

PFOSなど有機フッ素化合物を対象とした飛行時間型質量分析計による精密質量分析について

大阪産業大学 新産業研究開発センター
大阪産業大学大学院 工学研究科
大阪産業大学 新産業研究開発センター
大阪産業大学 工学部

○谷口省吾
橋口亜由未
Rabindra Raj Giri
尾崎博明

研究の背景と目的

- PFOS(ペルフルオロオクタンスルホン酸)等の難分解性の有機フッ素化合物を含む水処理では電気分解法が有効であることを明らかにした。
- 処理水質の評価のためにはPFOS分解生成物の同定が重要
- 電気分解後の処理水中の化合物について飛行時間型質量分析計を用いて分解生成物の組成解析を行い分解生成物の推定を行った。

実験および測定方法

- 試料は超純水中に溶解させたPFOSおよびPFOAを電気分解法によって分解処理した処理水の測定を行った。
- 測定はUPLC/TOF-MS
 - (ACQUITY UPLC/LCT Premier XE:いずれも日本ウォーターズ(株))
 - 質量分析計の最適化はロイシンエンケファリンで行い。質量較正はギ酸ナトリウム溶液を用いて行った。

結果および考察

表1 PFOS 処理水中の分解生成物の元素組成

番号	実測質量 (m/z)	PFOSとの 質量差 (Da)	予想される元素組成	反応
S1	461. 9407	-38. 003	<chem>C8H15O3S</chem>	脱フッ素
S2	515. 9324	15. 9954	<chem>C8HF17O4S</chem>	ヒドロキシル化
S3	399. 9603	-99. 9915	<chem>C7H2F14OS</chem>	脱炭酸+他
S4	369. 9721	-129. 9566	<chem>C8H4F10O3S</chem>	脱フッ素
S5	369. 9921	-129. 9544	<chem>C8H7F9O4S</chem>	脱フッ素+ヒドロキシル化

表2 PFOA 処理水中の分解生成物の元素組成

番号	実測質量 (m/z)	PFOAとの 質量差 (Da)	予想される元素組成	反応
A1	395. 9831	-18. 0003	<chem>C8H2F14O2</chem>	脱フッ素 水素付加
A2	375. 9769	-37. 995	<chem>C8HF13O2</chem>	脱フッ素×2
A3	331. 9707	-81. 997	<chem>C6F12O2</chem>	脱フッ素+脱炭酸+他
A4	331. 9871	-81. 9908	<chem>C7HF13</chem>	脱フッ素+水素付加
A5	363. 9769	-50. 0027	<chem>C7HF13O2</chem>	PFHpA
A6	369. 9699	-44. 0044	<chem>C8HF11O4</chem>	脱フッ素+ヒドロキシル化

まとめ

- 分解では、脱フッ素化、脱炭酸、ヒドロキシル化、などが複合して起きている可能性が示された。
- 炭素鎖長が短い化合物(PFBA,PFBSなど)は検出できなかった。→測定条件の検討が必要
- 組成のみでは不確実な結果も含まれる(存在しえない化合物も表示)ことから解析条件などさらに検討をする必要がある。