

Proteger el mañana: juntos podemos lograrlo.

Compendio de análisis de PFAS



Resolvemos juntos más problemas relacionados con los contaminantes PFAS

Introducción

La demanda mundial de pruebas rápidas, sencillas, precisas y que cumplan con las normativas para detectar sustancias perfluoroalquiladas y polifluoroalquiladas (PFAS) es cada vez mayor. Las normas de cumplimiento y los requisitos normativos siguen evolucionando y ahora son más estrictos que nunca, debido a nuestro mayor conocimiento y mayor conciencia de los efectos nocivos de estos denominados "químicos permanentes" tanto en nuestro medio ambiente como en la salud humana. Se estima que se han identificado más de 15.000 compuestos PFAS de diversas fuentes, sin embargo, se desconoce cuántas variaciones adicionales existen debido a productos de transformación no intencionales. La contaminación de ríos y lagos hasta la seguridad de nuestra agua potable y/o alimentos significa que la detección de estos compuestos químicamente estables nunca ha sido más importante.

Panorama normativo

Los organismos reguladores mundiales están investigando la prevalencia de compuestos PFAS en diversas matrices. Los principales PFAS que se están examinando son el PFOA (ácido perfluorooctanoico) y el PFOS (ácido perfluorooctanosulfónico), debido a su toxicidad, persistencia y uso generalizado, seguidos de las numerosas combinaciones y permutaciones diferentes de compuestos PFAS introducidas desde el descubrimiento del polímero sintético original en la década de 1940.

En el Convenio de Estocolmo sobre contaminantes orgánicos persistentes (COP), el PFOA está restringido desde 2009 y el PFOS está prohibido desde 2019, con una prohibición del PFHxS y sus derivados, implementada en 2022. Otras agencias regionales incluyen la Agencia de Protección Ambiental de los Estados Unidos (EPA), en Europa, REACH (Registro, Evaluación, Autorización y Restricción de Sustancias Químicas) y la DWD de la UE (Directiva Europea de Agua Potable EU2020/2184) establecen restricciones, al igual que la Autoridad Europea de Seguridad Alimentaria (EFSA) citando niveles máximos de residuos (LMR). Las regulaciones globales están evolucionando rápidamente, abarcando más matrices y compuestos PFAS objetivo adicionales para análisis.

Problemas con PFAS

La exposición humana a las sustancias PFAS está muy extendida y sus efectos a través de la bioacumulación aún se están estudiando. Las PFAS se utilizan y se han utilizado en una gran cantidad de artículos y productos domésticos y, como tal, la exposición puede provenir de diferentes fuentes. Esto incluye materiales de envasado de alimentos, productos domésticos comerciales, utensilios de cocina antiadherentes, ciertos entornos laborales e incluso ropa y cosméticos resistentes al agua. Cada una de estas fuentes presenta desafíos únicos para los laboratorios de pruebas analíticas.

Desafíos analíticos

Este compendio se compiló teniendo en mente a los laboratorios de análisis de PFAS. Los laboratorios deben enfrentar los nuevos desafíos que plantean las agencias reguladoras que han estado agregando una cantidad cada vez mayor de PFAS a sus metodologías específicas con límites de informes bajos requeridos en partes por billón (ppt) basados en la información de asesoramiento sanitario. Además, a menudo se les encarga a los laboratorios que analicen PFAS desconocidos, lo que se conoce como análisis no específico (NTA). Esto permite la "huella digital" de PFAS para sitios que han sido contaminados con mezclas químicas y podrían contener miles de compuestos más allá del alcance de cualquier analito específico.

La elección del método óptimo variará según la matriz y los objetivos del análisis respectivo. Otro desafío al que se enfrentan los laboratorios que participan en las pruebas de PFAS es la contaminación de fondo. Esto puede ser especialmente problemático con los equipos de muestreo y de laboratorio que pueden estar ya contaminados con compuestos de PFAS, ya sea por fabricación o manipulación. La preparación manual de muestras suele ser una opción fácilmente disponible, sin embargo, las soluciones de preparación de muestras automatizadas que se pueden adaptar a una amplia variedad de matrices reducen el costo de mano de obra y la contaminación de fondo debido a una menor manipulación de las muestras con el beneficio adicional de un rendimiento más rápido. Entendemos la necesidad de que los laboratorios tengan soluciones de flujo de trabajo completas y listas para usar que aborden los desafíos actuales y futuros de las pruebas de PFAS.

Descubra estrategias que le ayudarán con la detección y cuantificación de PFAS conocidos a través de análisis LC-MS/MS dirigidos en nuestra gama de sistemas UHPLC, junto con nuestra completa cartera de reactivos y consumibles seleccionados específicamente para sus aplicaciones de PFAS más exigentes.

El descubrimiento y la identificación de compuestos PFAS desconocidos puede ser un desafío cuando no se dispone de estándares de referencia. Existe tecnología disponible que permite realizar análisis retrospectivos y no específicos, lo que le permite mejorar sus propias capacidades de análisis de PFAS. La detección de muestras para detectar flúor orgánico adsorbible total (AOF) mediante cromatografía de iones de combustión (CIC) puede brindar información valiosa sobre muestras potencialmente "calientes" que pueden estar contaminadas con PFAS. La CIC se puede utilizar en combinación con métodos no específicos que utilicen masa precisa de alta resolución (HRAM) para identificar compuestos desconocidos con mayor confianza y conducir a una mejor comprensión de los PFAS en sus muestras.

Ahora es el momento de preparar su laboratorio de pruebas de PFAS para el futuro, con flujos de trabajo sólidos y de alto rendimiento que cumplan y superen los estándares más estrictos. Desde pruebas de agua y suelo hasta una amplia variedad de otras matrices, nuestras soluciones de pruebas de PFAS son el camino a seguir.

Descubra nuevos enfoques para los problemas complejos de las pruebas de PFAS de la mano de expertos de la industria. Comprenda cómo se puede aplicar una combinación de automatización, una amplia gama de tecnologías avanzadas y soluciones de flujo de trabajo comprobadas para mejorar la productividad y la certeza de sus resultados.

Tabla de contenido

- ➔ PFAS en el agua
- ➔ PFAS en otras matrices
- ➔ Análisis de PFAS no específicos
- ➔ Productos químicos y consumibles para pruebas de PFAS

PFAS en el agua

La presencia de PFAS en fuentes subterráneas, superficiales y de aguas residuales se ha convertido en una preocupación importante a nivel mundial y, por lo tanto, la medición precisa de PFAS en nuestros sistemas de agua es fundamental.

En primer lugar, existen varias técnicas para detectar y cuantificar los PFAS en el agua, un análisis que suele ser complejo. Varios métodos reglamentarios exigen que las muestras se recojan en botellas de polipropileno antes de realizar la extracción en fase sólida (SPE) y el análisis por espectrometría de masas de triple cuadrupolo. Además, hay numerosas consideraciones que deben tenerse en cuenta al analizar los PFAS en el agua, como el tipo de agua, el rango de calibración, el límite de detección, el cribado y la cuantificación.

Por último, muchos laboratorios de análisis pueden utilizar flujos de trabajo manuales para gestionar el análisis de PFAS en fuentes de agua, lo que supone un aumento de tiempo y trabajo. Para mejorar el rendimiento y la productividad general del laboratorio, es fundamental automatizar los procedimientos analíticos mediante SPE y cromatografía líquida con métodos de espectrometría de masas en tándem (LC-MS/MS).

En la siguiente sección, puede encontrar enlaces a varias notas de aplicación que detallan las pruebas de PFAS en agua, incluidos nuevos métodos de expertos en el campo de pruebas de PFAS y cómo la automatización puede mejorar la productividad y la certeza de sus resultados.

Con nuestra cartera completa de soluciones de cromatografía, Thermo Fisher Scientific puede ayudarle a realizar pruebas de PFAS. Para obtener más información, visite [Soluciones para pruebas de PFAS](#).

Matriz				Normativa/Orientación	Título
Agua potable	Aguas superficiales	Agua subterránea	Aguas residuales		
					Haga clic en los títulos de las notas para saltar a la página
	•	•	•	EPA1633	Cuantificación de sustancias perfluoroalquiladas y polifluoroalquiladas (PFAS) en muestras acuosas mediante LC-MS/MS siguiendo el método preliminar 1633 de la EPA
			•		EUROLAB adopta la solución de masa precisa de alta resolución (HRAM) Orbitrap para el análisis de contaminantes tanto específicos como no específicos
•				EPA537.1	Determinación de sustancias perfluoradas y polifluoradas de alquilo (PFAS) en agua potable mediante extracción automatizada en fase sólida y LC-MS/MS
•				EPA537.1	Estudio de validación secundaria para el método 537.1 de la EPA utilizando SPE automatizado seguido de LC-Q Exactive Orbitrap MS
•				EPA 537	Comparación entre la tecnología HRAM Orbitrap y MS/MS para el análisis de sustancias polifluoroalquilo según el método 537 de la EPA
	•	•	•	EPA8327	Análisis directo de sustancias perfluoradas y polifluoradas de alquilo seleccionadas (PFAS) en aguas subterráneas, superficiales y residuales mediante LC-MS/MS
	•	•		EPA1621	AOF por combustión IC: determinación complementaria no dirigida de PFAS en muestras acuosas
			•	EPA1621	Detección de los esquivos químicos eternos mediante cromatografía de iones de combustión



NOTA DE APLICACIÓN 002348

Cuantificación de sustancias perfluoroalquiladas y polifluoroalquiladas (PFAS) en muestras acuosas mediante LC-MS/MS siguiendo el método preliminar 1633 de la EPA

Kevin J. McHale, Thermo Fisher Scientific, Somerset, Nueva Jersey, EE. UU.

Meta

Demostrar la medición de 40 sustancias perfluoroalquilo y polifluoroalquilo (PFAS) en muestras de agua de 500 mL en o por debajo de los límites de detección del método (MDL) informados en el Borrador del método 1633 de la EPA de EE. UU. mediante LC-MS/MS en el Thermo Scientific™TSQ Quantitativos™Más espectrómetro de masas.

Introducción

Los PFAS son sustancias perfluoroalquilo y polifluoroalquilo. Constan de una cadena hidrófoba de enlaces C-F y un grupo terminal hidrófilo. La naturaleza química de los enlaces CF hace que estos compuestos sean extremadamente estables. Por ello, los PFAS han recibido el término de “compuestos para siempre”. Se han utilizado durante décadas en una amplia variedad de usos industriales y para muchos productos de consumo cotidianos. Debido a su naturaleza ubicua y estabilidad química, los PFAS se han abierto camino en todos los aspectos del medio ambiente, incluido el agua y el suelo, y algunos incluso en el aire. Con el contacto con el medio ambiente, los PFAS se integran en plantas, animales y humanos. Una vez en los organismos biológicos, los PFAS no se descomponen de manera eficiente. Esto conduce a la bioacumulación de PFAS, que ha demostrado tener ciertos efectos sobre la salud en los seres humanos, incluido un posible aumento del riesgo de cáncer e infertilidad.

En los últimos años, la EPA de EE. UU. ha adoptado un enfoque más activo para monitorear los PFAS en el medio ambiente. En marzo de 2023, la EPA propuso el Reglamento Nacional Primario de Agua Potable (NPDWR, por sus siglas en inglés) para establecer niveles legalmente exigibles de seis PFAS en el agua potable, incluidos PFOA y PFOS en 4 ng/L. Los métodos desarrollados previamente, EPA 537.1 y EPA 533, se establecieron para medir los PFAS en el agua potable, incluidos los seis PFAS designados bajo el NPDWR. Más recientemente, se desarrolló el Método 1633 de la EPA, en conjunto con el Departamento de Defensa, para medir los PFAS en agua no potable, (bio)sólidos y muestras de tejido para el uso previsto de regulación de los PFAS a través de la Ley de Agua Limpia (CWA, por sus siglas en inglés). El tercer borrador del Método 1633 de la EPA se publicó en diciembre de 2022 luego de un estudio de validación de varios laboratorios en aguas residuales adulteradas.

Conclusión

Siguiendo los protocolos de 1633, el espectrómetro de masas TSQ Quantis Plus ha demostrado MDL iguales o inferiores a los que se indican en el método preliminar 1633 de la EPA para muestras acuosas. Para extracciones de muestras fortificadas de nivel medio, se obtuvieron resultados dentro del rango de recuperación de 70 a 130 % y RSD <20 %, con la excepción de 6:2FTS.



[Ver la nota de aplicación completa](#)





ESTUDIO DE CASO 65724

EUROLAB adopta la solución de masa precisa de alta resolución (HRAM) Orbitrap para el análisis de contaminantes tanto específicos como no específicos

Thermo Fisher Scientific, EUROLAB

Introducción

EUROLAB, Srl se centra en el análisis de muestras de clientes para detectar contaminantes que afectan la seguridad de los productos y las aguas ambientales. Las estrategias tradicionales de control de contaminantes han implicado la detección y cuantificación dirigidas de compuestos específicos. Sin embargo, los métodos específicos abordan solo una pequeña parte del universo potencial de contaminantes presentes en el medio ambiente y los productos de consumo. El aumento de compuestos desconocidos que pueden tener efectos tóxicos está impulsando la necesidad de estrategias de control avanzadas que vayan más allá de la detección y cuantificación dirigidas a métodos integrales capaces de revelar todos los compuestos presentes en una muestra. Además de los desafíos de la caracterización integral de las muestras, las agencias reguladoras reducen continuamente los niveles de contaminantes y agregan nuevos contaminantes para controlar a medida que se amplía la evidencia toxicológica.

Conclusión

Con el número cada vez mayor de contaminantes que deben analizarse y cuantificarse en concentraciones cada vez más bajas y en una variedad más amplia de matrices de muestra, la necesidad de un análisis de alta resolución potente y preciso

Los instrumentos LC-MS seguirán aumentando. La caracterización integral de muestras para detectar contaminantes emergentes desconocidos requiere métodos LC-MS de barrido completo de alta resolución. Los métodos Orbitrap HRAM no solo aumentan los objetivos potenciales monitoreados, sino que también reducen los falsos positivos y los costos por muestra, ahorran tiempo, brindan más confianza en las identificaciones de compuestos y permiten el análisis retrospectivo de datos.

Los instrumentos Orbitrap HRAM ofrecen una solución en un solo instrumento para la identificación de elementos desconocidos, el cribado selectivo y no selectivo y la cuantificación selectiva precisa con una experiencia de usuario simplificada que no requiere un desarrollo de métodos ni una preparación de muestras complicados y que requieren mucho tiempo. Por estas ventajas, EUROLAB, Srl confía en sus espectrómetros de masas Q Exactive Focus y en el software Compound Discoverer.



[Ver el caso de estudio completo](#)





NOTA DE APLICACIÓN 73346

Determinación de sustancias perfluoradas y polifluoradas de alquilo (PFAS) en agua potable mediante extracción automatizada en fase sólida y LC-MS/MS

Changling Qiu, Xin Zhang, Rahmat Ullah, Wei Chen, Yan Liu Thermo Fisher Scientific, Sunnyvale, CA, EE. UU.

Meta

Demostrar un método de extracción en fase sólida eficiente y confiable con Thermo Scientific-Dionex-Seguimiento automático-Instrumento de extracción en fase sólida 280 PFAS para la determinación de compuestos perfluorados y polifluorados en agua potable según el método 537.1 de la EPA de EE. UU.

Introducción

Las sustancias perfluoroalquiladas y polifluoradas (PFAS) son un grupo de sustancias químicas sintéticas que incluyen el ácido perfluorooctanoico (PFOA), el ácido perfluorooctanosulfónico (PFOS) y las sustancias químicas GenX que se han fabricado y utilizado en una variedad de industrias a nivel mundial. Estos compuestos tienen una amplia gama de aplicaciones comerciales, incluidos polímeros industriales, repelentes de manchas, surfactantes, productos impermeabilizantes, envases y espumas formadoras de películas acuosas utilizadas para combatir incendios. Las PFAS son altamente solubles en agua, químicamente estables, persistentes en el medio ambiente y pueden acumularse en el cuerpo humano con el tiempo, lo que provoca efectos adversos para la salud humana. El PFOA y el PFOS ya no se fabrican en los EE. UU. debido a su persistencia y los posibles riesgos para la salud humana.

En noviembre de 2018, la Agencia de Protección Ambiental de los Estados Unidos (US EPA) publicó el Método 537.1 "Determinación de sustancias alquílicas perfluoradas y polifluoradas seleccionadas en agua potable mediante extracción en fase sólida y LC-MS/MS". El método utiliza una extracción en fase sólida (SPE) fuera de línea con espectrometría de masas en tándem por cromatografía líquida (LC-MS/MS) para extraer, enriquecer, y determinar 18 PFAS en agua potable. Actualmente, la mayoría de los laboratorios

de análisis realizan la extracción de muestras manualmente utilizando un colector de vacío, lo que requiere mucho trabajo y tiempo, y el caudal a través del cartucho es difícil de controlar. Existe una gran demanda de automatización del procedimiento de SPE.

Conclusión

Esta nota de aplicación informa sobre un método que se puede utilizar para la extracción y determinación de 18 PFAS en agua potable con un sistema de extracción AutoTrace 280 seguro para PFAS y LC-MS/MS. El sistema de extracción AutoTrace 280 modificado garantiza la inercia y evita que los PFAS se filtren en la muestra durante la extracción, al mismo tiempo que ofrece un rendimiento constante y confiable. Tanto la limpieza de la ruta de la muestra en SPE como la precaución del método de separación para el sistema LC mantuvieron un fondo bajo del sistema, cumpliendo con el requisito del método de la EPA. Los LCMRL calculados variaron de 0,20 a 3,5 ng/L y los MDL variaron de 0,30 a 2,5 ng/L, que fueron inferiores o comparables a los valores informados en el Método 537.1 de la EPA de EE. UU. En los niveles de concentración fortificados de 16,0 ng/L y 80,0 ng/L, todas las recuperaciones estuvieron dentro del rango aceptable de 70-130%. Los RSD calculados fueron todos inferiores al 10 %, lo que sugiere una buena precisión. El sistema LC-MS/MS de Thermo Scientific con extracción automática AutoTrace 280 PFAS demostró ser un método eficiente, confiable y sensible para cumplir con los requisitos del método 537.1 de la EPA de EE. UU.



[Ver la nota de aplicación completa](#)





NOTA DE APLICACIÓN 65499

Estudio de validación secundaria para el método 537.1 de la EPA utilizando SPE automatizado seguido de LC-Q Exactive Orbitrap MS

Ali Haghani, Andy Eaton, Eurofins Eaton, Monrovia, CA, EE.UU.;

Richard Jack, Maciej Bromirski, Thermo Fisher Scientific, San José, California, EE. UU.

Meta

Demostrar el rendimiento del método para el análisis de sustancias perfluoradas y polifluoradas (PFAS) utilizando Thermo Scientific-Trampa orbital-Espectrometría de masas de alta resolución como alternativa a los instrumentos de triple cuadrupolo convencionales para la determinación de PFAS en matrices de agua potable utilizando el método EPA 537.1.

Introducción

En la última década, la sensibilidad de la cromatografía líquida-espectrometría de masas en tándem (LC-MS/MS) ha aumentado al menos en un factor de diez y, por lo tanto, es lo suficientemente sensible para la cuantificación de compuestos específicos para métodos validados. La facilidad de uso para detectar compuestos polares hace que la LC-MS/MS sea la técnica preferida para el análisis de compuestos de interés emergente (CEC) en muestras ambientales. Sin embargo, con el desarrollo de espectrómetros de masas de alta resolución y precisión (HRAM), la sensibilidad rivaliza con la de los instrumentos MS de triple cuadrupolo y, además, la resolución de masa proporciona los beneficios adicionales de una cuantificación precisa junto con capacidades de detección desconocidas. HRAM, que utiliza la tecnología Orbitrap, combina la sensibilidad de un analizador de triple cuadrupolo para la cuantificación con la confianza de los datos de escaneo completo para la identificación y confirmación cuantitativas similares a los instrumentos MS/MS que participaron en un estudio de validación de métodos.

Esta nota de aplicación destaca el espectrómetro de masas Thermo Scientific™ Q Exactive™ Hybrid Quadrupole-Orbitrap™ utilizado como una de las validaciones de laboratorio externas para actualizar el Método EPA 537 r1.1 - Determinación de sustancias perfluoradas y polifluoradas seleccionadas en agua potable mediante extracción en fase sólida y cromatografía líquida/espectrometría de masas en tándem (LC-MS/MS).

La EPA 537 Rev. 1.1, publicada por primera vez en 2009 para determinar 14 PFAS diferentes en el agua potable, se ha actualizado al Método 537.1 de la EPA e incluye cuatro PFAS más. Estos nuevos PFAS que han estado reemplazando al PFOA y al PFOS en los procesos de fabricación son sustancias químicas GenX, específicamente el ácido dímero de óxido de hexafluoropropileno, así como el ácido 11-cloroicosafluoro-3-oxaundecano-1-sulfónico (11Cl-PF3OUdS), el ácido 9-clorohexadecafluoro-3-oxanona-1-sulfónico (9Cl-PF3ONS) y el ácido 4,8-dioxa-3H-perfluorononanoico (ADONA). El Método 537.1 de la EPA puede ser utilizado por las regiones de la EPA y otros laboratorios ambientales gubernamentales y comerciales para medir los PFAS en el agua potable terminada.

Conclusión

El método al que se hace referencia en esta nota de aplicación es robusto y reproducible y muestra un excelente rendimiento cuantitativo del espectrómetro de masas Q Exactive Orbitrap en modo PRM para el método EPA 537.1 con selectividad y especificidad mejoradas.



[Ver la nota de aplicación completa](#)





NOTA DE APLICACIÓN 667

Comparación entre la tecnología HRAM Orbitrap y MS/MS para el análisis de sustancias polifluoroalquilo según el método 537 de la EPA

Ali Haghani, Andy Eaton, Eurofins Eaton Analytical, Inc. Monrovia, CA, EE. UU.;

Richard F. Jack, Ed George, Dipankar Ghosh, Thermo Fisher Scientific, San José, California, EE. UU.

Meta

Demostrar una metodología de cromatografía líquida de alta resolución y masa precisa (LC-HRAM) utilizando Thermo Scientific-Trampa orbital-tecnología como una alternativa cuantitativa sensible, precisa y confiable al uso de espectrómetros de masas de triple cuadrupolo, al mismo tiempo que se determinan compuestos perfluorados desconocidos en los mismos extractos de agua potable.

Introducción

Las propiedades únicas de resistencia al agua, al aceite, a la grasa, a las manchas y al calor de las sustancias perfluoroalquiladas (PFAS) han llevado a su uso generalizado en diversas aplicaciones industriales y múltiples productos de consumo durante más de cincuenta años.

Las sustancias perfluoroalquilo son compuestos en los que todos los hidrógenos de todos los carbonos (excepto los carbonos asociados a grupos funcionales) han sido reemplazados por flúor, por ejemplo, los ácidos perfluoroalquilo (por ejemplo, PFOA, PFOS). Las sustancias polifluoroalquilo son compuestos en los que todos los hidrógenos de al menos un carbono (pero no todos) han sido reemplazados por flúor, por ejemplo, los compuestos basados en fluorotelómeros. Los enlaces carbono-hidrógeno permiten la degradación biótica y abiótica en el medio ambiente.

Sin embargo, el enlace C-F se considera el enlace simple más fuerte en química orgánica con una entalpía de enlace de 481 kJ/mol en CH_3F , que es sustancialmente más alta que la de otros enlaces. Esta pronunciada fuerza de enlace se refleja en la notoria estabilidad ambiental y química de estos compuestos.

Conclusión

Según la regla de flexibilidad de métodos de la EPA, los requisitos de control de calidad y garantía de calidad y las pautas del método 537 de la EPA, la tecnología HRAM Orbitrap debería permitirse para el posible monitoreo de cumplimiento si los PFAS se convierten en compuestos regulados en las aguas potables de EE. UU. La instrumentación HRAM Orbitrap Q Exactive en el modo de escaneo PRM se puede utilizar para la cuantificación con un rendimiento como un triple cuadrupolo en modo SRM con mayor especificidad, selectividad y sensibilidad comparable.



[Ver la nota de aplicación completa](#)



NOTA DE APLICACIÓN 65397

Análisis directo de sustancias perfluoradas y polifluoradas de alquilo seleccionadas (PFAS) en aguas subterráneas, superficiales y residuales mediante LC-MS/MS

Cristina C. Jacob, Claudia PB Martins, Alan R. Atkins, Richard F. Jack, Thermo Fisher Scientific, San José, California, EE. UU.

Meta

Demostrar el rendimiento del método para el análisis de PFAS en niveles bajos (ng/L) en una amplia variedad de matrices de agua no potable mediante análisis directo y presentar el paquete de datos para la validación del método interlaboratorio EPA 8327.

Introducción

Las sustancias perfluoroalquiladas y polifluoroalquiladas (PFAS) son un grupo de sustancias químicas artificiales que incluyen el ácido perfluorooctanoico (PFOA), el ácido perfluorooctilsulfónico (PFOS) y el ácido dímero de óxido de hexafluoropropileno (HFPO-DA, que forma parte del proceso GenX). Los compuestos PFAS se han fabricado desde la década de 1940. Los compuestos PFAS más conocidos, PFOA y PFOS, han sido los más producidos y estudiados por sus propiedades químicas y efectos toxicológicos. Ambos productos químicos son muy persistentes en el medio ambiente y se acumulan en el cuerpo humano con el tiempo. Está bien documentado que la exposición a los PFAS puede provocar efectos adversos para la salud humana y se encuentran en el material de envasado de alimentos, así como en los equipos de procesamiento de alimentos. Las plantas pueden acumular PFAS cuando se cultivan en suelo y/o agua que contienen PFAS. Estos compuestos también se encuentran en una amplia variedad de productos de consumo, como utensilios de cocina, recipientes para alimentos (por ejemplo, cajas de pizza) y repelentes de manchas. Otros productos que pueden dar lugar a vías de exposición incluyen ropa con tejidos que repelen las manchas y el agua, productos antiadherentes (por ejemplo, teflón), abrillantadores, ceras, pinturas y productos de limpieza.

Otra fuente importante de PFAS son las espumas contra incendios, que son un componente principal de la contaminación de las aguas subterráneas en aeropuertos y bases militares. Una mayor exposición proviene de los entornos laborales, incluidas las instalaciones o industrias de producción (por ejemplo, cromado, electrónica y fabricación, o recuperación de petróleo).

Cabe destacar que el agua potable puede contener PFAS y puede estar asociada a instalaciones domésticas y laborales específicas. Se ha demostrado que los organismos vivos, incluidos los peces, los animales y los seres humanos, tienen acumulaciones de compuestos PFAS y, por lo tanto, pueden acumularse y persistir con el tiempo. Por estas razones, la mayoría de las personas han estado expuestas a PFAS.

Conclusión

El método al que se hace referencia en esta nota de aplicación muestra un excelente rendimiento cuantitativo del Thermo Scientific-TSQ Altis-Espectrómetro de masas para análisis directo de PFAS en el rango bajo de ng/L en matrices de agua no potable.



[Ver la nota de aplicación completa](#)





NOTA DE APLICACIÓN DEL CLIENTE 73481

AOF por combustión IC: determinación complementaria no dirigida de PFAS en muestras acuosas

Eleonora von Abercron, Udo Neist, Inge Klocke, Dr. Sebastian Georgii, Prof. Dr. Hubertus Brunn, Laboratorio Estatal de Hesse, Wiesbaden, Alemania; Dr. Detlef Jensen, Thermo Fisher Scientific GmbH, Dreieich, Alemania

Meta

Desarrollar un método automatizado para determinar un rango de sustancias alquilo perfluoradas (PFAS) por IC de combustión dentro de matrices ambientalmente relevantes y comparar los resultados con métodos existentes altamente específicos basados en espectrometría de masas por cromatografía líquida (LC-MS/MS).

Introducción

Los PFAS son sustancias químicas sintéticas que se fabrican desde la década de 1940. Los compuestos PFAS más conocidos, el ácido perfluorooctanoico (PFOA) y el ácido perfluorooctanosulfónico (PFOS), se han estudiado ampliamente por sus propiedades químicas y efectos toxicológicos. Los PFAS se utilizan en una amplia variedad de productos de consumo, como utensilios de cocina antiadherentes, recipientes para alimentos, tejidos repelentes de manchas y agua, abrillantadores, ceras, pinturas y productos de limpieza. Otras fuentes de PFAS son las espumas contra incendios, que son contaminantes primarios de las aguas subterráneas en aeropuertos y bases militares. Otra exposición ambiental a los PFAS proviene de las instalaciones de producción industrial (por ejemplo, cromado, electrónica, fabricación o recuperación de petróleo). Los organismos vivos, incluidas las plantas, los animales y los seres humanos, pueden acumular compuestos PFAS en sus tejidos, que pueden acumularse con el tiempo y afectar a su salud.

Varios organismos reguladores y de normalización nacionales e internacionales han desarrollado métodos específicos para la determinación de PFAS en muestras acuosas. Estos métodos se basan principalmente en la extracción en fase sólida (SPE) seguida de la detección mediante LC-MS/MS solo para una cantidad selecta de PFAS.

Conclusión

El método AOF descrito amplía el conjunto de herramientas analíticas para determinar PFAS en muestras ambientales, como aguas superficiales, subterráneas y residuales. Mientras que los métodos LC-MS/MS y cromatografía de gases en tándem con espectrometría de masas (GC-MS/MS) utilizan un conjunto específico de PFAS para la evaluación, el proceso de adsorción del método AOF garantiza la extracción y determinación de más componentes (PFAS y otros compuestos fluorados) que los métodos mencionados anteriormente.



[Ver la nota de aplicación completa](#)





RESUMEN EJECUTIVO 74071

Detección de los esquivos químicos eternos mediante cromatografía de iones de combustión

Thermo Fisher Scientific

Introducción

Las sustancias perfluoradas y polifluoradas (PFAS) y sus precursores se utilizan en muchos productos fabricados por el hombre, incluidos utensilios de cocina antiadherentes, recipientes para alimentos, abrillantadores y ceras. Su resistencia al agua, al aceite y al calor también las hace útiles para muchos procesos industriales y en las espumas contra incendios, cuyos subproductos pueden entrar fácilmente en los cursos de agua. Aunque son útiles, las PFAS son contaminantes ambientales nocivos; las sustancias químicas PFAS más investigadas, PFOA y PFOS, se han relacionado con problemas inmunológicos, cáncer y problemas de desarrollo en estudios con animales, y hay evidencia de que pueden provocar resultados adversos para la salud en los seres humanos. Las PFAS se bioacumulan y, una vez presentes en las cadenas alimentarias, pueden ser difíciles de eliminar. Esta persistencia y bioacumulación han dado a las PFAS el nombre de "sustancias químicas eternas".

La medición precisa de los contaminantes ambientales es fundamental para detectar la contaminación y proteger los cursos de agua, en particular si se utilizan como fuente de consumo humano, pero los PFAS a menudo eluden la detección. A medida que la cantidad de PFAS no detectados y sus precursores sigue aumentando, es más importante que nunca desarrollar técnicas para detectar la presencia de moléculas de PFAS, especialmente aquellas que no se detectan mediante métodos específicos.

Conclusión

La AOX y la AOF por CIC proporcionan una alternativa rápida, precisa y más exacta a las técnicas estandarizadas existentes, al ofrecer una mayor automatización y una mayor velocidad. Estos beneficios se traducen en tasas de error reducidas, ahorro de tiempo y determinaciones más precisas. Además, además de ser una tecnología de reemplazo para la preparación de muestras de combustión y titulaciones analíticas, la CIC se puede utilizar como una técnica complementaria. Debido a que la CIC proporciona un método más simple y rentable, es una herramienta de preselección ideal para identificar muestras sospechosas que pueden contener compuestos PFAS adicionales que no se incluyeron en el método LC-MS/MS específico. Las muestras sospechosas pueden luego someterse a una selección desconocida utilizando espectrometría de masas de masa precisa de alta resolución (HRAM). La CIC ayuda a que este proceso sea más rentable y ahorra tiempo porque identifica qué muestras deben analizarse utilizando HRAM, evitando la necesidad de analizar todas las muestras.



[Ver el resumen ejecutivo completo](#)



PFAS en otras matrices

Aunque las principales fuentes de compuestos PFAS son el agua, estos compuestos también pueden existir en otras matrices, como el suelo, el aire y los alimentos.

En esta sección, descubrirá estrategias que lo ayudarán con el análisis específico de compuestos PFAS conocidos o el descubrimiento de compuestos desconocidos, a partir de una variedad de matrices, con las soluciones de cromatografía de Thermo Scientific. Para obtener más información, visite [Soluciones para pruebas de PFAS](#). Para obtener más información, visite [Soluciones para pruebas de PFAS](#).

Suelo

Matriz		Normativa/Orientación	Título
Sedimentos	Lodos	Suelos	Haga clic en los títulos de las notas para saltar a la página
			<ul style="list-style-type: none"> EPA1633

Aire

Matriz		Normativa/Orientación	Título
Ambiente	Aire interior		Haga clic en los títulos de las notas para saltar a la página
			<ul style="list-style-type: none">

Alimento

Matriz		Normativa/Orientación	Título
Materiales en contacto con alimentos	Alimentos		Haga clic en los títulos de las notas para saltar a la página
			<ul style="list-style-type: none">



NOTA DE APLICACIÓN 002348

Cuantificación de sustancias perfluoroalquiladas y polifluoroalquiladas (PFAS) en muestras acuosas mediante LC-MS/MS siguiendo el método preliminar 1633 de la EPA

Kevin J. McHale, Thermo Fisher Scientific, Somerset, Nueva Jersey, EE. UU.

Meta

Demostrar la medición de 40 sustancias perfluoroalquilo y polifluoroalquilo (PFAS) en muestras de agua de 500 mL en o por debajo de los límites de detección del método (MDL) informados en el Borrador del método 1633 de la EPA de EE. UU. mediante LC-MS/MS en el Thermo Scientific™TSQ Quantitativos™Más espectrómetro de masas.

Introducción

Los PFAS son sustancias perfluoroalquilo y polifluoroalquilo. Constan de una cadena hidrófoba de enlaces CF y un grupo terminal hidrófilo. La naturaleza química de los enlaces CF hace que estos compuestos sean extremadamente estables. Por ello, los PFAS han recibido el término de “compuestos para siempre”. Se han utilizado durante décadas en una amplia variedad de usos industriales y para muchos productos de consumo cotidianos. Debido a su naturaleza ubicua y estabilidad química, los PFAS se han abierto camino en todos los aspectos del medio ambiente, incluido el agua y el suelo, y algunos incluso en el aire. Con el contacto con el medio ambiente, los PFAS se integran en plantas, animales y humanos. Una vez en los organismos biológicos, los PFAS no se descomponen de manera eficiente. Esto conduce a la bioacumulación de PFAS, que ha demostrado tener ciertos efectos sobre la salud en los seres humanos, incluido un posible aumento del riesgo de cáncer e infertilidad.

En los últimos años, la EPA de EE. UU. ha adoptado un enfoque más activo para monitorear los PFAS en el medio ambiente. En marzo de 2023, la EPA propuso el Reglamento Nacional Primario de Agua Potable (NPDWR, por sus siglas en inglés) para establecer niveles legalmente exigibles de seis PFAS en el agua potable, incluidos PFOA y PFOS en 4 ng/L. Los métodos desarrollados previamente, EPA 537.1 y EPA 533, se establecieron para medir los PFAS en el agua potable, incluidos los seis PFAS designados bajo el NPDWR. Más recientemente, se desarrolló el Método 1633 de la EPA, en conjunto con el Departamento de Defensa, para medir los PFAS en agua no potable, (bio)sólidos y muestras de tejido para el uso previsto de regulación de los PFAS a través de la Ley de Agua Limpia (CWA, por sus siglas en inglés). El tercer borrador del Método 1633 de la EPA se publicó en diciembre de 2022 luego de un estudio de validación de varios laboratorios en aguas residuales adulteradas.

Conclusión

Siguiendo los protocolos de 1633, el espectrómetro de masas TSQ Quantis Plus ha demostrado MDL iguales o inferiores a los que se indican en el método preliminar 1633 de la EPA para muestras acuosas. Para extracciones de muestras fortificadas de nivel medio, se obtuvieron resultados dentro del rango de recuperación de 70 a 130 % y RSD <20 %, con la excepción de 6:2FTS.



[Ver la nota de aplicación completa](#)





NOTA DE APLICACIÓN DEL CLIENTE 73937

Extracción y análisis de sustancias poli y perfluoroalquiladas (PFAS) del suelo

Matthew S. MacLennan, Daniel Ng, David Hope, Pacific Rim Laboratories, Surrey, Columbia Británica, Canadá

Introducción

Estudios recientes sugieren que las sustancias poli- y perfluoroalquiladas (PFAS) tóxicas y altamente persistentes son mucho más frecuentes en los tejidos y el suelo que en el agua. La longitud creciente de la cadena de perfluoroalquilo en las PFAS está fuertemente correlacionada con una menor solubilidad en agua/mayor comportamiento de adsorción de una molécula particular de PFAS en el medio ambiente (es decir, migración de PFAS en las interfaces suelo/agua/aire) y en la remediación/filtración (es decir, elección de medios de filtración o absorbentes).

Existen más de 6000 PFAS disponibles comercialmente, muchos de los cuales tienen una alta persistencia ambiental y se han encontrado en agua y suelos de todo el mundo. Esto plantea un desafío significativo para el desarrollo de métodos analíticos, especialmente para la extracción de una variedad de PFAS de matrices sólidas como el suelo. Anteriormente, informamos una recuperación insatisfactoria (0-50%) de PFAS de cadena larga del suelo mediante vórtice/sonicación.

En el presente estudio, se añadió al suelo 24 PFAS (ácidos C4-C14, sulfonatos C4-C10, fluorotelómeros 4:2, 6:2 y 8:2, sulfonamida C8) a 1 ng/g, que se dejaron absorber durante la noche en las muestras de suelo. Las muestras de suelo se extrajeron utilizando el Extractor acelerado de solventes Thermo Scientific™ Dionex™ ASE™ 350, que produjo una recuperación del 70 al 130 % de todos los compuestos de PFAS objetivo. La extracción acelerada de solventes ha superado a los métodos de extracción manual con "agitación" comúnmente utilizados en las mismas condiciones.

En el presente estudio, se añadió al suelo 24 PFAS (ácidos C4-C14, sulfonatos C4-C10, fluorotelómeros 4:2, 6:2 y 8:2, sulfonamida C8) a 1 ng/g, que se dejaron absorber durante la noche en las muestras de suelo.

Conclusión

La extracción acelerada con solventes puede extraer una variedad de PFAS del suelo, incluidos ácidos, sulfonatos, sulfonatos fluorotelómeros y compuestos de sulfonamida. Aunque el sistema Dionex ASE 350 utilizado en este método contenía líneas de teflón, las líneas se habían utilizado en una variedad de condiciones de solventes diferentes, lo que redujo eficazmente la contaminación de fondo de PFAS al mínimo. La cuantificación de dilución isotópica se utilizó para la mayoría de los analitos y demostró linealidad para todos los PFAS estudiados en el suelo en el rango de 1 ppb a 400 ppb. La linealidad de PFTrDA está sesgada a la baja, lo que se debe en parte a que PFTrDA se cuantifica a través del método estándar interno contra $^{13}\text{C}_2\text{-PFTeDA}$ y no un análogo marcado isotópicamente de PFTrDA, pero más fuertemente debido a los efectos de la abundancia natural $^{13}\text{C}_2\text{-PFTeDA}$ (a partir de los niveles nativos añadidos) aumenta artificialmente las recuperaciones del estándar interno, subestimando así los niveles nativos de PFTrDA.

 [Ver la nota de aplicación completa](#)



NOTA DE APLICACIÓN 001715

Análisis de alto rendimiento de PFAS neutros e iónicos en aire ambiente mediante desorción térmica acoplada a cromatografía de gases – espectrometría de masas (TD-GC-MS/MS)

Laura Miles, Hannah Calder, Markes International Ltd, Bridgend, Reino Unido; Vladimir Nikiforov, Dorte Herzke, NILU-Instituto Noruego de Investigación del Aire, Centro Fram, Tromsø, Noruega; Nicholas Warner, Daniel Kutscher, Thermo Fisher Scientific, Bremen, DE; Giulia Riccardino, Thermo Fisher Scientific, Milán, IT; Adam Ladak, Thermo Fisher Scientific, Hemel Hempstead, Reino Unido

Meta

El objetivo de esta nota de aplicación es demostrar un método de alto rendimiento para el análisis simultáneo de sustancias perfluoroalquilo y polifluoroalquilo (PFAS) neutras (FTOH, FOSA) e iónicas (PFCA, FTCA) en el aire utilizando desorción térmica acoplada a espectrometría de masas por cromatografía de gases.

Introducción

Las sustancias perfluoroalquiladas y polifluoroalquiladas (PFAS) contienen uno o más radicales alquilo con todos los hidrógenos reemplazados por átomos de flúor. Tradicionalmente, dos grupos de PFAS han sido los que más preocupación han generado y han sido objeto de control y seguimiento. El primer grupo incluye PFAS iónicos (o ácidos): los ácidos perfluorocarboxílicos (el ácido perfluorooctanoico (PFOA) es el más conocido) y los perfluoroalquilsulfonatos (el ácido perfluorooctanosulfónico (PFOS), el más conocido), donde la LC-MS-MS es la técnica analítica más comúnmente elegida. El segundo grupo incluye PFAS neutros (o volátiles): los alcoholes fluorotelómeros (FTOH) y las fluoroalquilsulfonamidas N-sustituidas (FOSA).

Para este grupo, la cromatografía de gases y la espectrometría de masas (GC-MS) son el método analítico de elección. La detección de concentraciones en el aire de PFAS iónicos y neutros es fundamental para medir la distribución de las emisiones atmosféricas y la posible exposición humana. A diferencia de las matrices de agua y suelo, hay menos factores que ralenticen la dispersión de los PFAS después de su liberación al aire ambiente. Estos compuestos pueden viajar miles de kilómetros desde el punto original de emisión, que podría ser un lugar de fabricación de productos químicos, plantas de tratamiento térmico de residuos o aplicaciones comerciales de PFAS.

Conclusión

Los resultados obtenidos en estos experimentos demuestran que el TD100-xr Advanced acoplado al GC TRACE 1610 y al espectrómetro de masas TSQ 9610 equipado con la fuente de iones AEI ofrece un rendimiento analítico confiable para el análisis de PFAS en aire, lo que permite el análisis de especies PFAS neutras volátiles y PFCA iónicos volátiles en una sola ejecución.

 [Ver la nota de aplicación completa](#)



NOTA DE APLICACIÓN 002633

Análisis de PFAS en aire interior mediante desorción térmica acoplada a cromatografía de gases – espectrometría de masas (TD-GC-MS/MS)

Laura Miles, Hannah Calder, Markes International Ltd, Bridgend, Reino Unido; Nicholas Warner, Daniel Kutscher, Thermo Fisher Scientific, Bremen, DE; Daniela Cavagnino, Thermo Fisher Scientific, Milán, IT; Adam Ladak, Thermo Fisher Scientific, Hemel Hempstead, Reino Unido

Meta

El objetivo de esta nota de aplicación es presentar un método para el análisis simultáneo de 19 sustancias perfluoroalquiladas y polifluoroalquiladas (PFAS) en cuatro grupos funcionales diferentes (ácidos carboxílicos perfluoroalquilados/carboxilatos (PFCA), alcoholes fluorotelómeros (FTOH), ácidos carboxílicos fluorotelómeros (FTCA) y sulfonamidas perfluorooctano (FOSA)) en aire interior mediante desorción térmica acoplada a cromatografía de gases-espectrometría de masas. Además, también se evaluó la tasa de emisión de PFAS de un elemento común utilizando un analizador de Markes International Micro-Chamber/Thermal Extractor™.

Introducción

Las sustancias perfluoroalquilo y polifluoroalquilo (PFAS) contienen uno o más residuos de alquilo en los que todos los átomos de hidrógeno han sido reemplazados por átomos de flúor. Estos compuestos se pueden encontrar en el aire como resultado de las emisiones de las actividades industriales. Sin embargo, estos compuestos también se encuentran en el aire interior, ya que se utilizan ampliamente en productos de consumo, como utensilios de cocina antiadherentes, ropa repelente al agua, telas y alfombras resistentes a las manchas, algunos cosméticos y productos resistentes a la grasa, al agua y al aceite.

La presencia de PFAS en el aire interior puede suponer riesgos para la salud humana; en particular, el ácido perfluorooctanoico (PFOA) se bioacumula en los seres humanos y otros mamíferos que respiran aire y se ha relacionado con importantes problemas de salud, como cáncer de riñón, cáncer testicular, enfermedad tiroidea, hipertensión inducida por el embarazo y colesterol alto.

Además, algunas especies de PFAS neutrales (n-PFAS), como los alcoholes fluorotelómeros (FTOH), los ácidos carboxílicos fluorotelómeros (FTCA) y las perfluorooctanosulfonamidas (FOSA), pueden degradarse dentro del cuerpo y en el medio ambiente para formar PFOA.

Conclusión

Los resultados obtenidos en estos experimentos demuestran que el TD100-xr Advanced acoplado al GC TRACE 1610 y al espectrómetro de masas TSQ 9610 equipado con fuente AEI ofrece un rendimiento analítico confiable para el análisis de PFAS en aire interior.



[Ver la nota de aplicación completa](#)





NOTA DE APLICACIÓN 65960

Efecto de las técnicas de reducción del tamaño de partículas en la extracción y recuperación de 16 PFAS en matrices de envases de papel en contacto con alimentos

Paulo Silva, Keith Vorst, Greg Curtzwiler, Universidad Estatal de Iowa, Ames, IA, EE. UU.;
Charles Yang, Thermo Fisher Scientific, San José, CA, EE. UU.

Meta

Investigar el efecto de dos técnicas de reducción de tamaño de partículas, molienda de bolas y molienda con corte de cuchillas, en la recuperación de sustancias perfluoroalquilo y polifluoroalquilo (PFAS) de tres tipos de materiales en contacto con alimentos (bolsas de palomitas de maíz para microondas, recipientes de fibra moldeada y envoltorios) utilizando la técnica de extracción sólido-líquido por ultrasonidos focalizados (FUSLE) para la extracción de 16 compuestos fluorados específicos.

Introducción

Los materiales en contacto con alimentos (FCM) de papel y cartón (P&B) han ganado especial atención últimamente debido al amplio uso de mezclas de aditivos comerciales y materias primas de naturaleza conocida y desconocida que han generado preocupaciones sanitarias y regulatorias.

Dado que los pigmentos y los barnices se utilizan en diversas aplicaciones, uno de los desafíos en la producción de papel es lograr funcionalidades técnicas específicas. Por lo tanto, el uso de aditivos químicos se emplea ampliamente en el proceso de fabricación para lograr diversos requisitos de rendimiento. Entre estos aditivos, los coadyuvantes de procesamiento

Los aditivos funcionales son algunas de las categorías principales. Los auxiliares de procesamiento se utilizan para mejorar la eficiencia de los procesos de fabricación de papel y no están destinados a ser transferidos al producto final, aunque se pueden encontrar trazas.

Dadas las preocupaciones sobre la salud y la migración asociadas con los PFAS en el FCM, es imperativo que se desarrollen métodos analíticos adecuados y de buen desempeño para cuantificar diferentes PFAS de manera precisa y eficiente en una variedad de matrices.

Conclusión

En el presente estudio se desarrollaron técnicas de reducción del tamaño de partículas para la extracción y recuperación de 16 PFAS, incluidos siete ácidos perfluorocarboxílicos (PFCA), cinco perfluoroalquilsulfonatos (PFSA), dos cloroperfluoroéter sulfonatos (CI-PFESA), un polifluoroéter carboxilato (PFECA) y un ácido dímero de óxido de hexafluoropropileno (GenX) en el muestreo de diferentes materiales celulósicos en contacto con alimentos.



[Ver la nota de aplicación completa](#)





NOTA DE APLICACIÓN 001502

Detección y cuantificación de PFAS en tejido animal mediante el espectrómetro de masas de alta resolución Orbitrap Exploris 120

Ed George, Maciej Bromirski, Charles Yang, Thermo Fisher Scientific, San José, California, EE. UU.

Meta

Desarrollar un método robusto que pueda extraer, identificar y cuantificar de manera eficiente las sustancias perfluoroalquiladas y polifluoroalquiladas (PFAS) objetivo en niveles de pg/g (partes por billón) en tejidos animales utilizando un espectrómetro de masas de alta resolución LC-Orbitrap. Se eligieron treinta y cuatro compuestos PFAS objetivo en función de los estándares de referencia disponibles que se citan en varios métodos regulados por la USEPA. Se utilizó carne de músculo de cerdo como matriz de prueba para demostrar la aplicabilidad.

Introducción

Los PFAS se desarrollaron por primera vez en la década de 1940 y se han utilizado en numerosos sectores industriales y comerciales para productos que requieren estabilidad térmica y química, resistencia al agua y resistencia a las manchas. La conciencia de la contaminación por PFAS en el medio ambiente surgió por primera vez a fines de la década de 1990, tras los avances en la instrumentación LC-MS/MS en tándem que permitió la detección de objetivos de bajo nivel. La mayoría de las regulaciones se han centrado en la contaminación ambiental de PFAS que se han filtrado en muestras de agua y suelo desde una variedad de fuentes, como vertederos o espuma formadora de película acuosa (AFFF) utilizada para extinguir incendios de líquidos inflamables.

La necesidad de analizar PFAS en otras matrices está creciendo rápidamente, ya que estos "químicos permanentes" son muy estables y se bioacumulan fácilmente en los tejidos de plantas y animales. Además, existen más de 9000 PFAS conocidos (y se están descubriendo más PFAS activamente) y sólo un número muy limitado de estándares de referencia certificados disponibles

comercialmente para análisis específicos de rutina. El análisis de masa exacta de alta resolución (HRAM) por LC-Orbitrap tiene una ventaja sobre la espectrometría de masas de triple cuadrupolo porque, además de la cuantificación e identificación de PFAS objetivo, también permite el análisis retrospectivo de archivos de datos de muestra para otros PFAS no objetivo. La mayor selectividad de masa de HRAM MS, debido a la baja precisión de masa de partes por millón (ppm) y la alta resolución de masa, puede ayudar a superar las interferencias de matriz observadas en el análisis de extractos de tejido animal. Este trabajo describe el desarrollo de un método LC-HRAM para el análisis de PFAS en carne de cerdo. El método muestra una excelente sensibilidad y especificidad y es adecuado para el propósito con el potencial de ser una excelente plataforma para compuestos objetivo de PFAS expandidos, así como en matrices más complejas.

Conclusión

El sistema UHPLC Thermo Scientific™ Vanquish™ Flex que utiliza la técnica de inyección tipo sándwich de solvente acoplado al espectrómetro de masas Thermo Scientific™ Orbitrap Exploris™ 120 proporcionó una excelente sensibilidad cuantitativa con confirmación cualitativa en Full MS con modo DIA, con la mayoría de los LOQ de PFAS en la matriz de carne de cerdo inferiores a 50 pg/g (16,7 pg/mL en el extracto final), sin la necesidad de una mayor concentración del extracto.



[Ver la nota de aplicación completa](#)



Análisis de PFAS no específicos

Los compuestos PFAS presentan numerosos desafíos analíticos: desde la cuantificación a niveles bajos hasta la identificación del creciente número de nuevos productos químicos PFAS y sus metabolitos, lo que genera el temor de pasar por alto la próxima variante emergente de preocupación. El seguimiento regulatorio de los PFAS se ha centrado tradicionalmente en el desarrollo de métodos cuantitativos específicos mediante LC-MS/MS. Estos métodos tienen un alcance limitado debido a la falta de estándares de referencia certificados disponibles. Más de 15 000 PFAS conocidos (y se están descubriendo más PFAS de forma activa) dictan la necesidad de un análisis no específico integral de PFAS mediante masa precisa de alta resolución (HRAM). El software Compound Discoverer es una solución llave en mano para el análisis no específico de PFAS en matrices complejas.

Esta sección del compendio describe aplicaciones que utilizan hardware y software diseñados específicamente para buscar compuestos PFAS que usted podría estar pasando por alto. Con amplias bibliotecas de fragmentos de más de 40.000 PFAS y herramientas de visualización integradas, el software Compound Discoverer le ayuda a caracterizar sus muestras fácilmente. Y si desea asistencia adicional, Thermo Fisher Scientific puede ayudarle a optimizar sus flujos de trabajo para obtener resultados más precisos. Para obtener más información, visite [Soluciones para pruebas de PFAS](#).

Título

Haga clic en los títulos de las notas para saltar a la página

[Procesamiento de datos de PFAS: los productos químicos permanentes no necesitan análisis permanentes con el equipo y el software adecuados](#)

[Un flujo de trabajo de software integral para el análisis no dirigido de sustancias perfluoroalquiladas y polifluoroalquiladas \(PFAS\) mediante espectrometría de masas de alta resolución \(HRMS\)](#)

[Biblioteca mzCloud de Thermo Scientific para un análisis de PFAS preciso y confiable](#)

Procesamiento de datos de PFAS: los productos químicos permanentes no necesitan análisis permanentes con el equipo y el software adecuados

Thermo Fisher Scientific

Meta

En esta nota inteligente, abordamos consideraciones críticas para ayudar a garantizar su éxito al satisfacer las necesidades cambiantes de análisis de datos de PFAS.

Introducción

Las sustancias perfluoroalquiladas y polifluoroalquiladas (PFAS) se introdujeron en la década de 1940 y se incorporaron rápidamente a productos de uso diario en múltiples industrias, desde materiales repelentes de manchas y agua hasta revestimientos, pinturas e incluso espumas utilizadas para combatir incendios. Inicialmente, se pensaba que estos compuestos eran inertes y se consideraban "químicos milagrosos". Su uso estaba muy extendido y ahora se estima que existen más de 10.000 posibles compuestos PFAS.

Los compuestos PFAS más conocidos, el ácido perfluorooctanoico (PFOA) y el ácido perfluorooctanosulfónico (PFOS), han sido ampliamente estudiados por sus propiedades químicas y efectos toxicológicos. Ambos productos químicos son persistentes en el medio ambiente y se acumulan en el cuerpo humano con el tiempo. La exposición humana a los PFAS puede atribuirse a múltiples fuentes, entre ellas el agua, el suelo, la cadena alimentaria, los equipos de procesamiento y los materiales de envasado.

Se pueden implementar numerosas estrategias para brindar confianza en sus resultados y garantizar la seguridad del consumidor.

Preguntas abordadas

- ¿Por qué es tan difícil analizar los PFAS?
- ¿Cómo puedo aumentar la eficiencia del procesamiento de mis datos y garantizar que mis análisis tengan un tiempo de respuesta rápido?
- ¿Cómo puedo determinar qué compuestos hay en conjuntos de datos potencialmente complejos y, al mismo tiempo, garantizar la confianza en estos resultados?
- De lo desconocido a lo conocido: ¿cómo puedo agilizar la identificación de posibles nuevos contaminantes?
- ¿Cómo puedo transferir mis identificaciones de compuestos para un análisis QQQ de alto rendimiento?



Ver la nota inteligente completa

Un flujo de trabajo de software integral para el análisis no dirigido de sustancias perfluoroalquiladas y polifluoroalquiladas (PFAS) mediante espectrometría de masas de alta resolución (HRMS)

Juan M. Sánchez, Ralf Tautenhahn, Thermo Fisher Scientific, San José, CA, EE. UU.

Meta

Proporcione una descripción general de las nuevas capacidades de flujo de trabajo de análisis de PFAS no dirigido dentro del software Thermo Scientific™ Compound Discoverer™.

Introducción

La ubicuidad y toxicidad de un grupo altamente estable de pequeñas moléculas conocidas colectivamente como sustancias perfluoroalquiladas y polifluoroalquiladas (PFAS) ha generado recientemente preocupación entre las agencias reguladoras de la salud y el medio ambiente a nivel mundial. El monitoreo regulatorio de las PFAS se ha centrado tradicionalmente en el desarrollo de métodos cuantitativos específicos mediante LC-MS/MS. Estos métodos tienen un alcance limitado debido a la falta de estándares de referencia certificados disponibles. Más de 9000 PFAS conocidos (y se están descubriendo más PFAS activamente) dictan la necesidad de un análisis integral no específico de PFAS mediante masa precisa de alta resolución (HRAM).

Numerosas técnicas individuales eficaces para discriminar PFAS en matrices complejas mediante el uso de atributos intrínsecos como iones de productos característicos, tiempos de retención progresivos vinculados a la longitud de la cadena y defecto de masa de Kendrick específico de CF_2 están bien documentadas en la literatura. Además, los atributos fisicoquímicos del flúor, como un defecto de masa negativo característico y la formación de series homólogas que contienen patrones de CF_2 predecibles.

Los resultados de las técnicas de síntesis industrial de PFAS pueden aprovecharse para simplificar la detección y anotación de nuevos PFAS. Aquí presentamos una fusión de las técnicas de análisis de PFAS no dirigidas más destacadas, aprovechadas en un único flujo de trabajo utilizando el software Compound Discoverer como una solución llave en mano.

Conclusión

El software Compound Discoverer es una potente plataforma que ofrece una solución integral llave en mano para el análisis no dirigido de PFAS en matrices complejas. El acceso a la biblioteca espectral mzCloud para proporcionar búsquedas de similitud, así como el potencial para aprovechar la fragmentación in silico en modo positivo y la comparación con una biblioteca de clases de compuestos seleccionada manualmente de iones de productos característicos de PFAS en modo negativo, proporciona capacidades incomparables. La incorporación de técnicas de análisis y mejores prácticas de la literatura, la compilación de bases de datos de PFAS, un nodo de secuencias de comandos personalizado para la discriminación ortogonal y una gran cantidad de herramientas de visualización integradas permiten un enfoque simplificado para analizar esta clase preocupante de moléculas pequeñas. Cuando se enfrenta al desafío de analizar PFAS, el flujo de trabajo de PFAS no dirigido disponible en la versión 3.3 SP2 del software Compound Discoverer puede proporcionar a los laboratorios una solución integrada para lograr información significativa.



[Ver la nota de aplicación completa](#)



Biblioteca mzCloud de Thermo Scientific para un análisis de PFAS preciso y confiable

Thermo Fisher Scientific

Introducción

Los organismos reguladores mundiales están investigando la prevalencia de compuestos de sustancias perfluoroalquilo y polifluoroalquilo (PFAS) debido a su toxicidad, persistencia y uso generalizado, especialmente como espuma formadora de película acuosa (AFFF).

Los PFAS también se utilizan en una amplia variedad de productos de consumo domésticos e industriales, como alfombras y muebles, envases de alimentos y utensilios de cocina. La exposición humana a residuos de PFAS se ha relacionado con la incidencia de cáncer, obesidad, trastornos del sistema endocrino y otros efectos adversos para la salud. Se estima que existen más de 6000 posibles compuestos de PFAS. La cuantificación y detección de la prevalencia de cualquiera de estos compuestos en niveles bajos es especialmente difícil.

Para ayudarlo a brindar una identificación de alta calidad de fluoroquímicos, Thermo Fisher Scientific ha producido una biblioteca de compuestos PFAS de alta resolución y masa precisa (HRAM) para brindar máxima confianza y confirmación en los datos que informa.

Lo que hace que esta biblioteca sea especialmente poderosa es que está 100 % seleccionada con estándares reales de tecnología de vanguardia Thermo Scientific™ Orbitrap™. Si bien algunas bibliotecas pueden tener más compuestos, estos se basan en estructuras estimadas basadas en instrumentación QTOF de menor resolución; los datos de menor calidad generarán más errores y menor confianza en las búsquedas en la biblioteca.

Conclusión

La biblioteca actual Thermo Scientific™ mzCloud™ es capaz de realizar análisis de PFAS con:

- 43 normas
- Datos HRAM MSⁿ de cada estándar en modo negativo y 100% curados
- La mayor calidad posible para precisión de masa y reproducibilidad espectral con múltiples niveles de energía.
- Identificación de compuestos basada en datos MS/MS o MSⁿ
- Búsqueda de similitud basada en MS/MS o MSⁿ Datos para encontrar compuestos PFAS desconocidos



[Ver el folleto completo](#)



Productos químicos y consumibles para pruebas de PFAS

En Thermo Fisher Scientific podemos ofrecer una amplia gama de consumibles, reactivos y suministros de laboratorio adecuados para las pruebas de PFAS. Consulte las siguientes páginas para conocer los productos químicos y consumibles recomendados para PFAS.

Productos químicos para pruebas de PFAS

Nuestros reactivos y productos químicos de pureza ultraalta son adecuados tanto para la preparación de muestras como para el análisis de compuestos PFAS. Los siguientes productos son adecuados para métodos de detección específicos y no específicos (incluidas las normas ASTM globales, la Convención de Estocolmo sobre contaminantes orgánicos persistentes (COP), la Directiva de agua potable de la UE y los métodos 537, 537.1, 533, 8327 y 1633 de la EPA de EE. UU.).

Recomendamos utilizar nuestros solventes de grado UHPLC-MS para el análisis de PFAS, ya sea que utilice HPLC o UHPLC como parte de su protocolo de prueba. Estos productos no contienen revestimientos de fluoropolímero en las tapas, lo que elimina el fondo lixiviable que interfiere con el análisis de PFAS.

Descripción de productos químicos	Tamaño del paquete	Número de pieza
Acetonitrilo, UHPLC-MS, productos químicos Thermo Scientific	1 litro	A9561
	6 × 1 L	A9561CS
Metanol, UHPLC-MS, productos químicos Thermo Scientific	6 × 1 L	A4581CS
Agua, UHPLC-MS, productos químicos Thermo Scientific	1 litro	W81
	6 × 1 L	W81CS
Acetona al 99,9 % para análisis de residuos, Thermo Scientific Chemicals	1 litro	423240010
Tolueno, grado HPLC, 99,7 % mín., Thermo Scientific Chemicals	1 litro	610110040
Diclorometano, para análisis de residuos y pesticidas, Thermo Scientific Chemicals	1 litro	326600010
	2,5 litros	326600025

Descripción de productos químicos	Tamaño del paquete	Número de pieza
Ácido acético, 99,7+ %, reactivo ACS, Thermo Scientific Chemicals	500 ml, 2,5 l	423225000
Ácido fórmico, 99 %, Thermo Scientific Chemicals	25 ml	270480250
	1 litro	270480010
	2,5 litros	270480025
Acetato de amonio, 97 %, Thermo Scientific Chemicals	250 grs	A16343.30
	1 kg	A16343.0B
	5 kg	A16343.0I
Hidróxido de amonio, ACS, 28,0-30,0 % NH ₃ , Thermo Scientific Chemicals	250 gr	033285.30
	1 kg	033285.A1
	5 × 1 kg	033285.D9

Productos químicos y consumibles para pruebas de PFAS

Columnas

Para inyecciones directas de gran volumen y alta retentividad, una columna completamente porosa como Thermo Scientific™ Aclamación™ El C18 tiene una forma de pico excelente para las pruebas de PFAS. Para los métodos en los que se emplean volúmenes de inyección de muestra más pequeños, Thermo Scientific™ Acumulación™ Se recomienda RP-MS.

Tipo de consumible	Descripción de la Columna	Tamaño del paquete	Número de pieza
Columna aisladora	Columna Accucore C18, 2,6 µm, 2,1 × 50 mm	1	17126-052130
Cartucho de protección	Columna Acclaim 120 C18 C18, 5 µm, 10 mm frente a 2,1 mm, cartucho protector	2	069689
Guarda Columna	Kit de acoplador y soporte de cartucho Acclaim Guard V-2	1	069707
Columna	Columna Acclaim 120 C18, 2 µm, 150 mm × 2,1 mm	1	071399
Columna	Columna Acclaim 120 C18, 2 µm 2,1 mm × 100 mm	1	068982
Cartucho de protección	Cartuchos GUARDS Accucore RP-MS de 10 mm × 2,1 mm	4	17626-012105
Guarda Columna	SOPORTE UNIVERSAL UNIGUARD PARA DIÁMETRO INTERNO DE 2,1/3,0 MM	1	852-00
Columna	Columna Accucore RP-MS de 2,6 µm y 100 mm × 2,1 mm	1	17626-102130
Columna	Columna Accucore RP-MS de 2,6 µm y 150 mm × 2,1 mm	1	17626-152130

Productos químicos y consumibles para pruebas de PFAS

Viales y placas de pocillos

Para garantizar un método sólido con resultados precisos, utilice un vial de polipropileno o polietileno. La importancia de utilizar materiales altamente inertes para compuestos que contienen grupos funcionales químicos con fuerte electronegatividad es imperativa, en particular para analitos con concentraciones más bajas como los PFAS.

Tipo de consumible	Viales y tapones de rosca: para análisis de rutina y de investigación	Tamaño del paquete	Número de pieza
Viales	Microviales de polietileno transparente de 0,4 ml con rosca de 9 mm y inserto cónico	100	6ESV9-04PP
Viales	Microviales de polietileno transparente de 1,5 ml con rosca de 9 mm y inserto cónico	100	6ESV9-1PP
Tapas	Tapones de rosca de polietileno transparente de 9 mm con membrana de polipropileno integrada	100	C5000-50
Tapas	Tapones de rosca de polipropileno azul de 9 mm con cierre AVCS, disco de aluminio macizo con anillo de sellado de silicona	100	C5000-56AL

Tipo de consumible	Viales y tapones de rosca: para análisis de rutina y de investigación	Tamaño del paquete	Número de pieza
Viales	Microviales SureSTART de polipropileno con tapa a presión de 0,8 ml y fondo plano	100	6ERV11-08PPFB
Viales	Microviales SureSTART de polipropileno con tapa a presión de 0,8 ml, inserto cónico	100	6ERV11-08PPC
Viales	Microviales SureSTART de polipropileno con tapa a presión de 0,3 ml, inserto cónico	100	6ERV11-03PPC
Tapas	Tapones a presión SureSTART de 11 mm con membranas de polietileno azul	100	6ERC11PE

Tipo de consumible	Placas y tapetes de pocillos: para análisis de alto rendimiento	Tamaño del paquete	Número de pieza
Placa de pocillos	Placas de pocillos profundos WebSeal de 96 pocillos, de plástico sin revestimiento, fondo redondo en U, 1000 µl	50	60180-P201
Estera de placa de pocillos	Alfombrilla de sellado para placas de 96 pocillos WebSeal, 7 mm de diámetro, redonda	100	60180-M179
Placa de pocillos	Placas de pocillos profundos WebSeal de 96 pocillos, de plástico sin revestimiento, fondo cuadrado en V, 2000 µl	50	60180-P202
Estera de placa de pocillos	Alfombrilla de sellado para placas WebSeal de 96 pocillos, 8 mm de diámetro, cuadrada	100	60180-M121

Conozca más sobre nuestras tecnologías

Columnas de cromatografía y preparación de muestras

thermofisher.com/cromatografia-consumibles

Preparación de muestras para cromatografía

thermofisher.com/chromography-sample-prep

Cromatografía líquida

thermofisher.com/hplc

Cromatografía iónica y espectrometría de masas

thermofisher.com/ic

Cromatografía líquida, espectrometría de masas

thermofisher.com/lcms

Cromatografía de gases y espectrometría de masas

thermofisher.com/gc-ms

Espectroscopia, análisis elemental e isotópico

thermofisher.com/spectroscopia-analisis

Análisis discreto

thermofisher.com/discreteanalysis

Gestión de datos de laboratorio

thermofisher.com/data-management

Software del sistema de datos de cromatografía (CDS)

thermofisher.com/chromeleon

Debido a la naturaleza dinámica de las directrices de las agencias reguladoras, las normas a las que se hace referencia en este compendio (y sus respectivos enlaces) están sujetas a cambios. Comuníquese con su representante de ventas local para obtener información regulatoria actualizada.



Obtenga más información en thermofisher.com/pruebasPFAS

thermo scientific