



PFAS analysstrategier för att få rätt svar

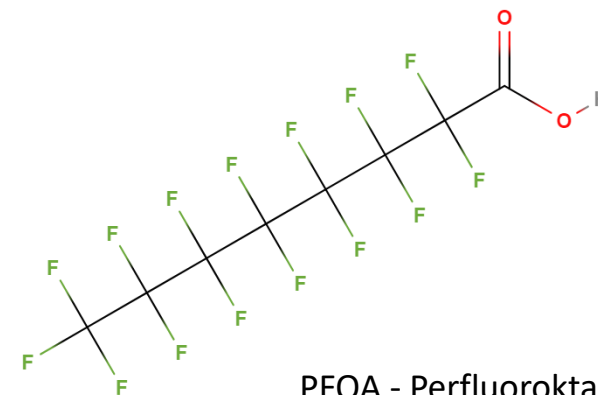
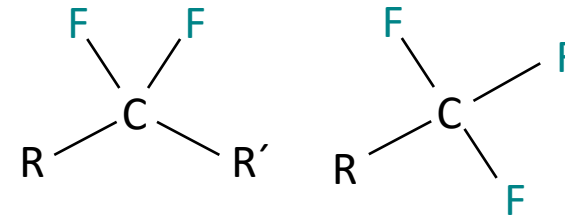
Gunnar Thorsén, PhD, Docent
Senior Expert, Miljökemi
IVL Svenska Miljöinstitutet

PFAS – en mycket stor grupp av kemikalier

- Unika egenskaper: fett- och vattenavstötande
- Används för beläggning av ytor, i brandskum, som emulgeringsmedel, kylmedia, metallbearbetning, etc...
- Väldigt långlivade - evighetskemikalier
- I den bredaste bemärkelsen - miljontals ämnen (OECD, 2020) – ”PubChem PFAS tree”
- Mest fokus på per- och polyfluorerade alkansyror

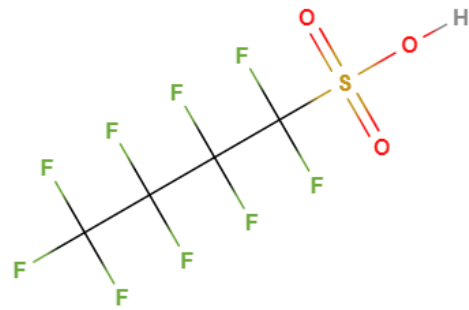


Trier et al. 2017

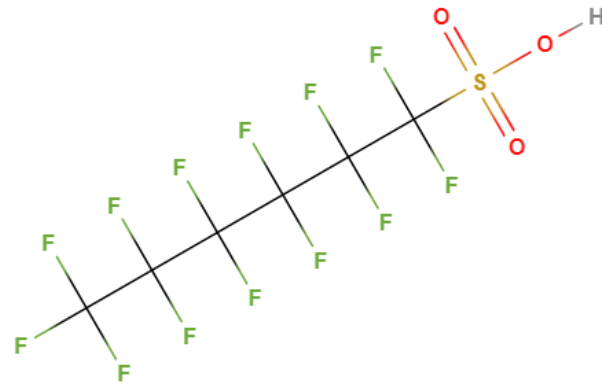


PFOA - Perfluoroktansyra

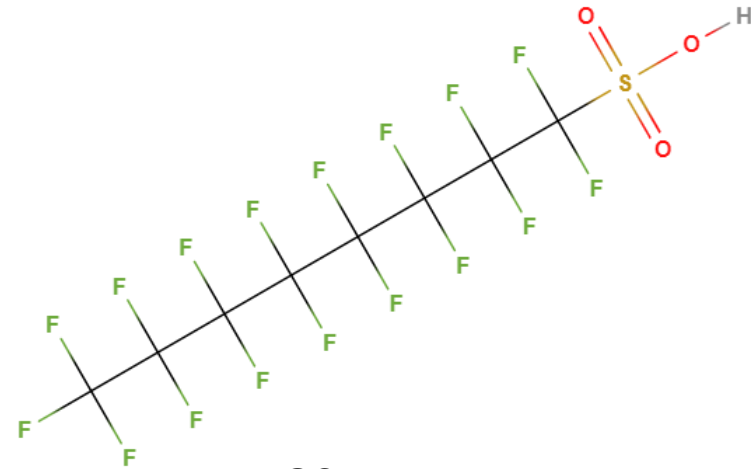
Några exempel på PFAS



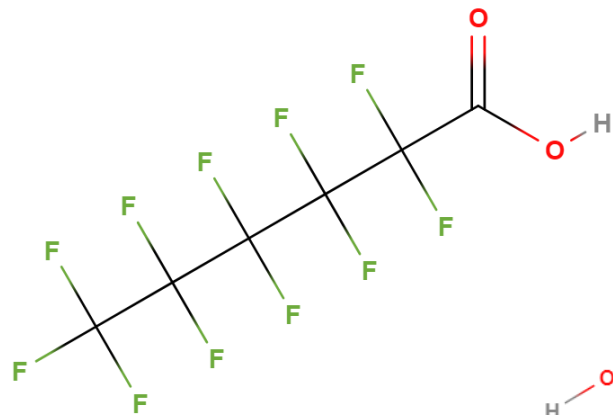
PFBS



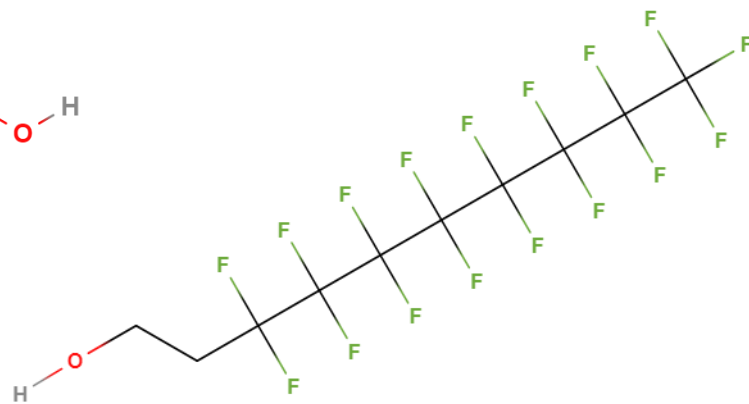
PFHxS



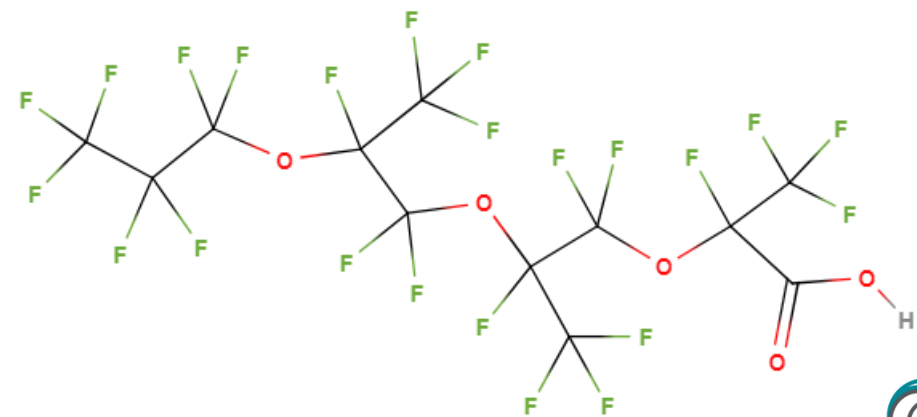
PFOS



PFHxA

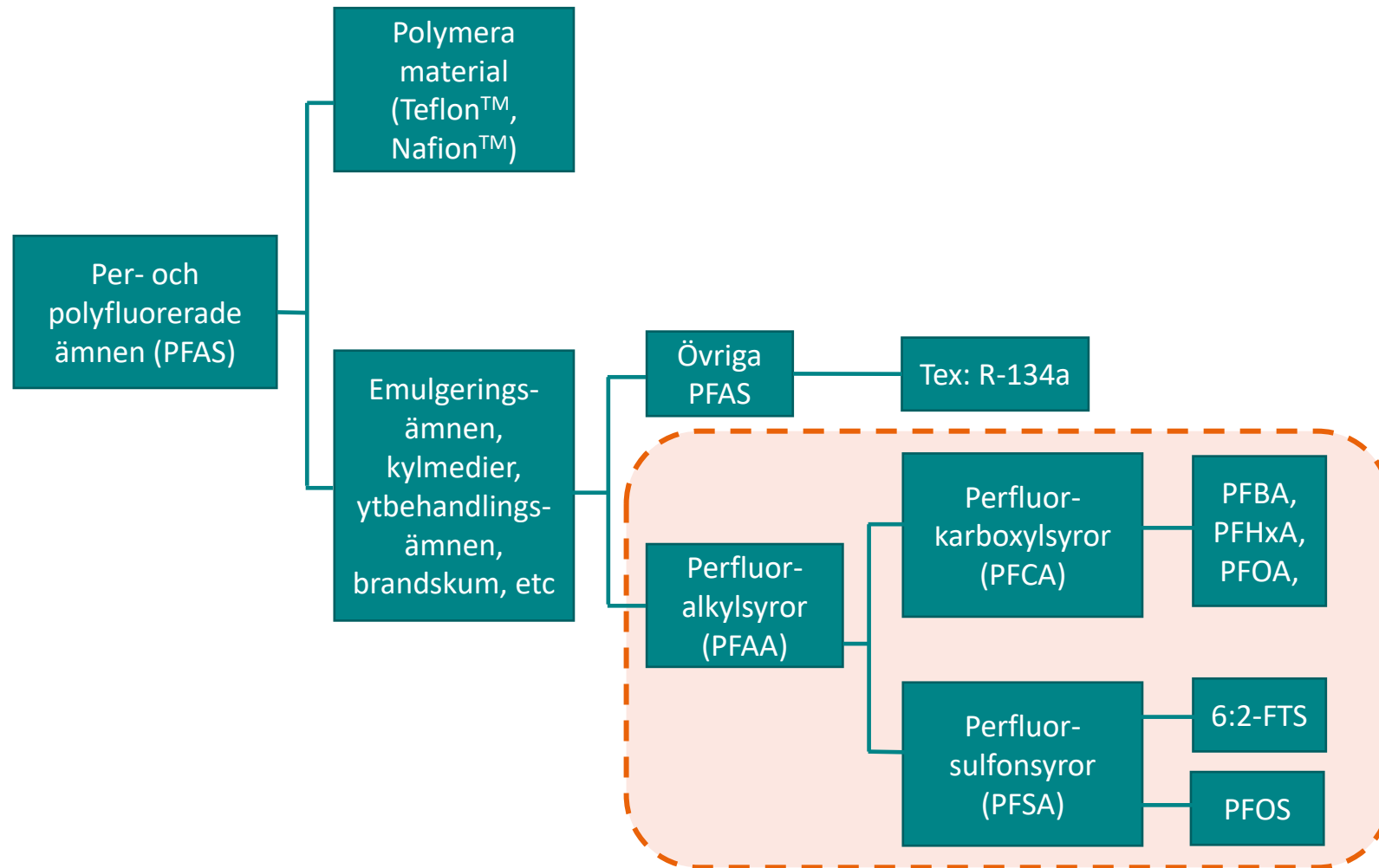


FTOH

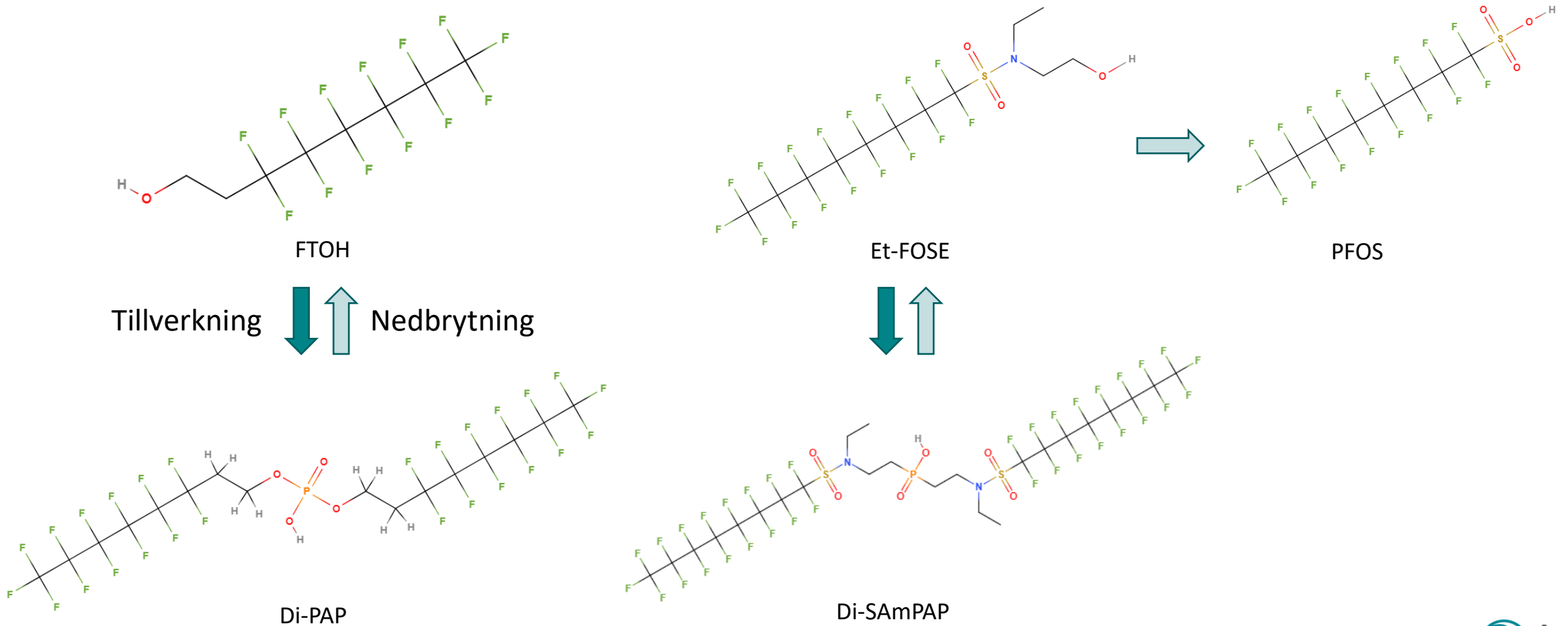


HPFO-Ta (polymer PFAS)

Olika typer av PFAS

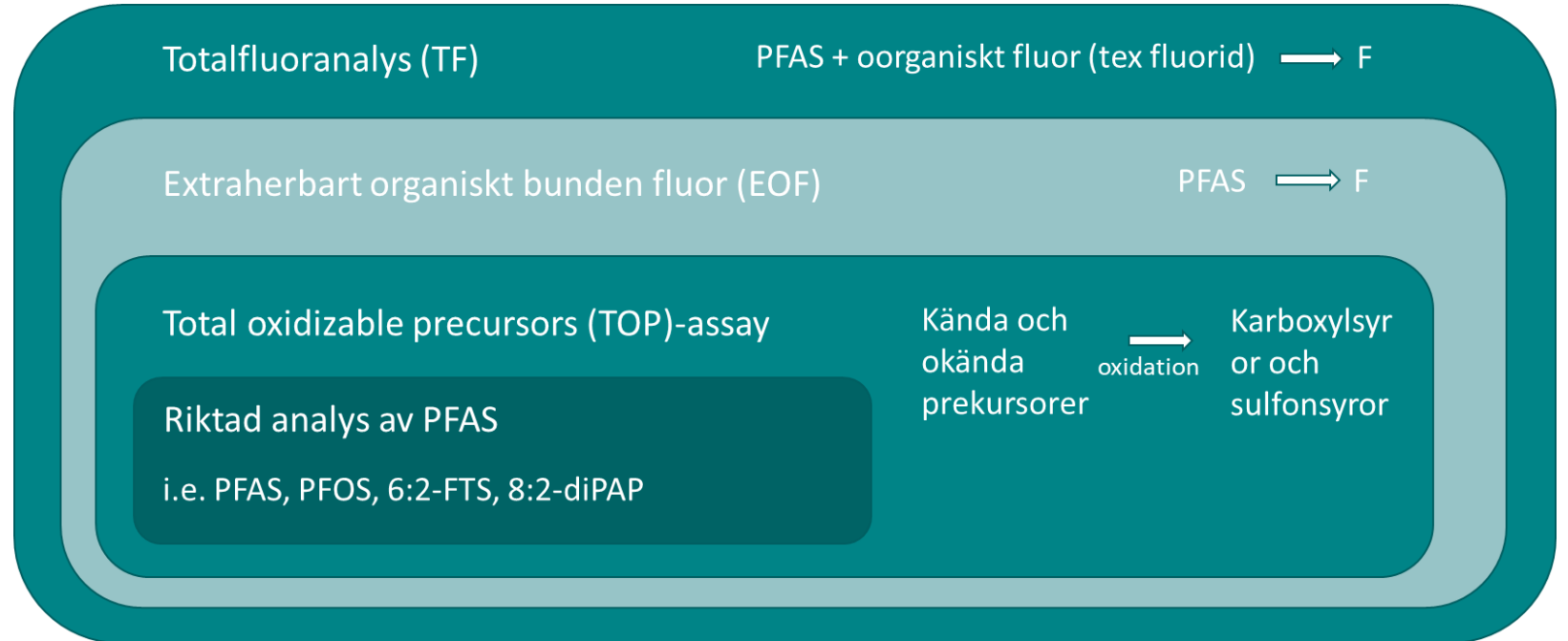


Vissa PFAS är rester från tillverkning eller nedbrytningsprodukter



Olika kemisk analys av PFAS

- Riktad analys av specifika PFAS
- Analys av prekursorer (TOP-assay)
- Summa-parametrar: extraherbart organiskt fluor (EOF), totalfluor (TF)
- Historiskt: mätningar av PFOS, PFOA eller PFAS 11

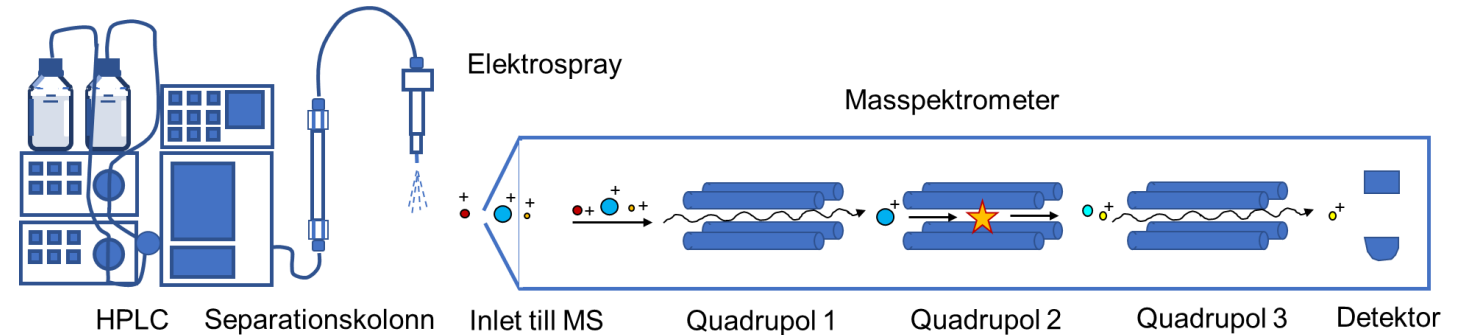


Baresel C., et al. 2022

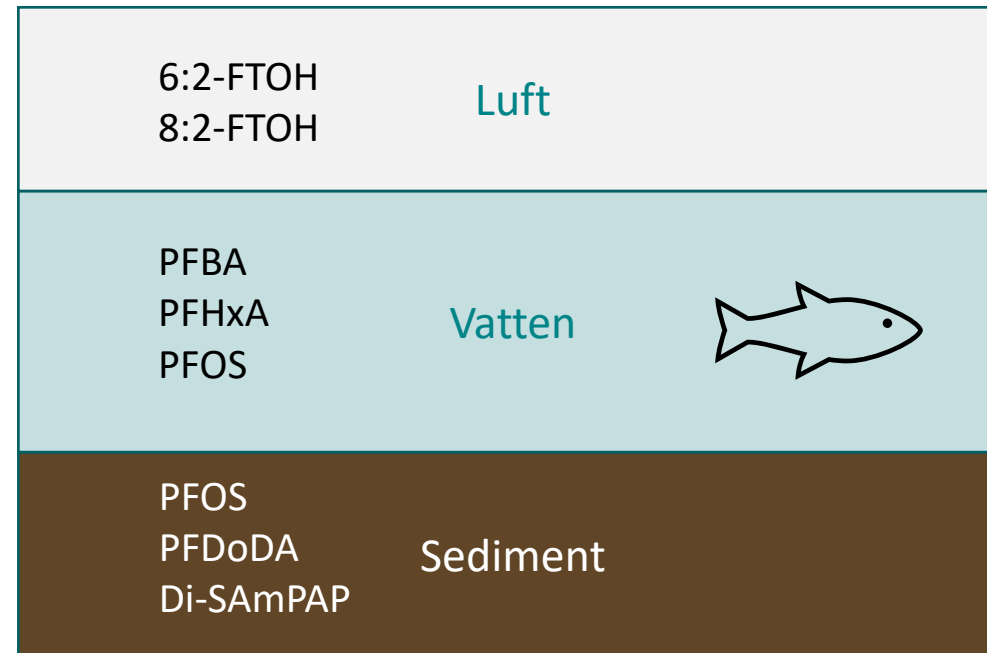
Tar inte upp: spektroskopiska tekniker för totalfluor (XRF, PIGE, NIGE/INAA) eller suspect och non-target screening

Riktad LC-MS/MS analys av PFAS

- Väldigt selektiv
- Väldigt låga kvantifieringsgränser
- Begränsas till de PFAS för vilka det finns tillgängliga referenssubstanser
- I dagsläget finns det lab som kan erbjuda över 50 PFAS
- Viktigt att tänka på vilka vad man skall ha resultaten till
-Uppfylla lagkrav, forskning eller generera ny kunskap



Baresel C. et al. 2022



Olika analyspaneler: PFAS 4, PFAS 11, PFAS 21

1	PFBA	Perfluorobutanoic acid
2	PFPA	Perfluoropentanoic acid
3	PFHxA	Perfluorohexanoic acid
4	PFHpA	Perfluoroheptanoic acid
5	PFOA	Perfluorooctanoic acid
6	PFNA	Perfluorononanoic acid
7	PFDA	Perfluorodecanoic acid
8	PFBS	Perfluorobutanesulfonic acid
9	PFHxS	Perfluorohexanesulfonic acid
10	PFOS	Perfluorooctanesulfonic acid
11	6:2 FTS	Fluortelomersulfonate

Livsmedelsverket

Summa PFAS 11 gränsvärde för ytvatten som är
avsett för dricksvattentäkt

PFAS 11: 90 ng/L

1	PFBA	Perfluorobutansyra
2	PFPeA	Perfluoropentansyra
3	PFHxA	Perfluorohexansyra
4	PFHpA	Perfluoroheptansyra
5	PFOA	Perfluorooctansyra
6	PFNA	Perfluorononansyra
7	PFDA	Perfluorodekansyra
8	PFUnDA	Perfluoroundecansyra
9	PFDoDA	Perfluorododekansyra
10	PFTTrDA	Perfluorotridekansyra
11	PFBS	Perfluorobutansulfonsyra
12	PFPeS	Perfluoropentansulfonsyra
13	PFHxS	Perfluorohexansulfonsyra
14	PFHpS	Perfluoroheptansulfonsyra
15	PFOS	Perfluorooctansulfonsyra
16	PFNS	Perfluorononansulfonsyra
17	PFDS	Perfluorodekansulfonsyra
18	PFUnDS	Perfluoroundecansulfonsyra
19	PFDoDS	Perfluorododekansulfonsyra
20	PFTTrDS	Perfluorotridekansulfonsyra
21	6:2-FTS	6:2-Fluorotelomersulfonsyra

Livsmedelsverkets gränser för dricksvatten:

PFAS 4: 4 ng/L

PFAS 21: 100 ng/L

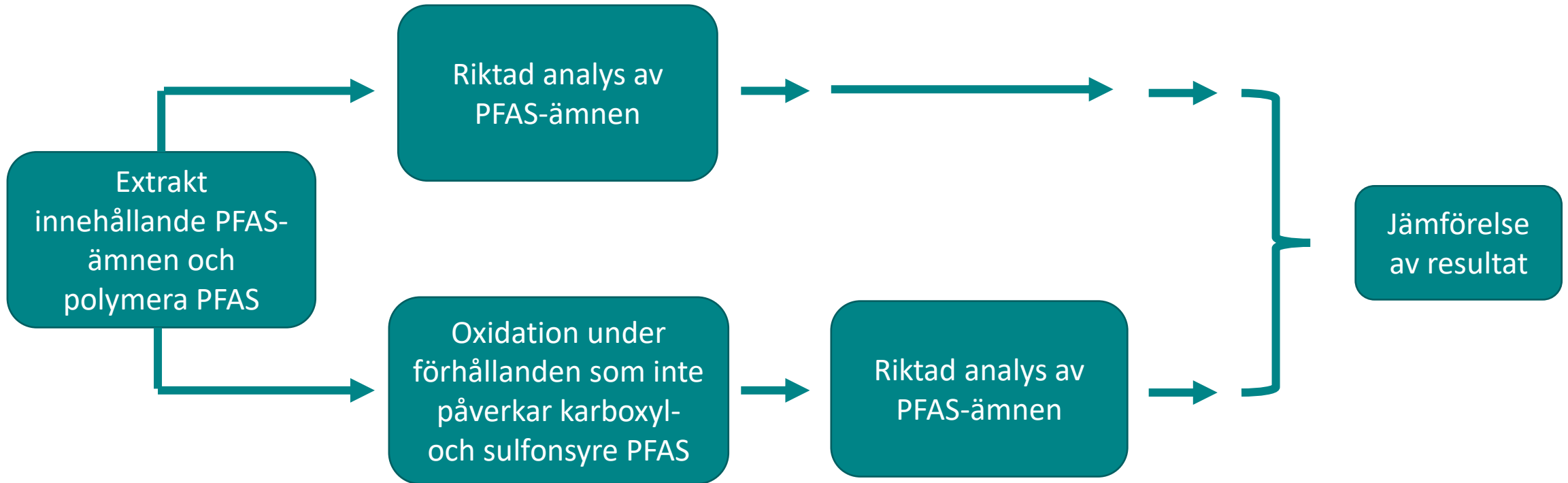
PFAS total: 500 ng/L – metod ej bestämd

Olika analyspaneler: PFAS 24

SGU:
Gränsvärde för
grundvatten och
ytvatten
4.4 ng/L viktat
gränsvärde för PFAS24
PFOA ekvivalenter

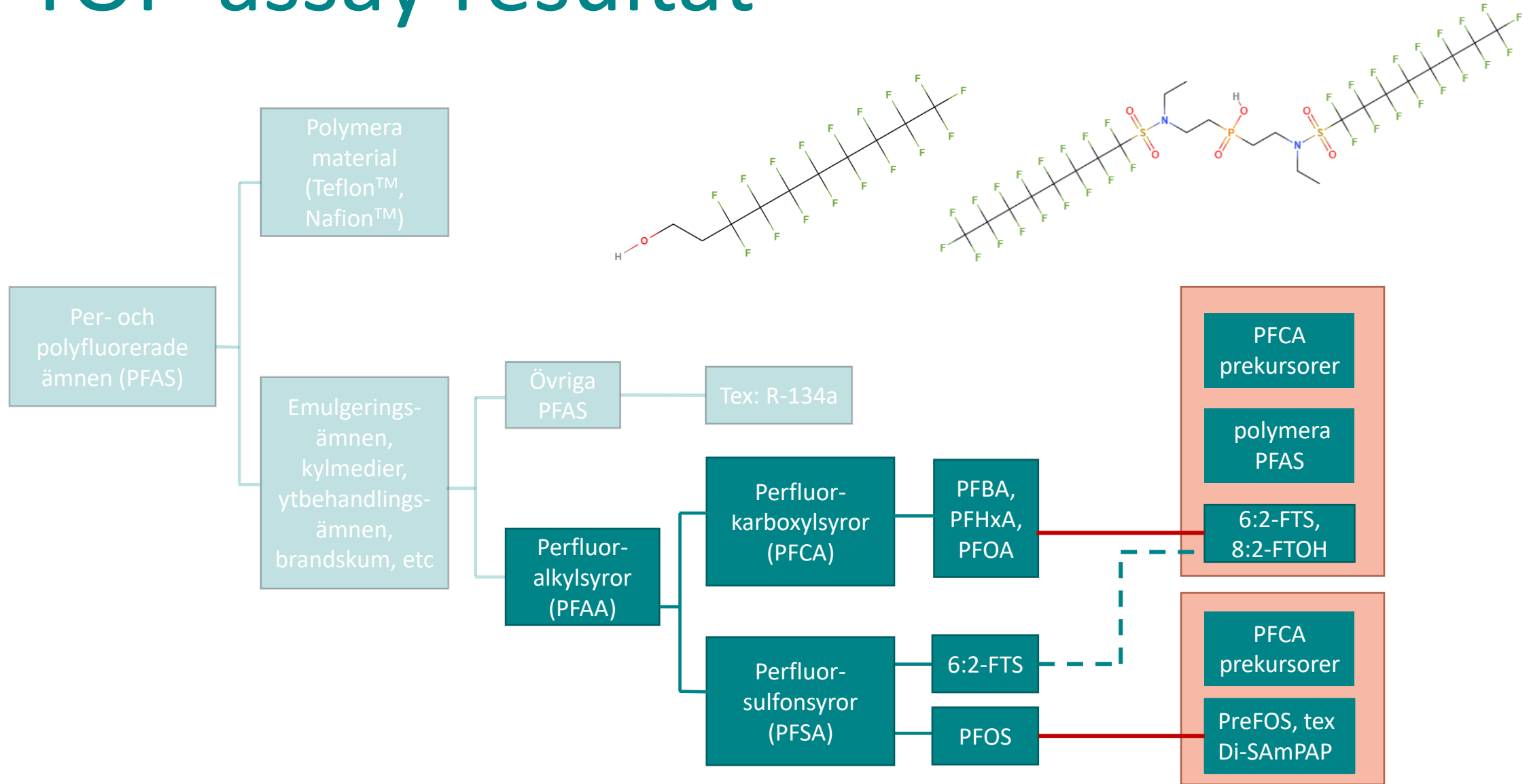
Perfluorhexansulfonsyra (PFHxS)
Perfluoroktansulfonsyra (PFOS)
Perfluoroktansyra (PFOA)
Perfluornonansyra (PFNA)
Perfluorbutansulfonsyra (PFBS)
Perfluorhexansulfonsyra (PFHxA)
Perfluorbutansyra (PFBA)
Perfluorpentansyra (PFPeA)
Perfluorpentansulfonsyra (PFPeS)
Perfluordekansyra (PFDA)
Perfluordodekansyra (PFDoDA /PFDoA)
Perfluorundekansyra (PFUnDA / PFUnA)
Perfluorheptansyra (PFHpA)
Perfluortridekansyra (PFTrDA)
Perfluorheptansulfonsyra (PFHpS)
Perfluordekansulfonsyra (PFDS)
Perfluortetradekansyra (PFTeDA)
Perfluorhexadekansyra (PFHxDA)
Perfluoroktadekansyra (PFODA)
HFPO-DA / Gen X
ADONA
Fluortelomer 6:2-alkohol (6:2 FTOH)
Fluortelomer 8:2-alkohol (8:2 FTOH)
C6O4

Total oxidizable precursors (TOP assay)

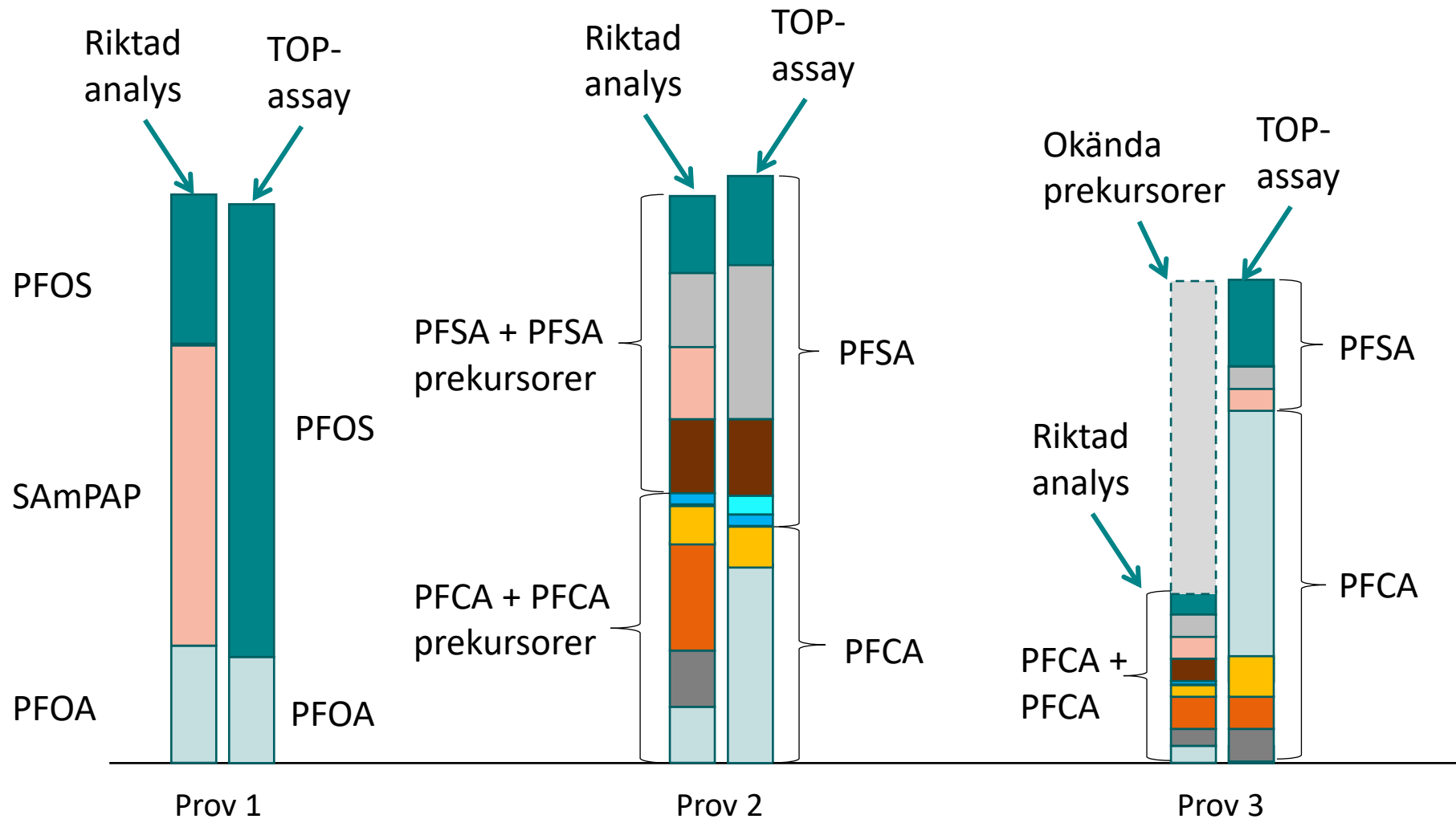


De flesta prekursorer, tex fosfat- och sulfonsyraestrar bryts ned till karboxylsyror eller sulfonsyror men vissa ämnen tex estrar som HPFO-Da (GenX) gör inte detta.

TOP-assay resultat



TOP assay resultat



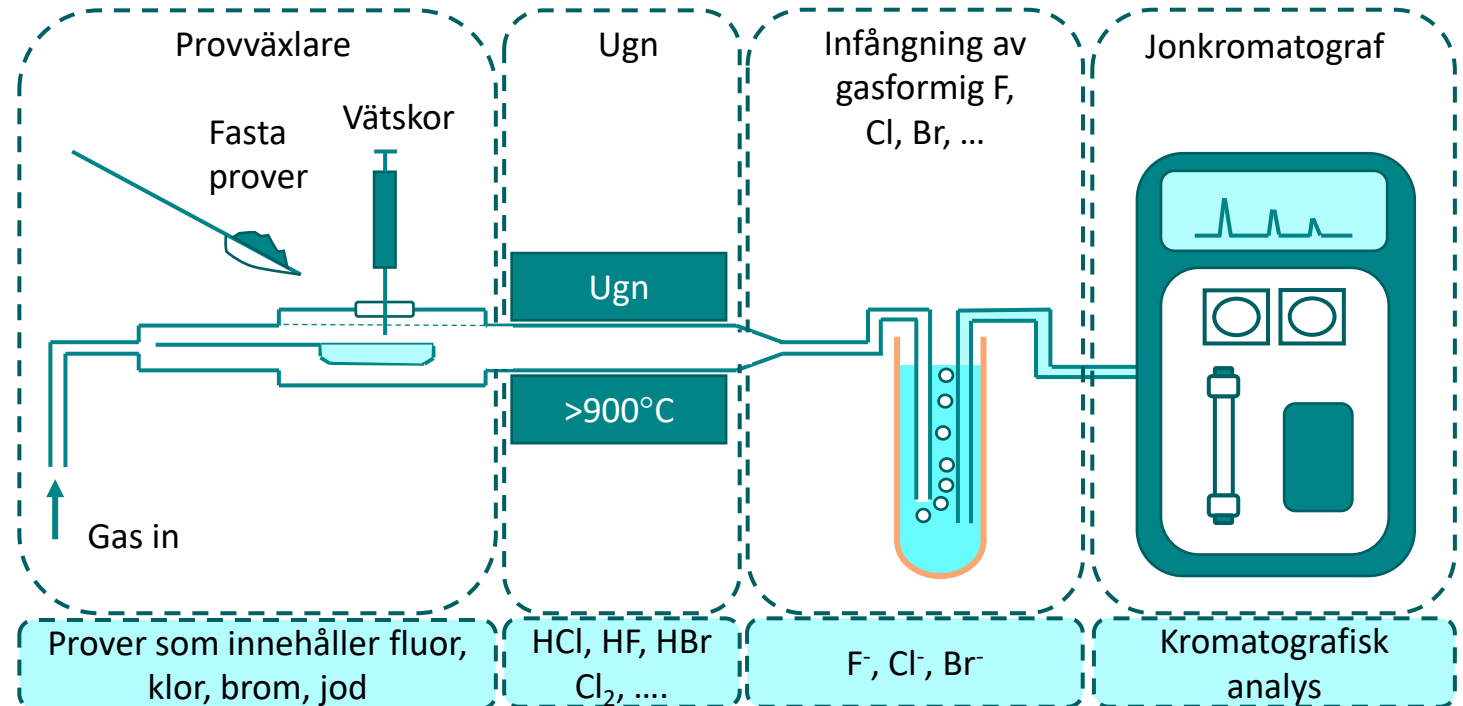
Prov 1
SAmPAP har konverterats till PFOS

Prov 2
Alla prekursorer finns representerade i den riktade analysen

Prov 3
Det finns prekursorer som inte är representerade i den riktade analysen

AOF or EOF

- AOF – fluorinnehållande ämnen som har adsorberats på fast fas
- EOF – Fluorinnehållande ämnen som har extraherats med organiskt lösningsmedel
- Prover pyrolyserade i ugn
- Fluorerade ämnen konverterade till fluorid
- Insamlade joner analyserade med jonkromatograf



Anpassad från: Metrohm CIC brochure

Vilken andel av PFAS bestäms med de olika analyserna

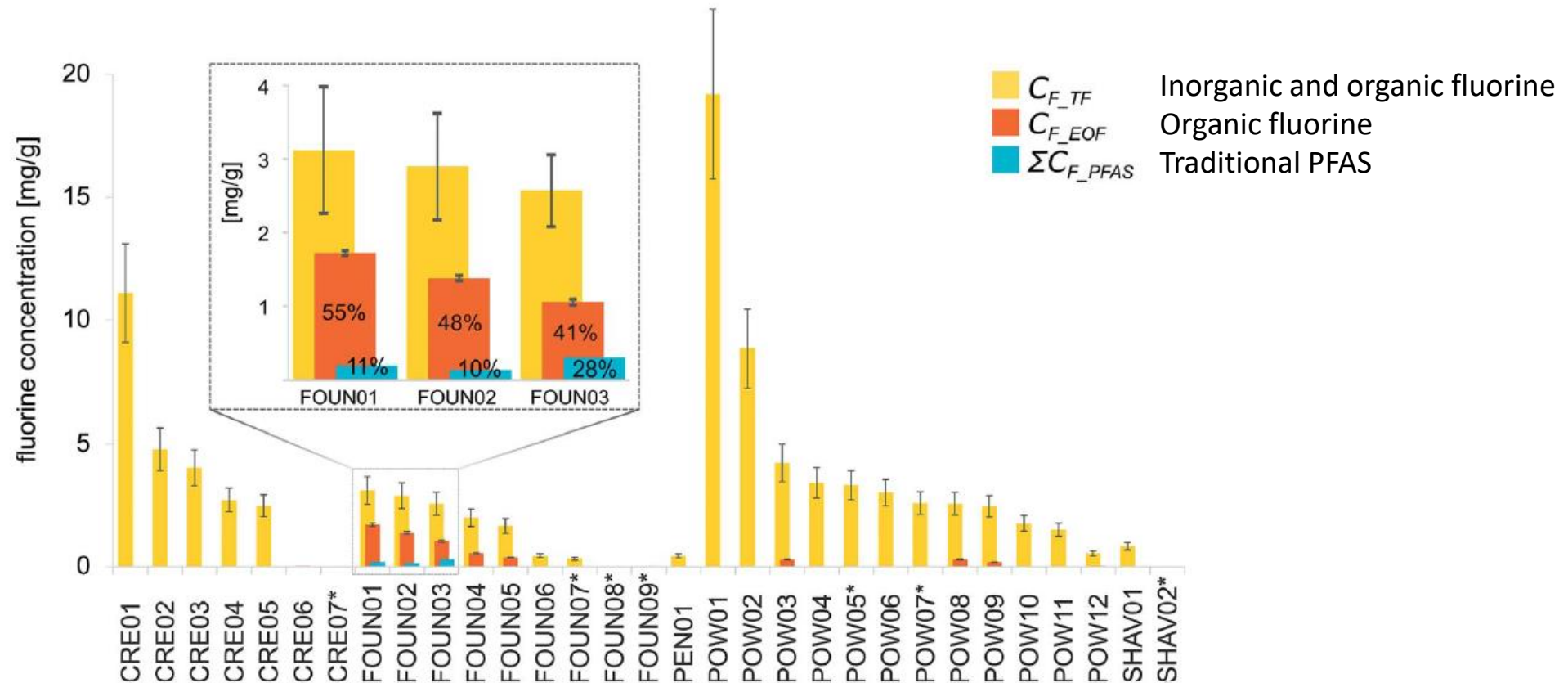


Fig. 3 Stacked bar plot of C_{F_TF} , C_{F_EOF} and ΣC_{F_PFAS} . Asterisks denote samples not listing any fluorinated ingredients. Error bars represent triplicate measurements (TF) and triplicate extractions (EOF). Inset shows mass balance of samples FOUN01, FOUN02 and FOUN03, for which percentage C_{F_EOF} of C_{F_TF} and ΣC_{F_PFAS} of C_{F_EOF} are shown.

PFAS analys sammanfattning

Riktad analys

Kvantitativ analys
av specifika PFAS

TOP assay

Kvantifierar de stabila
PFAS karboxylsyror
och –sulfonsyror som
kan bildas från så
kallade prekursorer

AOF/EOF

Bestämmer hur
mycket organiskt
bundet fluor som
finns i provet

Totalfluor

Bestämmer hur
mycket fluor
som totalt finns i
provet, organiskt
eller oorganiskt

Fluorinhåll



Selektivitet



IVL PFAS team:

Analys av PFAS: Gunnar Thorsén, Raed Awad, Ioannis Liagkouridis

Humanexponering PFAS: Kerstin Pütz (publicerar som Winkens)

PFAS i produkter: Ioannis Liagkouridis, Damien Bolinius, Kerstin Pütz

Livscykelanalys (LCA/LCIA): Hanna Holmquist, Ioannis Liagkouridis

PFAS-åtgärder: Jonas Henriksson

Reningsverk: Mayumi Narongin, Christian Baresel

Tack!

Email: gunnar.thorsen@ivl.se

Tel: 010-788 66 55