.9	216.9	5	25	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA	-	237	5	10	7:3 FTCA	440.9	316.9	10	22	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA	-	337	10	17	PFMPA	228.9	84.9	23	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFPeA		PFMBA	278.9	84.9	10	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA		PFEESA	314.9	82.9	15	20	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA	-	134.9	15	20	NFDHA	295.0	84.9	5	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA	-	200.9	5	10	¹³ C ₄ -PFBA	216.8	171.9	10	10	いいえ	¹³ C ₃ -PFBA	抽出 IS	¹³ C ₅ -PFPeA	267.9	223	10	5	いいえ	¹³ C ₂ -PFHxA	抽出 IS	¹³ C ₅ -PFHxA	317.9	272.9	10	5	いいえ	¹³ C ₂ -PFHxA	抽出 IS	119.9	10	20	¹³ C ₄ -PFHpA	366.9	321.9	15	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFHxA	抽出 IS	169	15	15	¹³ C ₈ -PFOA	420.9	375.9	5	15	いいえ	¹³ C ₄ -PFOA	抽出 IS	172	5	10	¹³ C ₉ -PFNA	471.9	426.9	10	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFNA	抽出 IS	223	10	15	¹³ C ₈ -PFDA	519	473.9	5	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	219	5	15	¹³ C ₇ -PFUnDA	569.9	524.9	5	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	274	5	15	¹³ C-PFDoDA	614.9	569.9	10	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	169	10	25	¹³ C ₂ -PFTreDA	714.9	169	25	35	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	669.9	25	10	¹³ C ₃ -PFBS	301.9	80.1	10	30	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	25	¹³ C ₃ -PFHxS	401.9	80.1	10	40	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	35	¹³ C ₈ -PFOS	506.9	80.1	15	40	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	99.1	15	40																																																																										
5:3 FTCA	340.9	216.9	5	25	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA	-																																																																																																																																																																																																																																																																															
		237	5	10				7:3 FTCA	440.9	316.9	10	22	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA	-	337	10	17	PFMPA	228.9	84.9	23	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFPeA		PFMBA	278.9	84.9	10	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA		PFEESA	314.9	82.9	15	20	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA	-	134.9	15	20	NFDHA	295.0	84.9	5	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA	-	200.9	5	10	¹³ C ₄ -PFBA	216.8	171.9	10	10	いいえ	¹³ C ₃ -PFBA	抽出 IS	¹³ C ₅ -PFPeA	267.9	223	10	5	いいえ	¹³ C ₂ -PFHxA	抽出 IS	¹³ C ₅ -PFHxA	317.9	272.9	10	5	いいえ	¹³ C ₂ -PFHxA	抽出 IS	119.9	10	20	¹³ C ₄ -PFHpA	366.9	321.9	15	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFHxA	抽出 IS	169	15	15	¹³ C ₈ -PFOA	420.9	375.9	5	15	いいえ	¹³ C ₄ -PFOA	抽出 IS	172	5	10	¹³ C ₉ -PFNA	471.9	426.9	10	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFNA	抽出 IS	223	10	15	¹³ C ₈ -PFDA	519	473.9	5	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	219	5	15	¹³ C ₇ -PFUnDA	569.9	524.9	5	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	274	5	15	¹³ C-PFDoDA	614.9	569.9	10	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	169	10	25	¹³ C ₂ -PFTreDA	714.9	169	25	35	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	669.9	25	10	¹³ C ₃ -PFBS	301.9	80.1	10	30	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	25	¹³ C ₃ -PFHxS	401.9	80.1	10	40	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	35	¹³ C ₈ -PFOS	506.9	80.1	15	40	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	99.1	15	40																																																																																					
7:3 FTCA	440.9	316.9	10	22	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA	-																																																																																																																																																																																																																																																																															
		337	10	17				PFMPA	228.9	84.9	23	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFPeA		PFMBA	278.9	84.9	10	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA		PFEESA	314.9	82.9	15	20	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA	-	134.9	15	20	NFDHA	295.0	84.9	5	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA	-	200.9	5	10	¹³ C ₄ -PFBA	216.8	171.9	10	10	いいえ	¹³ C ₃ -PFBA	抽出 IS	¹³ C ₅ -PFPeA	267.9	223	10	5	いいえ	¹³ C ₂ -PFHxA	抽出 IS	¹³ C ₅ -PFHxA	317.9	272.9	10	5	いいえ	¹³ C ₂ -PFHxA	抽出 IS	119.9	10	20	¹³ C ₄ -PFHpA	366.9	321.9	15	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFHxA	抽出 IS	169	15	15	¹³ C ₈ -PFOA	420.9	375.9	5	15	いいえ	¹³ C ₄ -PFOA	抽出 IS	172	5	10	¹³ C ₉ -PFNA	471.9	426.9	10	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFNA	抽出 IS	223	10	15	¹³ C ₈ -PFDA	519	473.9	5	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	219	5	15	¹³ C ₇ -PFUnDA	569.9	524.9	5	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	274	5	15	¹³ C-PFDoDA	614.9	569.9	10	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	169	10	25	¹³ C ₂ -PFTreDA	714.9	169	25	35	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	669.9	25	10	¹³ C ₃ -PFBS	301.9	80.1	10	30	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	25	¹³ C ₃ -PFHxS	401.9	80.1	10	40	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	35	¹³ C ₈ -PFOS	506.9	80.1	15	40	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	99.1	15	40																																																																																																
PFMPA	228.9	84.9	23	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFPeA																																																																																																																																																																																																																																																																																
PFMBA	278.9	84.9	10	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA																																																																																																																																																																																																																																																																																
PFEESA	314.9	82.9	15	20	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA	-																																																																																																																																																																																																																																																																															
		134.9	15	20				NFDHA	295.0	84.9	5	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA	-	200.9	5	10	¹³ C ₄ -PFBA	216.8	171.9	10	10	いいえ	¹³ C ₃ -PFBA	抽出 IS	¹³ C ₅ -PFPeA	267.9	223	10	5	いいえ	¹³ C ₂ -PFHxA	抽出 IS	¹³ C ₅ -PFHxA	317.9	272.9	10	5	いいえ	¹³ C ₂ -PFHxA	抽出 IS	119.9	10	20	¹³ C ₄ -PFHpA	366.9	321.9	15	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFHxA	抽出 IS	169	15	15	¹³ C ₈ -PFOA	420.9	375.9	5	15	いいえ	¹³ C ₄ -PFOA	抽出 IS	172	5	10	¹³ C ₉ -PFNA	471.9	426.9	10	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFNA	抽出 IS	223	10	15	¹³ C ₈ -PFDA	519	473.9	5	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	219	5	15	¹³ C ₇ -PFUnDA	569.9	524.9	5	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	274	5	15	¹³ C-PFDoDA	614.9	569.9	10	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	169	10	25	¹³ C ₂ -PFTreDA	714.9	169	25	35	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	669.9	25	10	¹³ C ₃ -PFBS	301.9	80.1	10	30	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	25	¹³ C ₃ -PFHxS	401.9	80.1	10	40	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	35	¹³ C ₈ -PFOS	506.9	80.1	15	40	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	99.1	15	40																																																																																																																											
NFDHA	295.0	84.9	5	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFHxA	-																																																																																																																																																																																																																																																																															
		200.9	5	10				¹³ C ₄ -PFBA	216.8	171.9	10	10	いいえ	¹³ C ₃ -PFBA	抽出 IS	¹³ C ₅ -PFPeA	267.9	223	10	5	いいえ	¹³ C ₂ -PFHxA	抽出 IS	¹³ C ₅ -PFHxA	317.9	272.9	10	5	いいえ	¹³ C ₂ -PFHxA	抽出 IS	119.9	10	20	¹³ C ₄ -PFHpA	366.9	321.9	15	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFHxA	抽出 IS	169	15	15	¹³ C ₈ -PFOA	420.9	375.9	5	15	いいえ	¹³ C ₄ -PFOA	抽出 IS	172	5	10	¹³ C ₉ -PFNA	471.9	426.9	10	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFNA	抽出 IS	223	10	15	¹³ C ₈ -PFDA	519	473.9	5	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	219	5	15	¹³ C ₇ -PFUnDA	569.9	524.9	5	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	274	5	15	¹³ C-PFDoDA	614.9	569.9	10	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	169	10	25	¹³ C ₂ -PFTreDA	714.9	169	25	35	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	669.9	25	10	¹³ C ₃ -PFBS	301.9	80.1	10	30	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	25	¹³ C ₃ -PFHxS	401.9	80.1	10	40	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	35	¹³ C ₈ -PFOS	506.9	80.1	15	40	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	99.1	15	40																																																																																																																																						
¹³ C ₄ -PFBA	216.8	171.9	10	10	いいえ	¹³ C ₃ -PFBA	抽出 IS																																																																																																																																																																																																																																																																															
¹³ C ₅ -PFPeA	267.9	223	10	5	いいえ	¹³ C ₂ -PFHxA	抽出 IS																																																																																																																																																																																																																																																																															
¹³ C ₅ -PFHxA	317.9	272.9	10	5	いいえ	¹³ C ₂ -PFHxA	抽出 IS																																																																																																																																																																																																																																																																															
		119.9	10	20				¹³ C ₄ -PFHpA	366.9	321.9	15	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFHxA	抽出 IS	169	15	15	¹³ C ₈ -PFOA	420.9	375.9	5	15	いいえ	¹³ C ₄ -PFOA	抽出 IS	172	5	10	¹³ C ₉ -PFNA	471.9	426.9	10	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFNA	抽出 IS	223	10	15	¹³ C ₈ -PFDA	519	473.9	5	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	219	5	15	¹³ C ₇ -PFUnDA	569.9	524.9	5	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	274	5	15	¹³ C-PFDoDA	614.9	569.9	10	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	169	10	25	¹³ C ₂ -PFTreDA	714.9	169	25	35	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	669.9	25	10	¹³ C ₃ -PFBS	301.9	80.1	10	30	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	25	¹³ C ₃ -PFHxS	401.9	80.1	10	40	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	35	¹³ C ₈ -PFOS	506.9	80.1	15	40	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	99.1	15	40																																																																																																																																																																	
¹³ C ₄ -PFHpA	366.9	321.9	15	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFHxA	抽出 IS																																																																																																																																																																																																																																																																															
		169	15	15				¹³ C ₈ -PFOA	420.9	375.9	5	15	いいえ	¹³ C ₄ -PFOA	抽出 IS	172	5	10	¹³ C ₉ -PFNA	471.9	426.9	10	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFNA	抽出 IS	223	10	15	¹³ C ₈ -PFDA	519	473.9	5	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	219	5	15	¹³ C ₇ -PFUnDA	569.9	524.9	5	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	274	5	15	¹³ C-PFDoDA	614.9	569.9	10	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	169	10	25	¹³ C ₂ -PFTreDA	714.9	169	25	35	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	669.9	25	10	¹³ C ₃ -PFBS	301.9	80.1	10	30	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	25	¹³ C ₃ -PFHxS	401.9	80.1	10	40	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	35	¹³ C ₈ -PFOS	506.9	80.1	15	40	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	99.1	15	40																																																																																																																																																																												
¹³ C ₈ -PFOA	420.9	375.9	5	15	いいえ	¹³ C ₄ -PFOA	抽出 IS																																																																																																																																																																																																																																																																															
		172	5	10				¹³ C ₉ -PFNA	471.9	426.9	10	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFNA	抽出 IS	223	10	15	¹³ C ₈ -PFDA	519	473.9	5	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	219	5	15	¹³ C ₇ -PFUnDA	569.9	524.9	5	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	274	5	15	¹³ C-PFDoDA	614.9	569.9	10	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	169	10	25	¹³ C ₂ -PFTreDA	714.9	169	25	35	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	669.9	25	10	¹³ C ₃ -PFBS	301.9	80.1	10	30	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	25	¹³ C ₃ -PFHxS	401.9	80.1	10	40	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	35	¹³ C ₈ -PFOS	506.9	80.1	15	40	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	99.1	15	40																																																																																																																																																																																							
¹³ C ₉ -PFNA	471.9	426.9	10	10	いいえ	¹³ C ₅ -PFNA	抽出 IS																																																																																																																																																																																																																																																																															
		223	10	15				¹³ C ₈ -PFDA	519	473.9	5	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	219	5	15	¹³ C ₇ -PFUnDA	569.9	524.9	5	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	274	5	15	¹³ C-PFDoDA	614.9	569.9	10	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	169	10	25	¹³ C ₂ -PFTreDA	714.9	169	25	35	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	669.9	25	10	¹³ C ₃ -PFBS	301.9	80.1	10	30	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	25	¹³ C ₃ -PFHxS	401.9	80.1	10	40	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	35	¹³ C ₈ -PFOS	506.9	80.1	15	40	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	99.1	15	40																																																																																																																																																																																																		
¹³ C ₈ -PFDA	519	473.9	5	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS																																																																																																																																																																																																																																																																															
		219	5	15				¹³ C ₇ -PFUnDA	569.9	524.9	5	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	274	5	15	¹³ C-PFDoDA	614.9	569.9	10	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	169	10	25	¹³ C ₂ -PFTreDA	714.9	169	25	35	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	669.9	25	10	¹³ C ₃ -PFBS	301.9	80.1	10	30	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	25	¹³ C ₃ -PFHxS	401.9	80.1	10	40	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	35	¹³ C ₈ -PFOS	506.9	80.1	15	40	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	99.1	15	40																																																																																																																																																																																																													
¹³ C ₇ -PFUnDA	569.9	524.9	5	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS																																																																																																																																																																																																																																																																															
		274	5	15				¹³ C-PFDoDA	614.9	569.9	10	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	169	10	25	¹³ C ₂ -PFTreDA	714.9	169	25	35	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	669.9	25	10	¹³ C ₃ -PFBS	301.9	80.1	10	30	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	25	¹³ C ₃ -PFHxS	401.9	80.1	10	40	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	35	¹³ C ₈ -PFOS	506.9	80.1	15	40	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	99.1	15	40																																																																																																																																																																																																																								
¹³ C-PFDoDA	614.9	569.9	10	10	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS																																																																																																																																																																																																																																																																															
		169	10	25				¹³ C ₂ -PFTreDA	714.9	169	25	35	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS	669.9	25	10	¹³ C ₃ -PFBS	301.9	80.1	10	30	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	25	¹³ C ₃ -PFHxS	401.9	80.1	10	40	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	35	¹³ C ₈ -PFOS	506.9	80.1	15	40	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	99.1	15	40																																																																																																																																																																																																																																			
¹³ C ₂ -PFTreDA	714.9	169	25	35	いいえ	¹³ C ₂ -PFDA	抽出 IS																																																																																																																																																																																																																																																																															
		669.9	25	10				¹³ C ₃ -PFBS	301.9	80.1	10	30	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	25	¹³ C ₃ -PFHxS	401.9	80.1	10	40	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	35	¹³ C ₈ -PFOS	506.9	80.1	15	40	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	99.1	15	40																																																																																																																																																																																																																																														
¹³ C ₃ -PFBS	301.9	80.1	10	30	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS																																																																																																																																																																																																																																																																															
		99.1	10	25				¹³ C ₃ -PFHxS	401.9	80.1	10	40	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS	99.1	10	35	¹³ C ₈ -PFOS	506.9	80.1	15	40	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	99.1	15	40																																																																																																																																																																																																																																																									
¹³ C ₃ -PFHxS	401.9	80.1	10	40	いいえ	18O2-PFHxS	抽出 IS																																																																																																																																																																																																																																																																															
		99.1	10	35				¹³ C ₈ -PFOS	506.9	80.1	15	40	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	99.1	15	40																																																																																																																																																																																																																																																																				
¹³ C ₈ -PFOS	506.9	80.1	15	40	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS																																																																																																																																																																																																																																																																															
		99.1	15	40																																																																																																																																																																																																																																																																																		

化合物	プリカーサー	フラグメント	CV	CE	ソフト透過	内部標準	内部標準の種類																																																																																																																																																								
¹³ C ₃ -GenX	287	169	5	12	はい	¹³ C ₂ -PFHxA	抽出 IS																																																																																																																																																								
		119	5	12				¹³ C ₂ -4:2 FTS	328.9	308.9	40	15	いいえ	¹⁸ O ₂ -PFHxS	抽出 IS	81	40	25	¹³ C ₂ -6:2 FTS	428.9	409	10	20	いいえ	¹⁸ O ₂ -PFHxS	抽出 IS	80.9	10	27	¹³ C ₂ -8:2 FTS	528.9	508.9	10	20	いいえ	¹⁸ O ₂ -PFHxS	抽出 IS	81	10	35	¹³ C ₉ -FOSA	505.9	78.1	35	25	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	d ₃ NMeFOSA	514.9	168.9	40	30	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	d ₆ NETFOSA	531	168.9	5	25	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	D ₅ -N-EtFOSAA	589	418.9	30	20	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	506.9	30	15	D ₃ -N-MeFOSAA	572.9	418.9	35	20	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	482.7	35	15	d ₇ -NMeFOSE	623	58.9	15	15	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	d ₉ -NETFOSE	639	58.9	15	15	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	¹³ C ₃ -PFBA	216	172	10	10	いいえ	-	未抽出 IS	¹³ C ₂ -PFHxA	314.9	119.9	10	20	いいえ	-	未抽出 IS	270	10	5	¹³ C ₄ -PFOA	417	172	10	20	いいえ	-	未抽出 IS	¹³ C ₅ -PFNA	468	423	10	10	いいえ	-	未抽出 IS	¹³ C ₂ -PFDA	515	470	20	10	いいえ	-	未抽出 IS	¹⁸ O ₂ -PFHxS	403	83.9	10	40	いいえ	-	未抽出 IS	¹³ C ₄ -PFOS	503	80.2	15	40	いいえ
¹³ C ₂ -4:2 FTS	328.9	308.9	40	15	いいえ	¹⁸ O ₂ -PFHxS	抽出 IS																																																																																																																																																								
		81	40	25				¹³ C ₂ -6:2 FTS	428.9	409	10	20	いいえ	¹⁸ O ₂ -PFHxS	抽出 IS	80.9	10	27	¹³ C ₂ -8:2 FTS	528.9	508.9	10	20	いいえ	¹⁸ O ₂ -PFHxS	抽出 IS	81	10	35	¹³ C ₉ -FOSA	505.9	78.1	35	25	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	d ₃ NMeFOSA	514.9	168.9	40	30	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	d ₆ NETFOSA	531	168.9	5	25	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	D ₅ -N-EtFOSAA	589	418.9	30	20	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	506.9	30	15	D ₃ -N-MeFOSAA	572.9	418.9	35	20	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	482.7	35	15	d ₇ -NMeFOSE	623	58.9	15	15	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	d ₉ -NETFOSE	639	58.9	15	15	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	¹³ C ₃ -PFBA	216	172	10	10	いいえ	-	未抽出 IS	¹³ C ₂ -PFHxA	314.9	119.9	10	20	いいえ	-	未抽出 IS	270	10	5	¹³ C ₄ -PFOA	417	172	10	20	いいえ	-	未抽出 IS	¹³ C ₅ -PFNA	468	423	10	10	いいえ	-	未抽出 IS	¹³ C ₂ -PFDA	515	470	20	10	いいえ	-	未抽出 IS	¹⁸ O ₂ -PFHxS	403	83.9	10	40	いいえ	-	未抽出 IS	¹³ C ₄ -PFOS	503	80.2	15	40	いいえ	-	未抽出 IS	99.1	15	40						
¹³ C ₂ -6:2 FTS	428.9	409	10	20	いいえ	¹⁸ O ₂ -PFHxS	抽出 IS																																																																																																																																																								
		80.9	10	27				¹³ C ₂ -8:2 FTS	528.9	508.9	10	20	いいえ	¹⁸ O ₂ -PFHxS	抽出 IS	81	10	35	¹³ C ₉ -FOSA	505.9	78.1	35	25	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	d ₃ NMeFOSA	514.9	168.9	40	30	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	d ₆ NETFOSA	531	168.9	5	25	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	D ₅ -N-EtFOSAA	589	418.9	30	20	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	506.9	30	15	D ₃ -N-MeFOSAA	572.9	418.9	35	20	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	482.7	35	15	d ₇ -NMeFOSE	623	58.9	15	15	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	d ₉ -NETFOSE	639	58.9	15	15	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	¹³ C ₃ -PFBA	216	172	10	10	いいえ	-	未抽出 IS	¹³ C ₂ -PFHxA	314.9	119.9	10	20	いいえ	-	未抽出 IS	270	10	5	¹³ C ₄ -PFOA	417	172	10	20	いいえ	-	未抽出 IS	¹³ C ₅ -PFNA	468	423	10	10	いいえ	-	未抽出 IS	¹³ C ₂ -PFDA	515	470	20	10	いいえ	-	未抽出 IS	¹⁸ O ₂ -PFHxS	403	83.9	10	40	いいえ	-	未抽出 IS	¹³ C ₄ -PFOS	503	80.2	15	40	いいえ	-	未抽出 IS	99.1	15	40																	
¹³ C ₂ -8:2 FTS	528.9	508.9	10	20	いいえ	¹⁸ O ₂ -PFHxS	抽出 IS																																																																																																																																																								
		81	10	35				¹³ C ₉ -FOSA	505.9	78.1	35	25	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	d ₃ NMeFOSA	514.9	168.9	40	30	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	d ₆ NETFOSA	531	168.9	5	25	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	D ₅ -N-EtFOSAA	589	418.9	30	20	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	506.9	30	15	D ₃ -N-MeFOSAA	572.9	418.9	35	20	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	482.7	35	15	d ₇ -NMeFOSE	623	58.9	15	15	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	d ₉ -NETFOSE	639	58.9	15	15	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	¹³ C ₃ -PFBA	216	172	10	10	いいえ	-	未抽出 IS	¹³ C ₂ -PFHxA	314.9	119.9	10	20	いいえ	-	未抽出 IS	270	10	5	¹³ C ₄ -PFOA	417	172	10	20	いいえ	-	未抽出 IS	¹³ C ₅ -PFNA	468	423	10	10	いいえ	-	未抽出 IS	¹³ C ₂ -PFDA	515	470	20	10	いいえ	-	未抽出 IS	¹⁸ O ₂ -PFHxS	403	83.9	10	40	いいえ	-	未抽出 IS	¹³ C ₄ -PFOS	503	80.2	15	40	いいえ	-	未抽出 IS	99.1	15	40																												
¹³ C ₉ -FOSA	505.9	78.1	35	25	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS																																																																																																																																																								
d ₃ NMeFOSA	514.9	168.9	40	30	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS																																																																																																																																																								
d ₆ NETFOSA	531	168.9	5	25	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS																																																																																																																																																								
D ₅ -N-EtFOSAA	589	418.9	30	20	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS																																																																																																																																																								
		506.9	30	15				D ₃ -N-MeFOSAA	572.9	418.9	35	20	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	482.7	35	15	d ₇ -NMeFOSE	623	58.9	15	15	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	d ₉ -NETFOSE	639	58.9	15	15	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	¹³ C ₃ -PFBA	216	172	10	10	いいえ	-	未抽出 IS	¹³ C ₂ -PFHxA	314.9	119.9	10	20	いいえ	-	未抽出 IS	270	10	5	¹³ C ₄ -PFOA	417	172	10	20	いいえ	-	未抽出 IS	¹³ C ₅ -PFNA	468	423	10	10	いいえ	-	未抽出 IS	¹³ C ₂ -PFDA	515	470	20	10	いいえ	-	未抽出 IS	¹⁸ O ₂ -PFHxS	403	83.9	10	40	いいえ	-	未抽出 IS	¹³ C ₄ -PFOS	503	80.2	15	40	いいえ	-	未抽出 IS	99.1	15	40																																																															
D ₃ -N-MeFOSAA	572.9	418.9	35	20	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS																																																																																																																																																								
		482.7	35	15				d ₇ -NMeFOSE	623	58.9	15	15	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	d ₉ -NETFOSE	639	58.9	15	15	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS	¹³ C ₃ -PFBA	216	172	10	10	いいえ	-	未抽出 IS	¹³ C ₂ -PFHxA	314.9	119.9	10	20	いいえ	-	未抽出 IS	270	10	5	¹³ C ₄ -PFOA	417	172	10	20	いいえ	-	未抽出 IS	¹³ C ₅ -PFNA	468	423	10	10	いいえ	-	未抽出 IS	¹³ C ₂ -PFDA	515	470	20	10	いいえ	-	未抽出 IS	¹⁸ O ₂ -PFHxS	403	83.9	10	40	いいえ	-	未抽出 IS	¹³ C ₄ -PFOS	503	80.2	15	40	いいえ	-	未抽出 IS	99.1	15	40																																																																										
d ₇ -NMeFOSE	623	58.9	15	15	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS																																																																																																																																																								
d ₉ -NETFOSE	639	58.9	15	15	いいえ	¹³ C ₄ -PFOS	抽出 IS																																																																																																																																																								
¹³ C ₃ -PFBA	216	172	10	10	いいえ	-	未抽出 IS																																																																																																																																																								
¹³ C ₂ -PFHxA	314.9	119.9	10	20	いいえ	-	未抽出 IS																																																																																																																																																								
		270	10	5				¹³ C ₄ -PFOA	417	172	10	20	いいえ	-	未抽出 IS	¹³ C ₅ -PFNA	468	423	10	10	いいえ	-	未抽出 IS	¹³ C ₂ -PFDA	515	470	20	10	いいえ	-	未抽出 IS	¹⁸ O ₂ -PFHxS	403	83.9	10	40	いいえ	-	未抽出 IS	¹³ C ₄ -PFOS	503	80.2	15	40	いいえ	-	未抽出 IS	99.1	15	40																																																																																																													
¹³ C ₄ -PFOA	417	172	10	20	いいえ	-	未抽出 IS																																																																																																																																																								
¹³ C ₅ -PFNA	468	423	10	10	いいえ	-	未抽出 IS																																																																																																																																																								
¹³ C ₂ -PFDA	515	470	20	10	いいえ	-	未抽出 IS																																																																																																																																																								
¹⁸ O ₂ -PFHxS	403	83.9	10	40	いいえ	-	未抽出 IS																																																																																																																																																								
¹³ C ₄ -PFOS	503	80.2	15	40	いいえ	-	未抽出 IS																																																																																																																																																								
		99.1	15	40																																																																																																																																																											

付録表 1. Xevo TQ Absolute MS での水サンプル中の EPA 1633 化合物の PFAS 分析に使用した MS 分析法条件

化合物	キャリブレーション 1 (ng/mL)	キャリブレーション 2 (ng/mL)	キャリブレーション 3 (ng/mL)	キャリブレーション 4 (ng/mL)	キャリブレーション 5 (ng/mL)	キャリブレーション 6 (ng/mL)	キャリブレーション 7 (ng/mL)	キャリブレーション 8 (ng/mL)
PFBA	0.02	0.04	0.20	0.40	1.00	2.00	4.0	10.0
PFPeA	0.01	0.02	0.10	0.20	0.50	1.00	2.0	5.0
PFHxA	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
PFHpA	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
PFOA	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
PFNA	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
PFDA	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
PFUnDA	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
PFDoDA	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
PFTriDA	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
PFTreDA	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
PFBS	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
PFPeS	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
PFHxS	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
PFHpS	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
PFOS	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
PFNS	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
PFDS	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
PFDoDS	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
GenX	0.01	0.02	0.10	0.20	0.50	1.00	2.0	5.0
ADONA	0.01	0.02	0.10	0.20	0.50	1.00	2.0	5.0
9ClPF3ONS	0.01	0.02	0.10	0.20	0.50	1.00	2.0	5.0
11ClPF3OUdS	0.01	0.02	0.10	0.20	0.50	1.00	2.0	5.0
4_2 FTS	0.02	0.04	0.20	0.40	1.00	2.00	4.0	10.0
6_2 FTS	0.02	0.04	0.20	0.40	1.00	2.00	4.0	10.0
8_2 FTS	0.02	0.04	0.20	0.40	1.00	2.00	4.0	10.0
FOSA	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
NMeFOSA	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
NEtFOSA	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
NMeFOSAA	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
NEtFOSAA	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
NMeFOSE	0.05	0.10	0.50	1.00	2.50	5.00	10.0	25.0
NEtFOSE	0.05	0.10	0.50	1.00	2.50	5.00	10.0	25.0
3:3 FTCA	0.02	0.04	0.20	0.40	1.00	2.00	4.0	10.0
5:3 FTCA	0.10	0.20	1.00	2.00	5.00	10.0	20.0	50.0

化合物	キャリブレーション 1 (ng/mL)	キャリブレーション 2 (ng/mL)	キャリブレーション 3 (ng/mL)	キャリブレーション 4 (ng/mL)	キャリブレーション 5 (ng/mL)	キャリブレーション 6 (ng/mL)	キャリブレーション 7 (ng/mL)	キャリブレーション 8 (ng/mL)
7:3 FTCA	0.10	0.20	1.00	2.00	5.00	10.0	20.0	50.0
PFMPA	0.01	0.02	0.10	0.20	0.50	1.00	2.0	5.0
PFMBA	0.01	0.02	0.10	0.20	0.50	1.00	2.0	5.0
PFEESA	0.01	0.02	0.10	0.20	0.50	1.00	2.0	5.0
NFDHA	0.01	0.02	0.10	0.20	0.50	1.00	2.0	5.0
M4 PFBA	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0
M5_PFPeA	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
M5_PFHxA	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50
M4_PFHpA	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50
M8_PFOA	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50
M9_PFNA	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25
M6_PFDA	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25
M7_PFUnDA	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25
M_PFDoDA	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25
M2_PFTreDA	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25
M3_PFBS	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50
M3_PFHxS	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50
M8_PFOS	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50
M2_42FTS	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
M2_62FTS	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
M2_82FTS	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
M8_FOSA	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
M3_GenX	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0
D3_NMeFOSAA	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
D5_NEtFOSAA	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
dNMeFOSA	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50
dNEtFOSA	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50
d7 NMeFOSE	5.0	5.0	5.0	5.0	5.0	5.0	5.0	5.0
d9 NEtFOSE	5.0	5.0	5.0	5.0	5.0	5.0	5.0	5.0
M3 PFBA_NIS	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
M2 PFHxA_NIS	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50
M4 PFOA_NIS	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50
M5 PFNA_NIS	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25
M2 PFDA_NIS	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25
18O2 PFHxS_NIS	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50
M4 PFOS_NIS	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50

付録表 2. Xevo TQ Absolute MS での水サンプル中の EPA 1633 化合物の PFAS 分析に使用した検量線の範囲

ソリューション提供製品

ACQUITY Premier システム <<https://www.waters.com/waters/nav.htm?cid=135077739>>

[Xevo TQ Absolute タンデム四重極質量分析計 <https://www.waters.com/nextgen/global/products/mass-spectrometry-systems/xevo-tq-absolute.html>](https://www.waters.com/nextgen/global/products/mass-spectrometry-systems/xevo-tq-absolute.html)

[定量のための waters_connect <https://www.waters.com/nextgen/global/products/informatics-and-software/waters_connect-for-quantitation.html>](https://www.waters.com/nextgen/global/products/informatics-and-software/waters_connect-for-quantitation.html)

720008230JA、2024 年 2 月



© 2024 Waters Corporation. All Rights Reserved.

[利用規約](#) [プライバシーポリシー](#) [商標](#) [キャリア](#) [法的通知およびプライバシー通知](#) [Cookies](#)
[Cookie 環境設定](#)