



Stratégies analytiques pour les PFAS et le TFA

Eaux, sols, sédiments, matrices alimentaires
UHPLC & IC – QSight 500 LC/MS/MS – PerkinElmer
CECM – Club d'Expertise Chimique de Méditerranée

Nicolas BONGARD – Christian MISSITCH
9 octobre 2026 Golfe-Juan



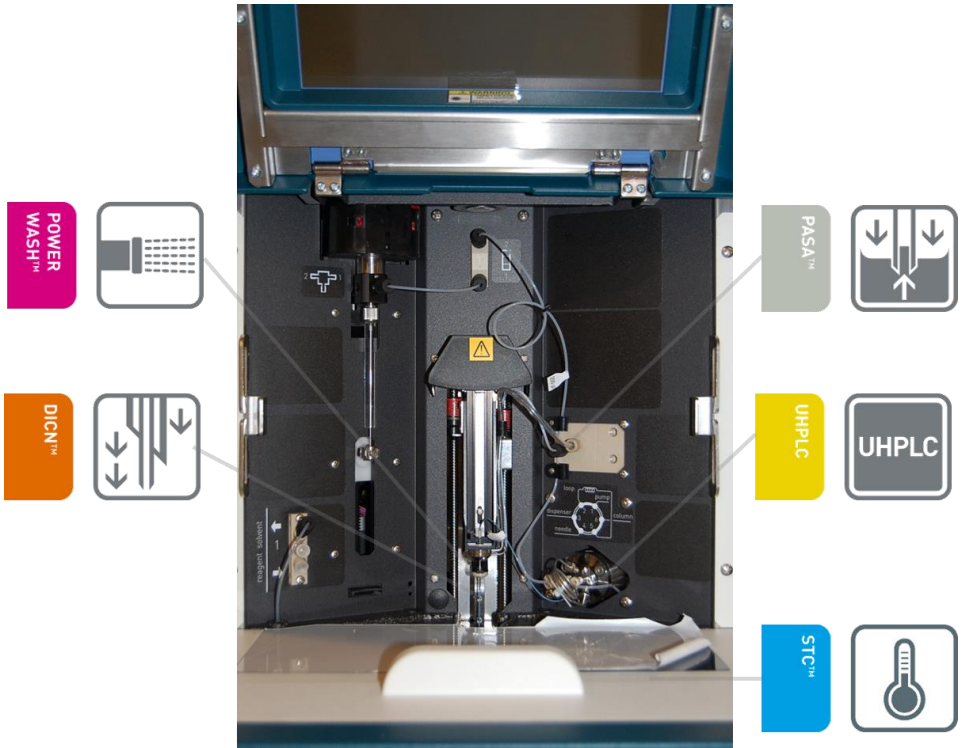
Contexte : points critiques par matrice

Matrice	Réglementation	Point critique	Réponse analytique
Eaux	Σ 20 PFAS $\leq$ 0,1 $\mu\text{g/L}$ (EDCH, 2026)	Blancs système, effets matrice	Injection directe + colonne delay ; SPE si eau chargée
Sols / sédiments	Pas de seuil réglementaire	Matière organique, rendements d'extraction	MeOH ammoniacal + GCB/WAX (EPA 1633)
Aliments	Teneurs max. selon denrée ($\mu\text{g/kg}$) : PFOS 0,3–6 · PFOA 0,2–0,8 PFNA 0,2–1 · PFHxS 0,2–1,5	Acides biliaires (TDCA) interférant sur PFOS	Séparation chromatographique
Cosmétiques	PFAS interdits en France (2026) : 25 $\mu\text{g/kg}$ par PFAS	Matrice grasse ; polymères fluorés	Approche « solides »
TFA	Contrôle EDCH en 2027 ; valeur provisoire 60 $\mu\text{g/L}$, objectif 10 $\mu\text{g/L}$ Évolution 2027 en ng/L	Pas de rétention en C18 ; blancs	IC-MS/MS ou UHPLC-HILIC

Socle commun : dilution isotopique · matériel sans PTFE · colonne delay · blancs à chaque série

UHPLC LX 50

Passeur LX50



Passeur LX50

Pompe LX50

- Débit de 1 µL/min à 4000 µL/min
- 4 solvants (A1, B1, A2, B2) + 6 (en option)
- Pression max 1240 bar



	Temperature Range	5°C - 75°C, with 1°C increments (cooling is ~18°C maximum below ambient)
Column Oven	Temperature Stability	Better than 0.1°C
	Temperature Reproducibility	Better than 0.1°C
	Temperature Change	Up: 10°C/min from 40° to 60°C Down: 2°C/min from 60°C to 40°C
	Column Selection	5 + Flow Injection

Points forts du système QSight



Source EDIT : x 2 à 5 en sensibilité. Une véritable différence en ESI



HSID



Guide d'ions à Flux Laminaire (0 optimisation client)

Points forts du système QSight



Robustesse du système



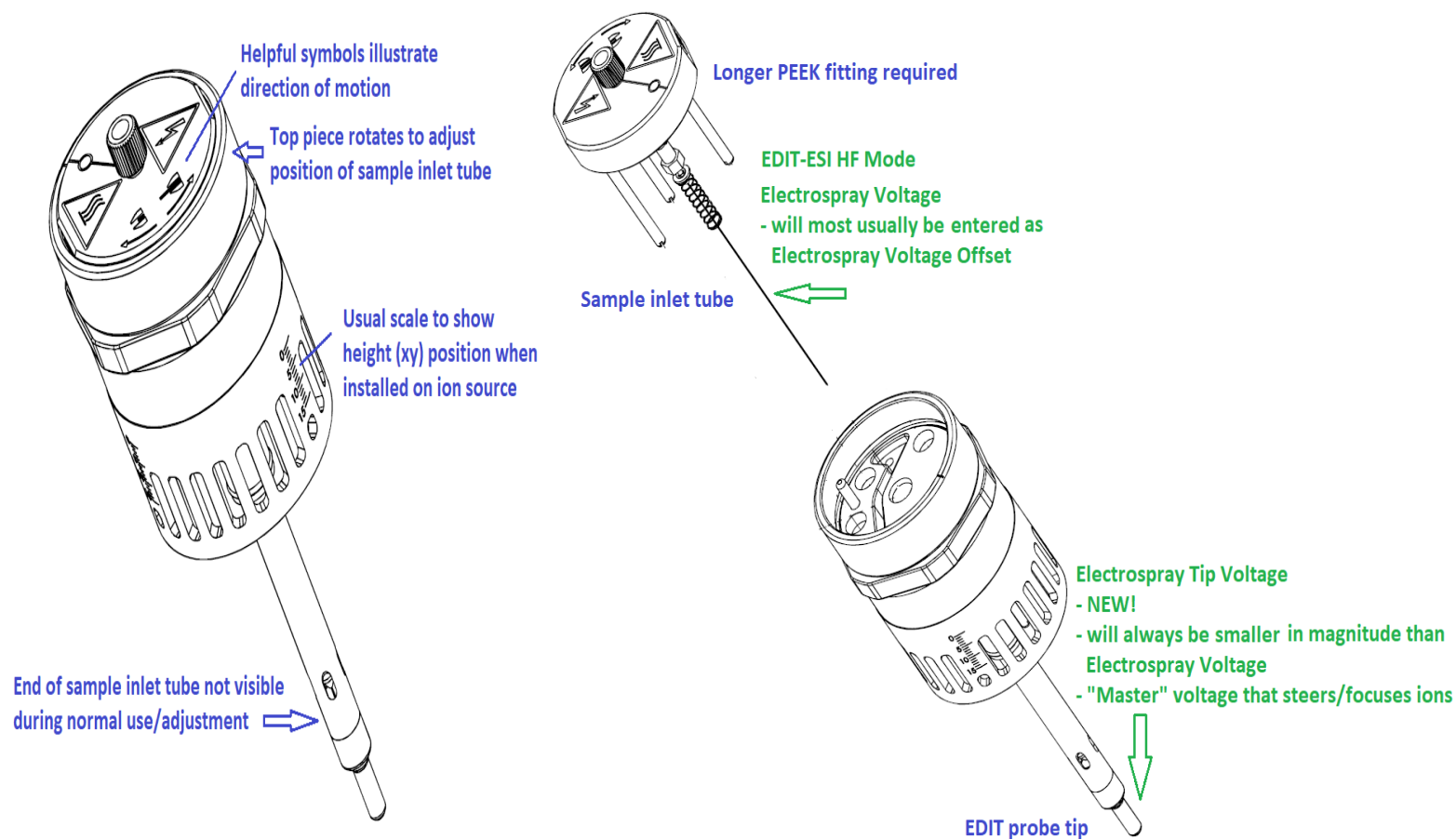
Détecteur UniField (pos/neg en simultané)



Solution simple d'utilisation et suivi efficace des opérations de maintenance.

Sonde EDIT™ – Enhanced Desolvation Ion Transport

Une nouvelle génération d'ionisation électrospray pour diminuer les effets matrice, augmenter la sensibilité et la stabilité de la réponse



Système de double tension

Tension Spray (maîtresse)

- Typiquement : 4000 à 4500 V en mode positif et 3000–3800 V en mode négatif
- Sonde plus courte qu'une électrospray classique

Tension Tip (offset)

- Décalage fixe (0–500 V)
- Focalisation et guidage des ions
- Toujours > spray en valeur absolue

Avantage clé

- ≈1000 V de moins qu'une ESI standard
- Risque d'arc électrique éliminé
- Compatible hauts débits $\geq 250 \mu\text{L}/\text{min}$ et jusqu'à 3 mL/min

Source ESI classique vs Sonde EDIT™ : rapprochement pour gain de sensibilité sans compromis avec le bruit de fond

Source universelle ESI + APCI en une seule sonde

- Couvre l'ensemble des analytes polaires (ESI) et apolaires (APCI)
- Un seul réglage pour les deux modes — aucun changement de sonde nécessaire

Plus proche, plus propre, plus simple

- La focalisation directe du spray sur l'orifice réduit drastiquement les dépôts sur le cône
- Signal stable sur le long terme sans intervention experte
- Réglage intuitif : l'optimisation est accessible à tout opérateur — pas de formation avancée requise, pas de réglage critique à maîtriser

Ionisation à pression atmosphérique : le temps joue pour vous

- À pression atm., les gouttelettes ont le temps de se désolvater complètement avant d'entrer dans le vide
- Grâce au rapprochement EDIT™, les ions formés sont immédiatement guidés vers le cône — **zéro perte par diffusion**



EDIT probe tip is vertically close to Curtain Cap

✓ Sonde EDIT™ — pointe au ras du cône, zéro arc

Double tension • ~1000 V de moins • Focalisation optimisée • Sensibilité accrue

StayClean™ Technology : robustesse sans compromis

- **Principe**

- Surface interne chauffée : prévention de l'accumulation de contaminants
- Flux de gaz chaud en continu pour désolvater efficacement les ions chargés
- Interface orthogonale : guidage et ralentissement des molécules sans contact avec les parois

- **Bénéfices clés**

- Nettoyage et maintenance nuls : gain de débit analytique
- Capacité à analyser des matrices complexes et concentrées sans effet mémoire
- Réduction des coûts : consommables, réactifs et main-d'œuvre

- **Performances analytiques**

- 26 700 injections en continu sur matrices sérum de fœtus bovin, sans perte de sensibilité
- Prix Innovation de l'Année – Labmate Awards 2025



HSID™ : Hot-Surface-Induced Desolvation

- **Fonctionnement**

- Désolvation thermique par surface chauffante : suppression des neutres résiduels et nettoyage en continu
- Flux laminaire guidé qui achemine les ions sans champ électrique axial

- **Avantages analytiques**

- Transmission ionique améliorée : signal plus stable, sensibilité accrue
- Réduction du bruit chimique : meilleur rapport signal/bruit pour les faibles concentrations
- Performances constantes sans dérive ni ré-optimisation fréquente
- Aucune maintenance nécessaire

- **Apports analytiques**

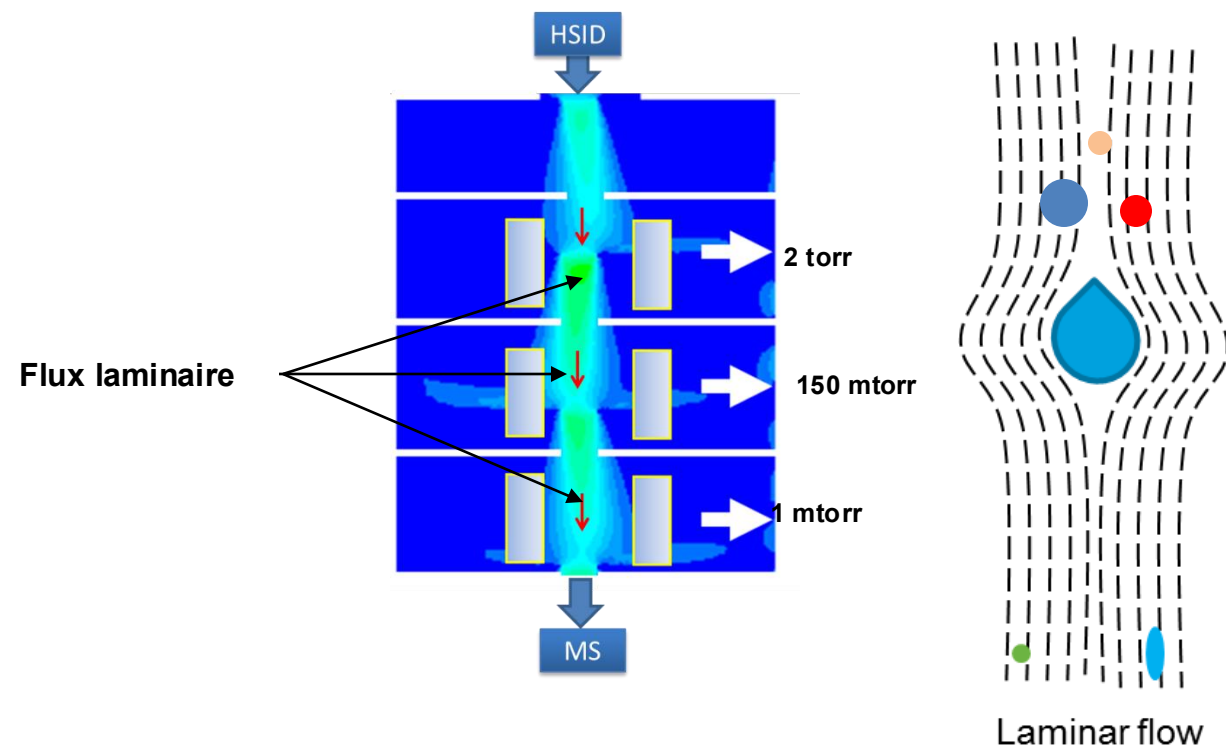
- Analyse de matrices biologiques complexes (sang, urine, salive, cheveux) sans prétraitement intensif
- Fiabilité long terme : idéal pour de longues séries d'analyses sans interruption



- 100 % flux gazeux
- 0 optimisation
- 0 maintenance
- S/N maximal

Le Guide d'Ions à Flux Laminaire™

Transport des ions sans champ électrique – aucune discrimination de masse



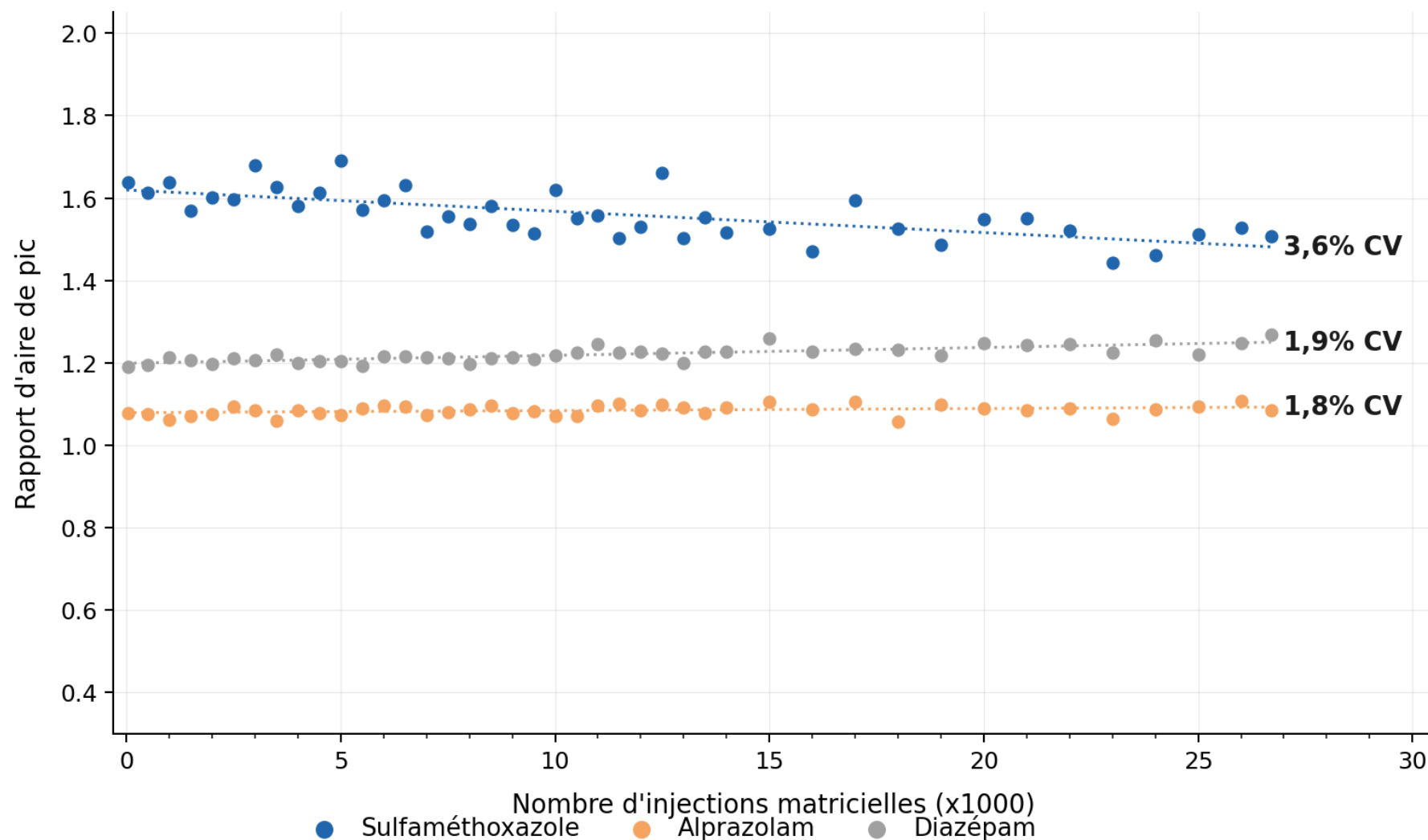
Principe physique

- Transport par flux gazeux (gaz porteur), sans champ électrique axial
- En flux laminaire, les ions de masse faible ou élevée sont transportés **à la même vitesse, à l'image** de débris flottants sur un cours d'eau en crue.
- Gradient de pression décroissant : 2 torr → 150 mtorr → 1 mtorr
- Ions transportés à la même vitesse quelle que soit leur masse. Dans un guide d'ions à flux laminaire, il n'y a aucune discrimination entre hautes et basses masses contrairement aux systèmes employant des champs électriques pour assurer le transport d'ions.

Avantage

- Aucune discrimination entre petites molécules et grosses molécules
- Pas de dérive de signal liée à la masse → quantification fiable sur toute la gamme
- Pas de ré-optimisation nécessaire

QSight 500 — Robustesse : Sérum Foetal Bovin (FBS)



Résumé

- 26 700 injections continues !
- Expérience toujours en cours !
- Précipitation protéique du FBS au méthanol suivie d'une dilution à 50 % dans l'eau avant injection de 5 μ L
- Suivi de 3 analytes et de leurs étalons deutérés (1 ng/mL)
- Robustesse évaluée par contrôle intermittent d'échantillons SST entre des blocs d'injections matricielles FBS

Expérience Sérum Fœtal Bovin : Images de la Source

Photos prises après 26 000 injections – Signal toujours stable



Vue de la fenêtre de la source

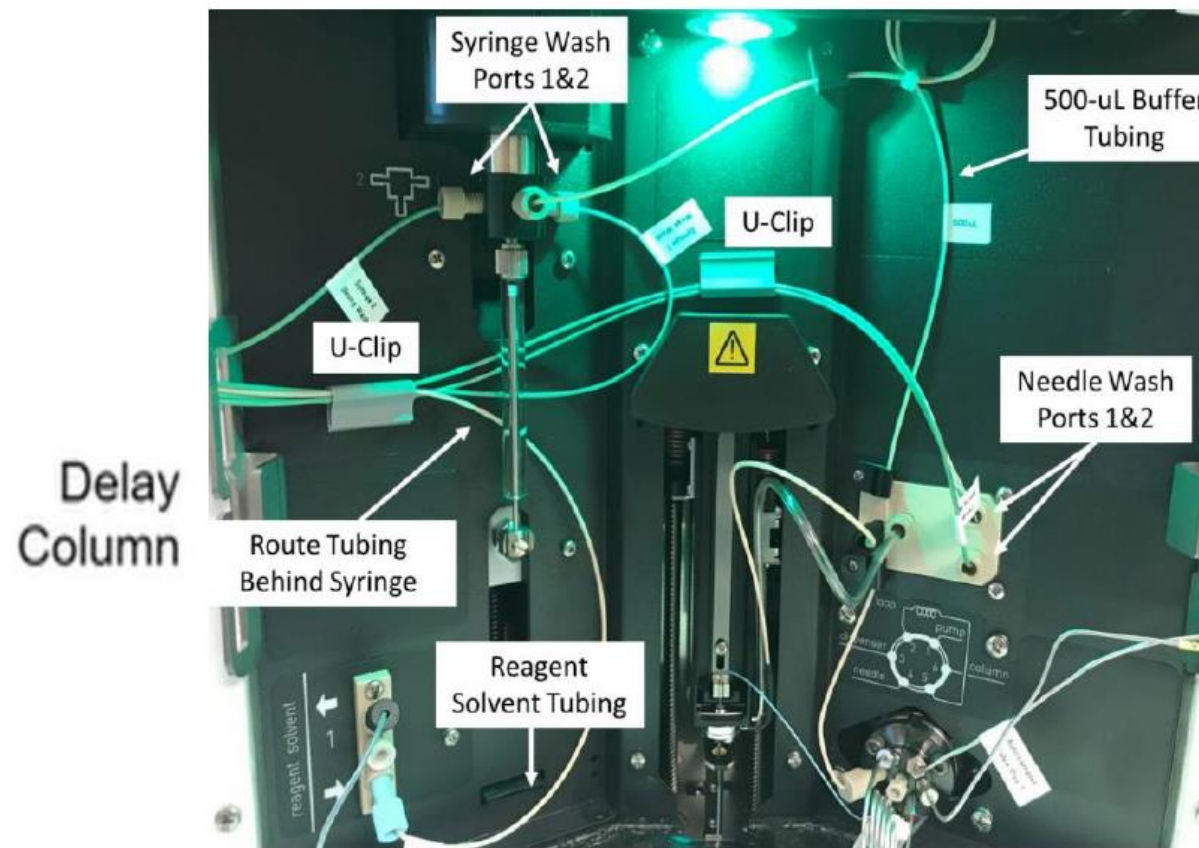
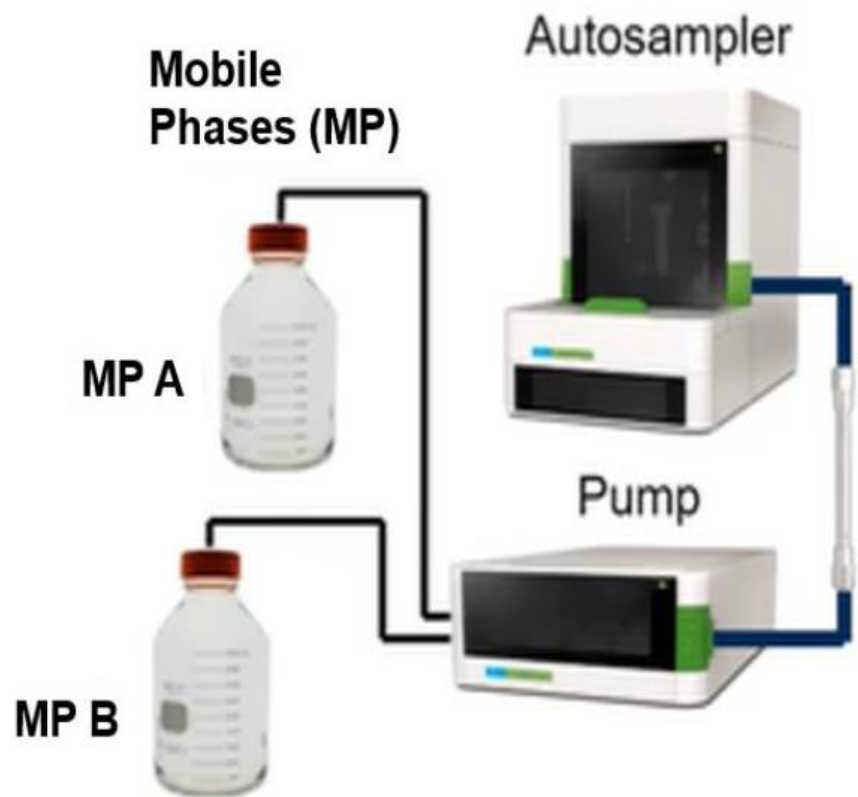


Cône d'échantillonnage

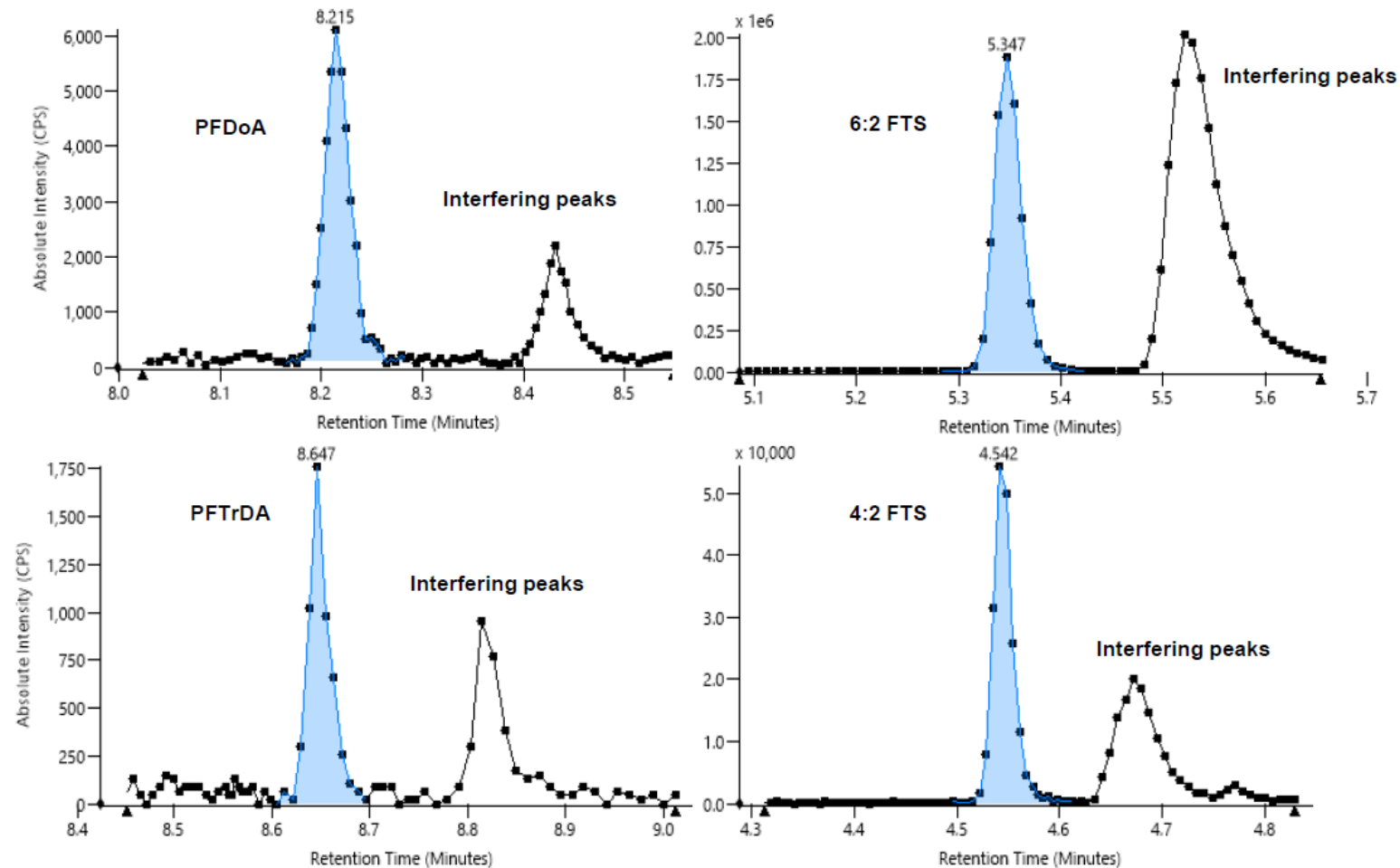


Chambre d'ionisation

Minimiser la contamination : colonne delay



Contamination minimisée : interférents séparés



QSight® 500 UHPLC/MS/MS

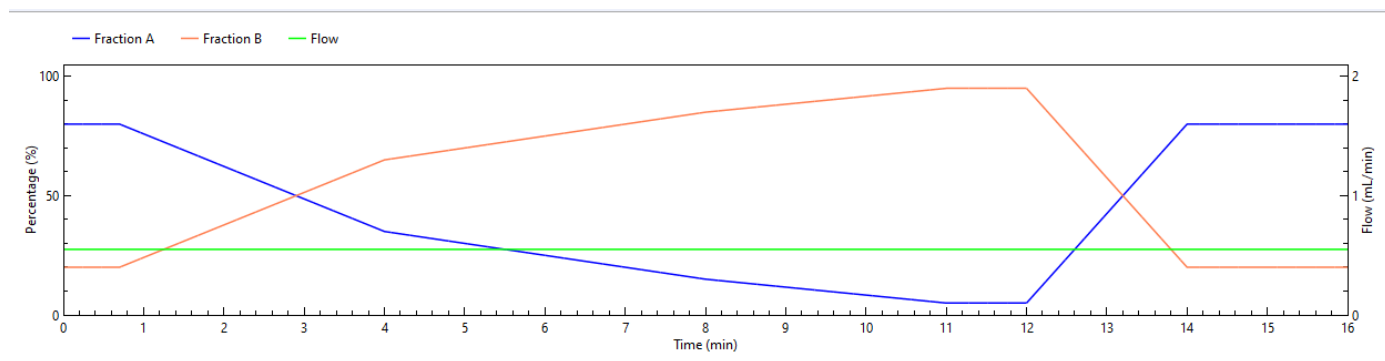
Analyse des PFAS dans l'eau
par injection directe



Paramètres LC

- Mobile phase :
 - A : Eau avec 5 mM Ammonium Acétate
 - B : Méthanol
- Gradient LC

No	Time (min)	Flow (mL/min)	%A	%B	Shape	Type	Value
1	0.00	0.550	80	20		Minimum Pressure	100 psi
2	0.70	0.550	80	20	Linear	Maximum Pressure	18000 psi
3	4.00	0.550	35	65	Linear	Equilibration Time	2.00 min
4	8.00	0.550	15	85	Linear	SoftRamp	☒
5	11.00	0.550	5	95	Linear	Pump	Solvent
6	12.00	0.550	5	95	Linear	Pump A	Solvent 1
7	14.00	0.550	80	20	Linear	Pump B	Solvent 1
8	16.00	0.550	80	20	Linear		



- Injection volume : 100µL d'échantillon
- Column Oven temperature : 40°C
- AutoSampler temperature : 10°C
- Delay Column : Brownlee SPP C18 50x3 mm, 2.7 µm (PN: N9308408)
- Analysis Column : Brownlee SPP C18 100x4.6 mm, 2.7 µm (N9308416)

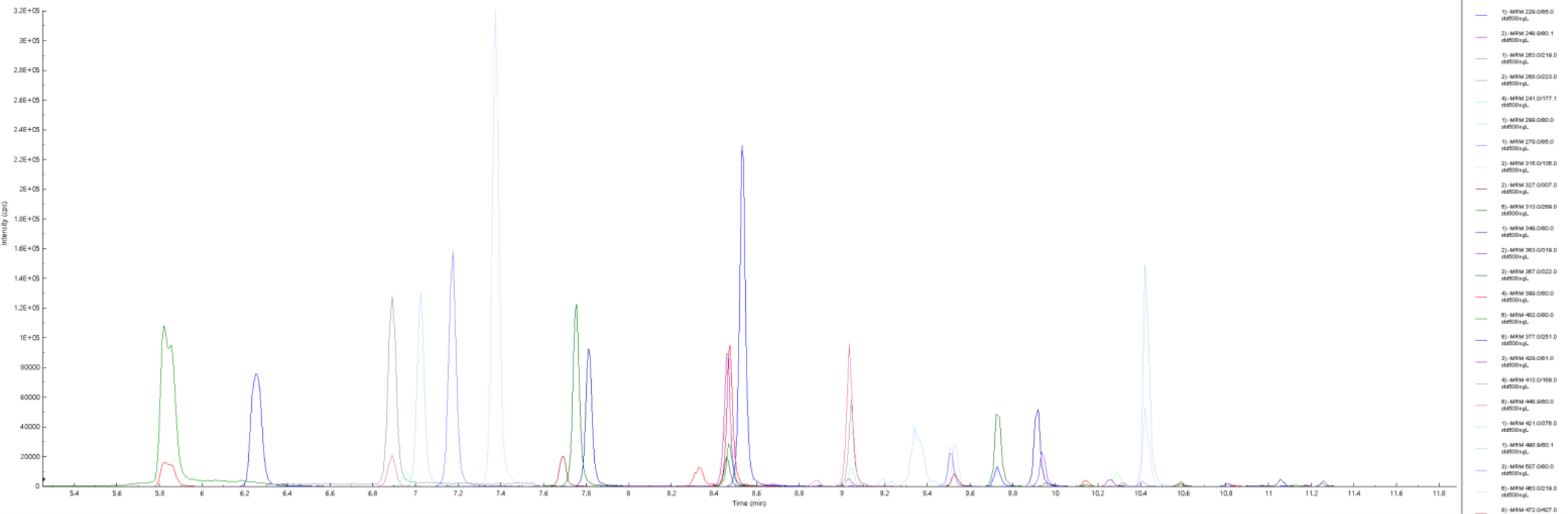
Paramètres de source

- Paramètres de source EDIT (Enhanced Desolvation Ion Transport)

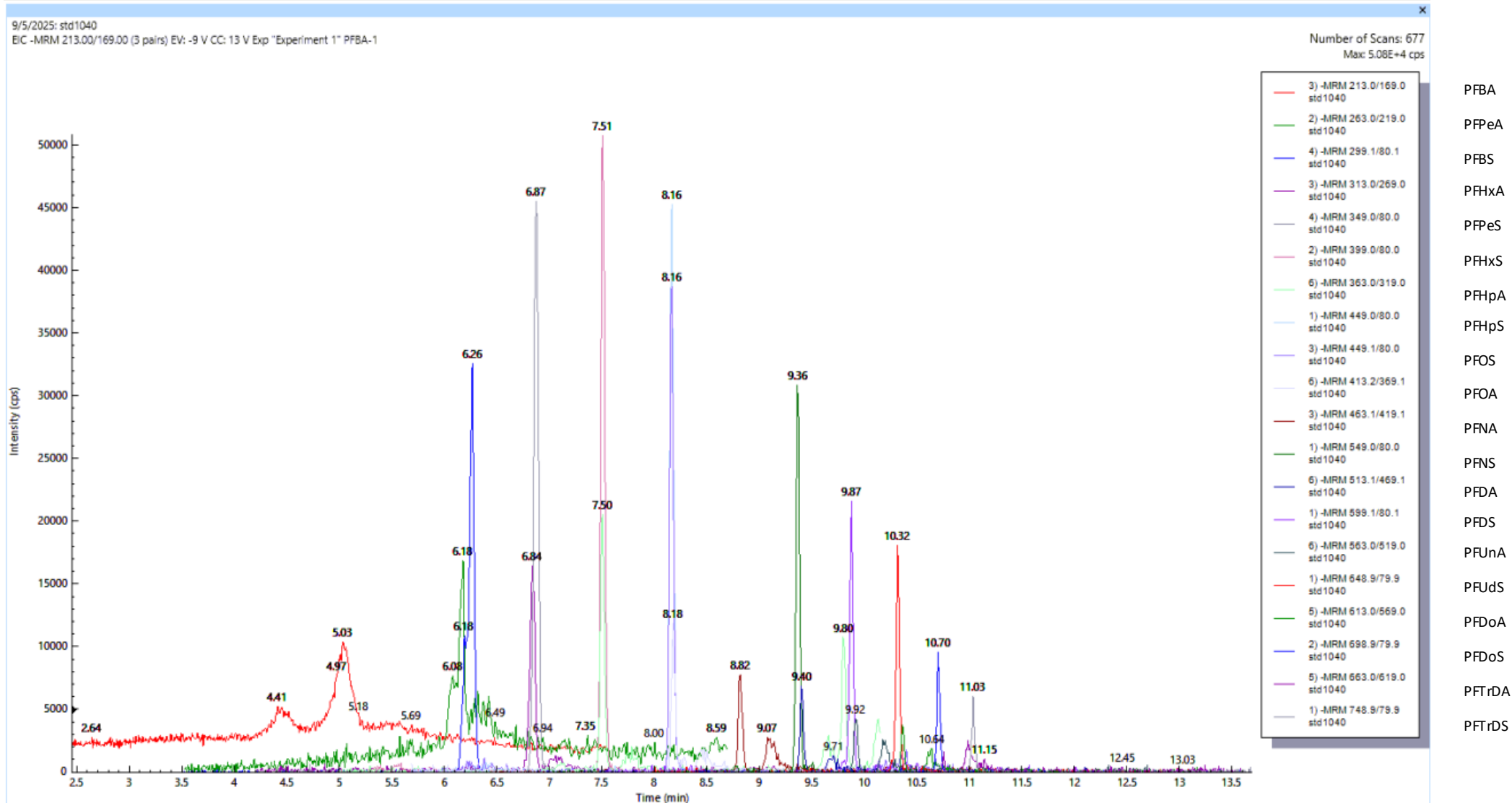
Parameters	Setting Value
Ionization Mode	ESI Negative
Drying Gas Setting	50
HSID Temperature (°C)	275
Nebulizer Gas Setting	300
Electrospray Voltage (V)	-3000
Electrospray offset Voltage (V)	100
Source Temperature (°C)	350

Screening de 53 PFAS et 26 EI en 15 minutes

10/28/2025: std500ngL
EIC -Multiple Reaction Monitoring of 217.00/172.00 (2 pairs) Entrance Voltage: -12 Volts Collision Energy: 10 Volts Experiment "Experiment 5", Component Name: MPFBA-1



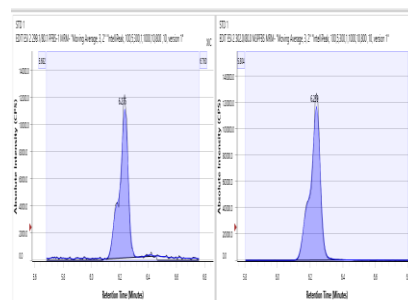
Chromatogramme des 20 PFAS (EU) en injection directe (std 10 ng/L)



Exemple de sensibilité pour une concentration de 1 ng/L

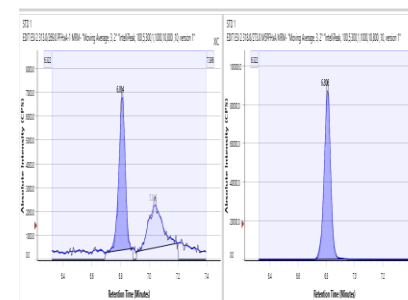
PFBS

S/N 150



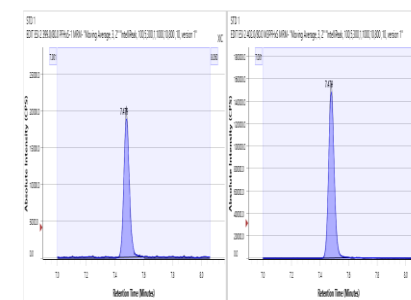
PFHxA

S/N 15



PFHxS

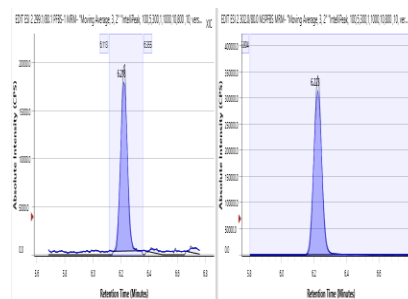
S/N 80



Injection d'une solution standard d'eau

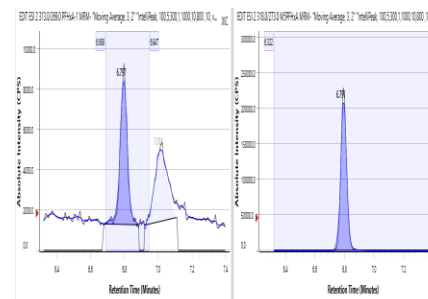
PFBS

S/N 180



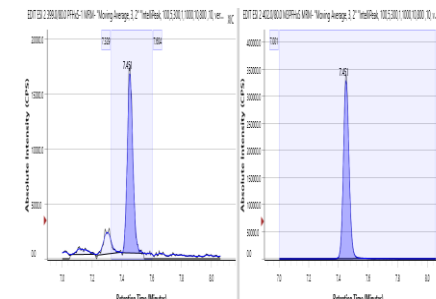
PFHxA

S/N 12



PFHxS

S/N 40



Injection d'une eau douce naturelle dopée

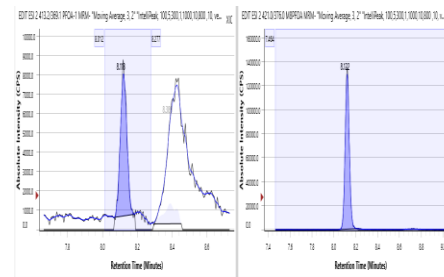


Exemple de sensibilité
pour une concentration de
1 ng/L



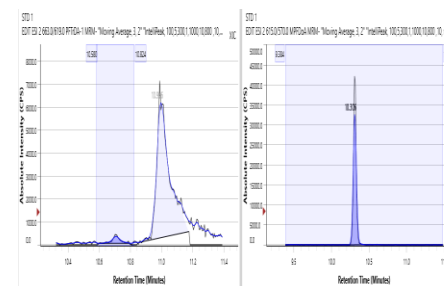
PFOA

S/N 10



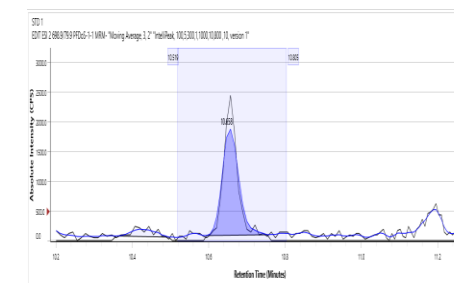
PFTTrDA

S/N 5



PFDoS

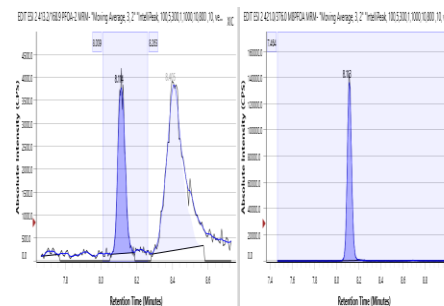
S/N 20



Injection d'une solution standard d'eau

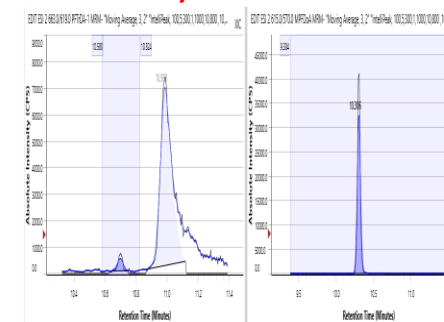
PFOA

S/N 8



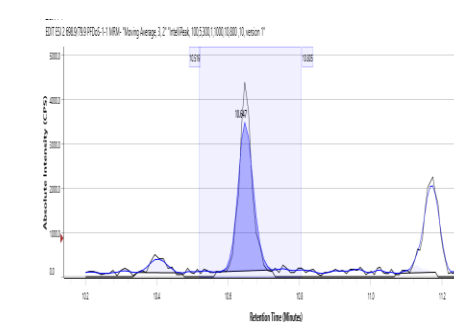
PFTTrDA

S/N 3



PFDoS

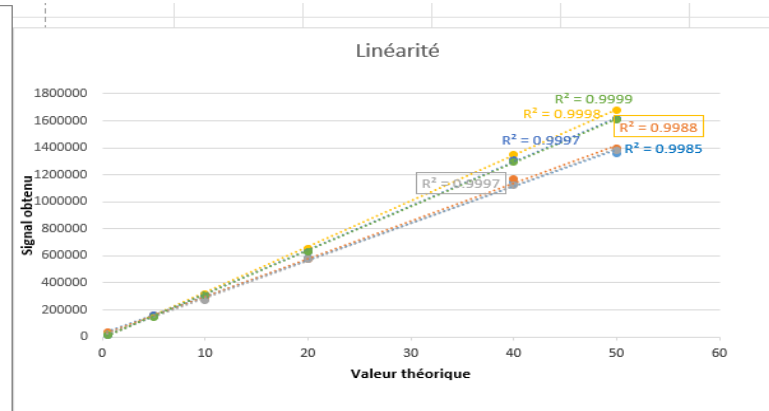
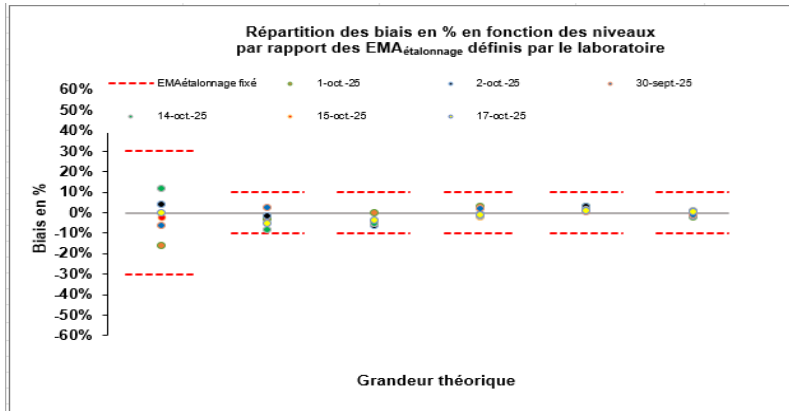
S/N 14



Injection d'une eau douce naturelle dopée

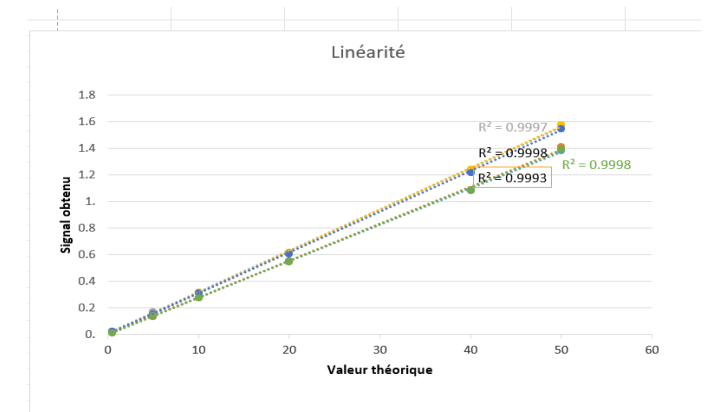
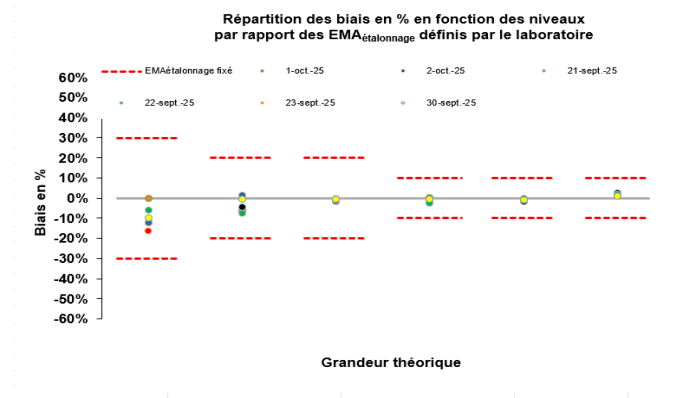
Analyse des PFAS selon la norme NF EN 17892 de juin 2024

Étude de la linéarité



Étalonnage du PFBS de 0,5 à 50 ng/L

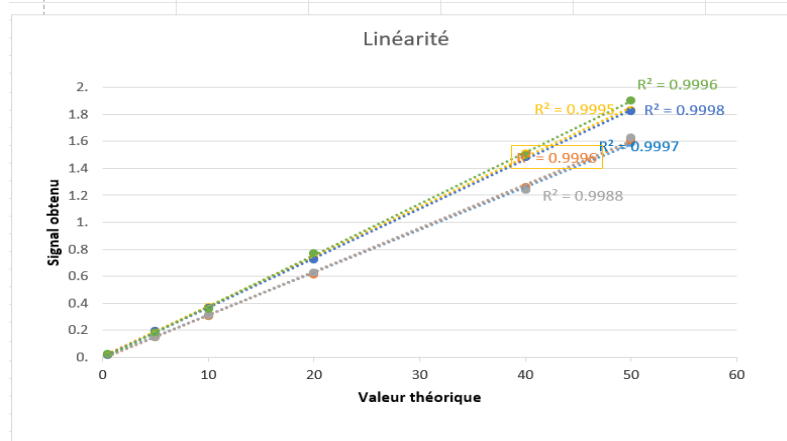
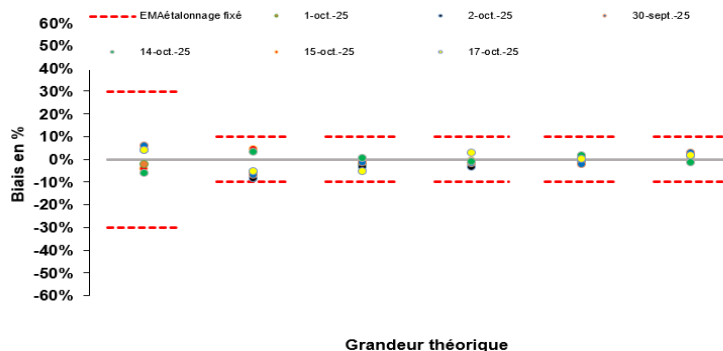
Étalonnage du PFHxA de 0,5 à 50 ng/L



Analyse des PFAS selon la norme NF EN 17892 de juin 2024

Étude de la linéarité

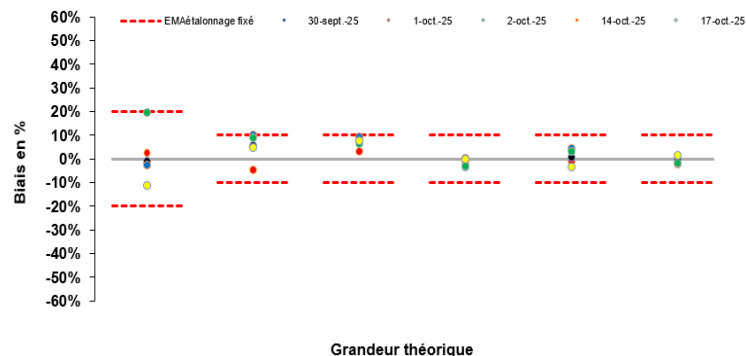
Répartition des biais en % en fonction des niveaux par rapport des EMA_{étalonnage} définis par le laboratoire



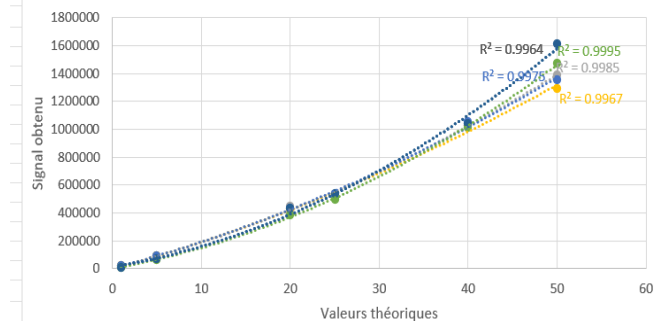
Étalonnage du PFOA de 0,5 à 50 ng/L

Étalonnage du PFDoS de 1 à 50 ng/L

Répartition des biais en % en fonction des niveaux par rapport des EMA_{étalonnage} définis par le laboratoire



Fonction d'étalonnage



QSight® 500 UHPLC/MS/MS

Approche multimatrice
selon l'EPA 1633 (SPE)



Cas #1 : eaux de surface – SPE selon l'EPA 1633



QSight 500 + automate SPE Promochrom SPE-03



Préparation des échantillons

- **Promochrom SPE-03** : 8 échantillons aqueux en simultané
- Kit PFAS-free (circuit sans PTFE)
- **SPE GCB/WAX** 6 mL, 200 mg / 50 mg
- Rinçage MeOH / 1 % NH₄OH
- ≈ 1 h pour 8 échantillons

Cas #1 : linéarité et limite de quantification sur les eaux

- Exemple de courbe d'étalonnage de concentration 1 à 500 000 ng/L à partir de trois répétitions à chaque niveau.

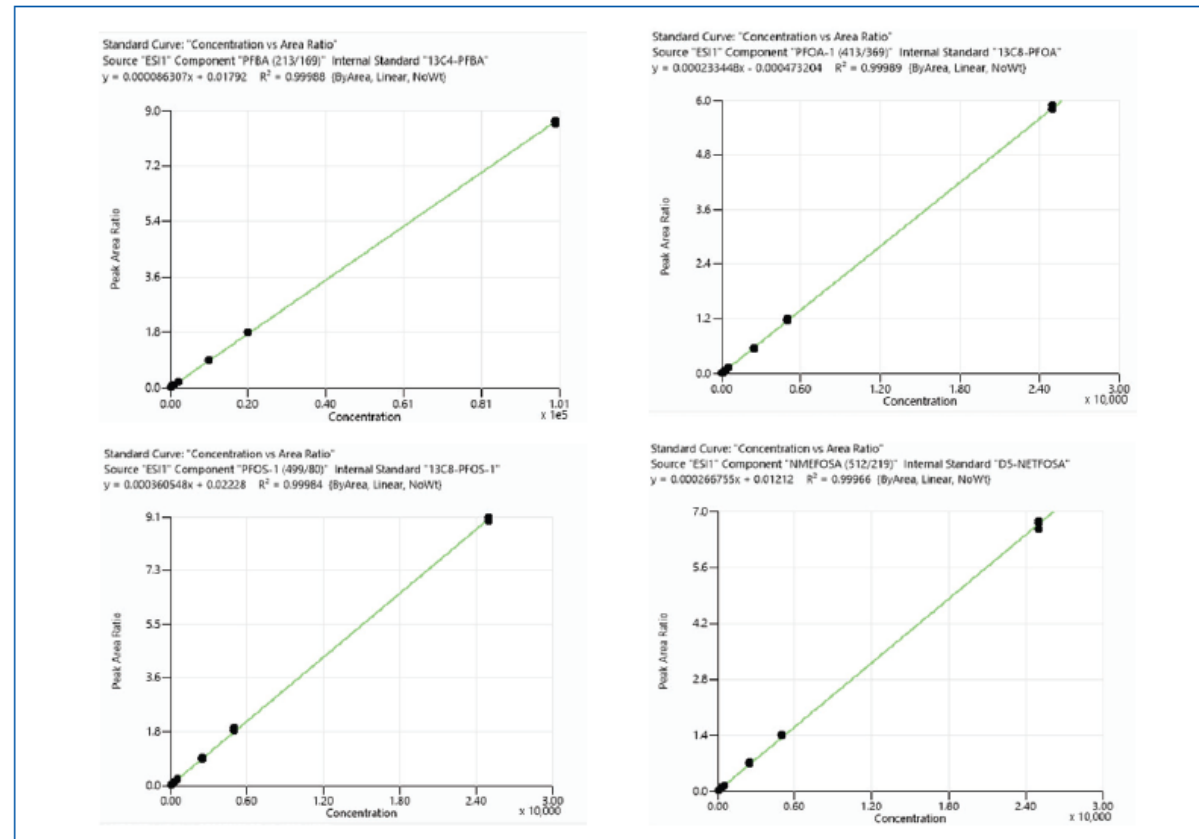
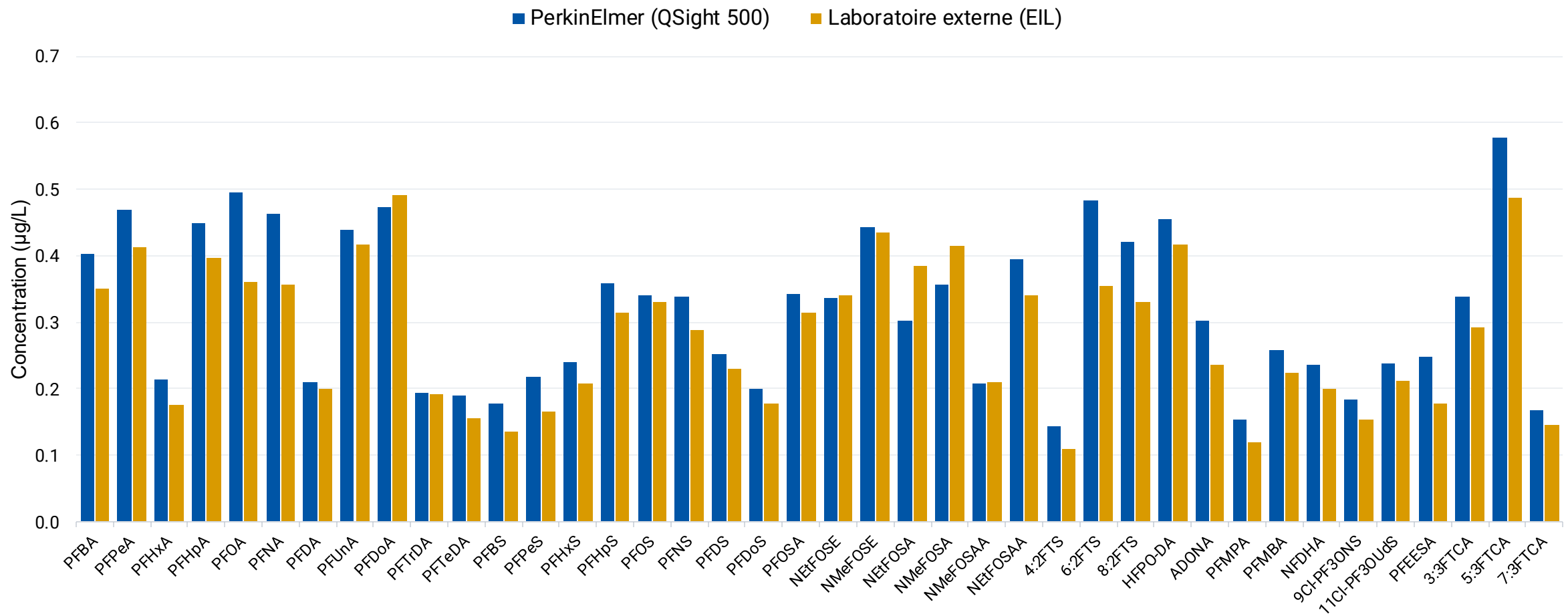


Figure 4. Triplicate injection calibration curves for representative analytes PFBA, PFOA, PFOS, NMeFOSA.

Cas #1 : comparaison interlabo – eaux résiduaires



40 PFAS de l'EPA 1633 : concentrations mesurées sur le même échantillon d'eau résiduaire, résultats concordants pour l'ensemble des composés

SPE vs dilute & shoot : échantillon complexe

- La SPE est-elle valide pour tous les types d'échantillons ?

Résultats d'une eau traitée issue d'une usine de retraitement des déchets :

ECH 1211	Concentration en ng/L		Différence (%)
Composé	SPE	Dilute&Shoot	
PFBA	520	922	177
PFPeA	440	343	78
PFHxA	1100	1293	118
PFHpA	140	107	76
PFBS	790	2165	274
PFPeS	50	48	96
PFHxS	64	74	116
6:2 FTS	1500	15861	1057

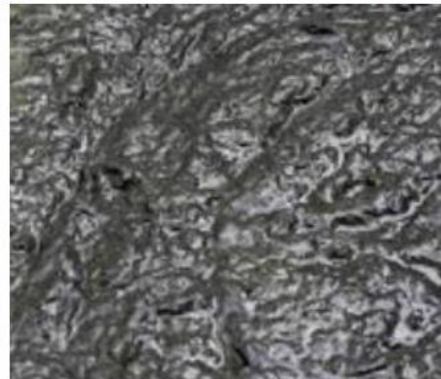
SPE vs dilute & shoot : lixiviat très chargé

- Résultats d'un lixiviat issu d'une usine de retraitement des déchets, avec très forte charge minérale : 2,8 % de Na⁺, 1,3 % de K⁺ et 5 % de Cl⁻, COT élevé

LIX 35	Concentration (ng/L)		CV Aire(%) n=8
Composé	SPE	Dilute&Shoot	
PFBS	<i>nd</i>	275	6.0
PFHxA	<i>nd</i>	234	8.0
PFPeS	<i>nd</i>	25	11.4
6:2 FTS	<i>nd</i>	2654	1.8

Cas #2 : sols, sédiments, boues, biosolides

Beach sand (S1) Sediment (S2, S7) Mimico Sludge (S3) Garden soil (S4) Black garden soil (S5)



Human feces (S6) Biosolid 1 (S8) Biosolid 2 (S9) Chinese Chive (S10) Cooked Pork blood (S11)



Cas #2 : poissons et tissus animaux



Chicken Breast (S1)



Salmon (S2)



Basa Filets (S3)



Shrimp (S4)



Beef (S5)



Pork (S6)

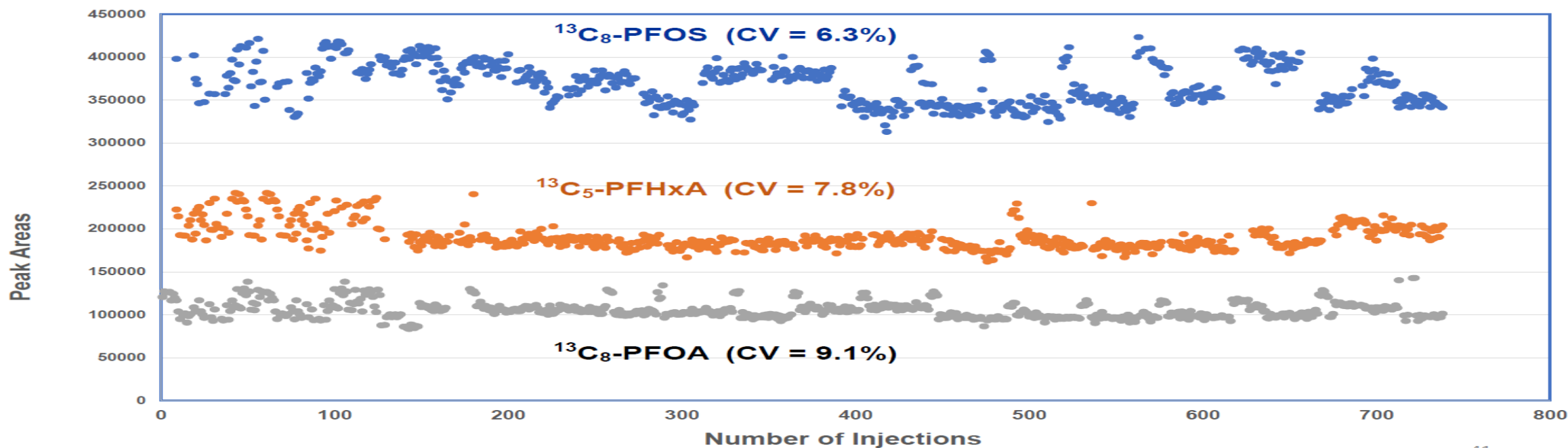
Cas #2 : justesse – essai d'aptitude sol (EPA 1633)

PerkinElmer Scientific Canada				Account # 8565				Lab ID		NPDES ID #	
Jingcun Wu Scientist (201)741-8679								Study # QTA		Open Date	
501 Rowntree Dairy Road Unit 6								Study Type External PT		Close Date	
Woodbridge ON L4L										04/15/2024	
NELAC #	Component	Method Code	Method Description	</>	Reported Value	AV or Study Mean	Assigned Value	Acceptance Limits Low	Acceptance Limits High	Performance	Analysis Date
Part# 38722	Lot# 071823	PFC PT-Soil-EPA 1633		40 components		Invoice# 23437		Units mg/Kg			
6915	PFBA (cas# 375-22-4)	9648	EPA 1633		37.2	37.1	37.1	22.3	50.9	ACCEPT.	05/22/2024
6914	PFPeA (cas# 2706-90-3)	9648	EPA 1633		41.4	42.8	42.8	25.7	59.9	ACCEPT.	05/22/2024
6913	PFHxA (cas# 307-24-4)	9648	EPA 1633		45.5	41.6	41.6	25	58.2	ACCEPT.	05/22/2024
6908	PFHpA (cas# 375-85-9)	9648	EPA 1633		28.4	30.0	30	18	42	ACCEPT.	05/22/2024
6912	PFOA (cas# 335-67-1)	9648	EPA 1633		27.2	20.5	20.5	12.3	28.7	ACCEPT.	05/22/2024
6906	PFNA (cas# 375-95-1)	9648	EPA 1633		56.1	42.6	42.6	25.6	59.6	ACCEPT.	05/22/2024
6905	PFDA (cas# 335-76-2)	9648	EPA 1633		38.3	37	37	22.2	51.8	ACCEPT.	05/22/2024
6904	PFUnDA (cas# 2058-94-8)	9648	EPA 1633		40.8	44	44.6	26.8	62.4	ACCEPT.	05/22/2024
6903	PFDoA (cas# 307-55-1)	9648	EPA 1633		14.6	13.8	13.8	8.28	19.3	ACCEPT.	05/22/2024
9563	PFTTrDA (cas# 72629-94-8)	9648	EPA 1633		25.5	27.6	27.6	16.6	38.6	ACCEPT.	05/22/2024
6902	PFTeDA (cas# 376-06-7)	9648	EPA 1633		23.7	20.8	20.8	12.5	29.1	ACCEPT.	05/22/2024
6918	PFBS (cas# 375-73-5)	9648	EPA 1633		32.0	28.1	28.1	16.9	39.3	ACCEPT.	05/22/2024
6934	PFPeS (cas# 2706-91-4)	9648	EPA 1633		41.4	37.6	37.6	22.6	52.6	ACCEPT.	05/22/2024
6927	PFHxS (cas# 355-46-4)	9648	EPA 1633		36.7	35.5	35.5	21.3	49.7	ACCEPT.	05/22/2024
9470	PFHpS (cas# 375-92-8)	9648	EPA 1633		20.8	18.1	18.1	10.9	25.3	ACCEPT.	05/22/2024
6931	PFOS (cas# 1763-23-1)	9648	EPA 1633		14.0	14.8	14.8	8.88	20.7	ACCEPT.	05/22/2024
6929	PFNS (cas# 68259-12-1)	9648	EPA 1633		24.6	24.6	24.6	14.8	34.4	ACCEPT.	05/22/2024
6920	PFDS (cas# 335-77-3)	9648	EPA 1633		24.9	29.4	29.4	17.6	41.2	ACCEPT.	05/22/2024
6923	PFDoS (cas# 79780-39-5)	9648	EPA 1633		25.6	24.2	24.2	14.5	33.9	ACCEPT.	05/22/2024
6917	PFOSAm (cas# 754-91-6)	9648	EPA 1633		27.6	26.5	26.5	15.9	37.1	ACCEPT.	05/22/2024
9431	EtFOSE (cas# 1691-99-2)	9648	EPA 1633		22.8	23.0	23	13.8	32.2	ACCEPT.	05/22/2024
6949	MeFOSE (cas# 24448-09-7)	9648	EPA 1633		13.0	18.0	18	10.8	25.2	ACCEPT.	05/22/2024
9395	EtFOSAm (cas# 4151-50-2)	9648	EPA 1633		9.47	15.0	15	9	21	ACCEPT.	05/22/2024
9433	MeFOSA (cas# 31506-32-8)	9648	EPA 1633		12.9	18.5	18.5	11.1	25.9	ACCEPT.	05/22/2024
4847	NMeFOSAA (cas# 2355-31-9)	9648	EPA 1633		28.6	26.5	26.5	15.9	37.1	ACCEPT.	05/22/2024
4846	NEtFOSAA (cas# 2991-50-6)	9648	EPA 1633		19.5	19.5	19.5	11.7	27.3	ACCEPT.	05/22/2024
6946	4:2FTS (cas# 757124-72-4)	9648	EPA 1633		23.7	20.6	20.6	12.4	28.8	ACCEPT.	05/22/2024
6947	6:2FTS (cas# 27619-97-2)	9648	EPA 1633		22.9	20.4	20.4	12.2	28.6	ACCEPT.	05/22/2024
6948	8:2FTS (cas# 39108-34-4)	9648	EPA 1633		13.3	11.5	11.5	6.9	16.1	ACCEPT.	05/22/2024
9460	HFPO-DA (cas# 13252-13-6)	9648	EPA 1633		13.3	14.5	14.5	8.7	30.3	ACCEPT.	05/22/2024

25

Cas #2 : 750 injections d'extrait de saumon dopé

- Répétabilité des EIS sur 750 injections :
 - $^{13}\text{C}_8$ - PFOS = 6.3%
 - $^{13}\text{C}_5$ - PFHxA = 7.8%
 - $^{13}\text{C}_8$ - PFOA = 9.1%



Analyse des composés
polaires : TFA

QSight® 500 IC/MS/MS



TFA : le plus petit des PFAS, le plus présent

92 %

des échantillons d'eau contiennent du TFA

1,15 µg/L

concentration moyenne mesurée

25 µg/L

maximum relevé (Gard)

Campagne ANSES 2023–2025 : 1 274 échantillons d'eaux brutes et distribuées, 35 PFAS recherchés

Un cadre réglementaire qui se durcit

- Contrôle sanitaire du TFA dans l'eau potable en France au 01/01/2027 (décret 2025-1287)
- **France** : valeur sanitaire provisoire 60 µg/L, objectif 10 µg/L (DGS) – Pays-Bas : 2,2 µg/L
- **EFSA (juillet 2026)** : DJA abaissée à 0,014 mg/kg pc/j (au lieu de 0,05) ; ARfD 0,07 mg/kg pc
- **ECHA – RAC (juin 2026)** : avis en faveur d'un classement toxique pour la reproduction 1B

Les défis analytiques

- CF_3COOH : acide fort ($\text{pK}_a \approx 0,3$), très polaire → pas de rétention en phase inverse C18
- Fragmentation pauvre ($113 \rightarrow 69 \text{ CF}_3^-$; $113 \rightarrow 19 \text{ F}^-$) : confirmation délicate
- Contaminant ubiquitaire du laboratoire (solvants, réactifs, circuits LC) → maîtrise des blancs
- **Réponses** : IC-MS/MS (suppression KOH) ou UHPLC-HILIC (Raptor Polar X), injection directe

Analyse des composés polaires dans les eaux - TFA

Paramètres IC

Colonne **SH-AC-11** (4.6x250 mm)

Étape	Temps (min)	Débit	Conc KOH
1	Initial	1 mL/min	40 mM
2	7	1 mL/min	40 mM
Température colonne	30°C		
Suppresseur	2 mm		
Injection volume	50 µL		
Courant de supprimeur	65 mA		

Paramètres MS

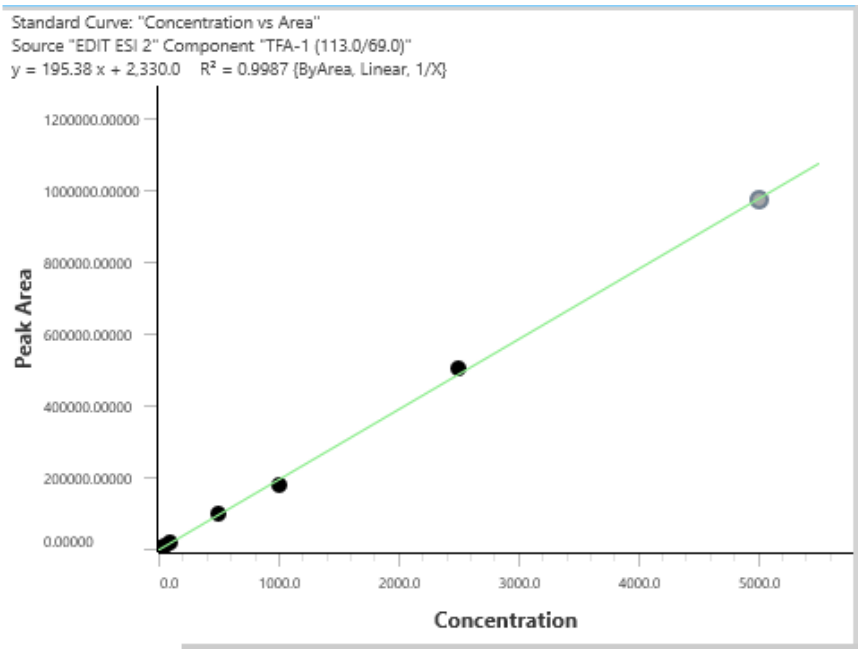
QSight® 500

Paramètres	Valeurs
Drying Gas	50
Température HSID	250°C
Nébuliseur Gas	250
Type de source	EDIT®
Température de source	400°C
Tension Electrospray	-3000 V
Tension Offset Tip	100 V

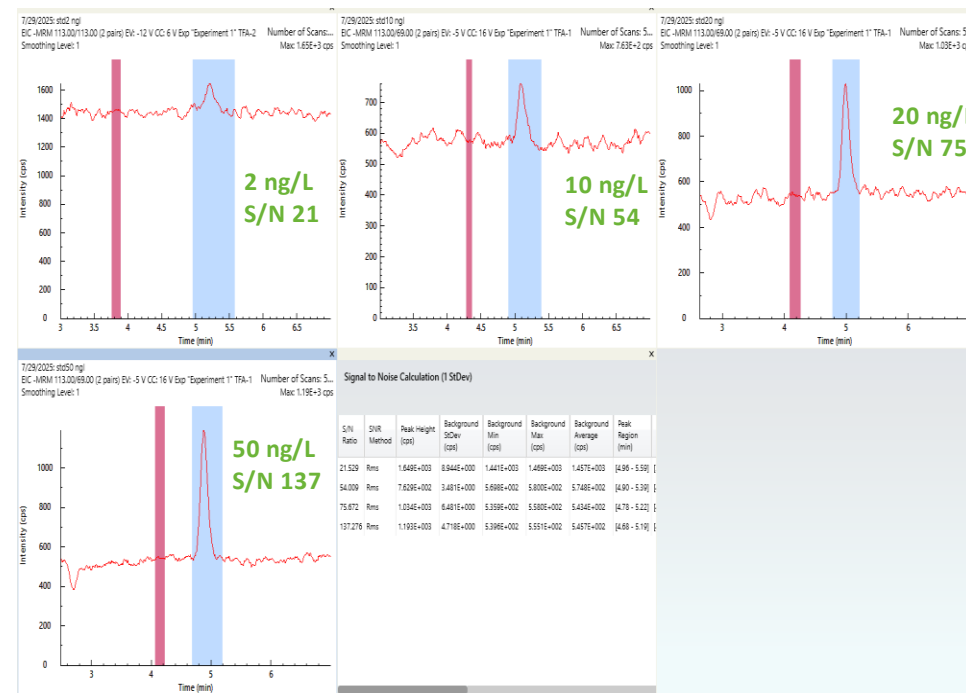
Table MRM

Polarité	Composé	Q1	Q2	Tr (min)	M1RF	CE	EV	CCL2	Dwell Time (ms)
Négative	TFA-1	113.00	113.00	4.478	497.7	6	-12	32	350
Négative	TFA-2	113.00	69.00	4.478	497.7	16	-5	28	350





Courbe d'étalonnage de 2 à 5000 ng/L



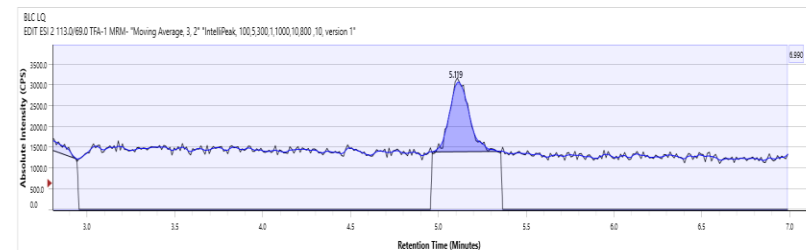
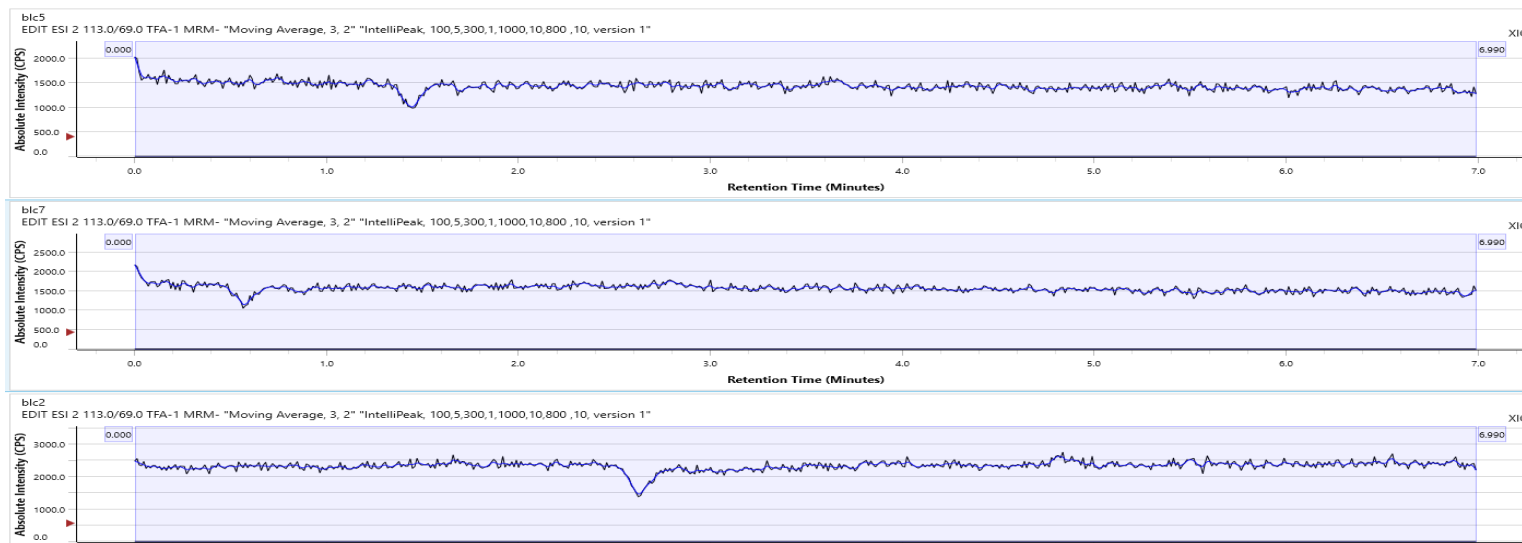
Chromatogrammes du TFA à des concentrations de 2 ng/L, 10 ng/L, 20 ng/L et 50 ng/L

Échantillon	Conc. (ng/L)	% RSD (n=10)
EU	1.18	11.85
Eau sup	252.98	2.02
Eau sup	177.30	5.49

Résultats d'échantillons d'eau et répétabilités respectives sur 10 injections (CV %).



TFA et les blancs



QSight® 500 UHPLC/MS/MS

Analyse du TFA en UHPLC
mode HILIC – Raptor Polar X



TFA en UHPLC-HILIC : paramètres LC

Paramètre	Valeur
Colonne	Restek Raptor Polar X, 50 × 2,1 mm (réf. 9311A52)
Phase mobile A	Eau + 10 mM formiate d'ammonium
Phase mobile B	Acétonitrile + 10 mM formiate d'ammonium
Élution	Isocratique 10 % A / 90 % B
Débit	0,400 mL/min
Durée d'analyse	5,7 min
Température colonne	40 °C
Température passeur	10 °C
Injection	Full LoopFill – boucle 200 µL
Lavage aiguille	Fort puis faible (2 × 1 000 µL), lavage avancé à 1,4 min



Méthode « LC Meth TFA Hilic 10 90 isocratique » – pompe et passeur QSight LX-50

TFA en UHPLC-HILIC : paramètres MS (source EDIT)

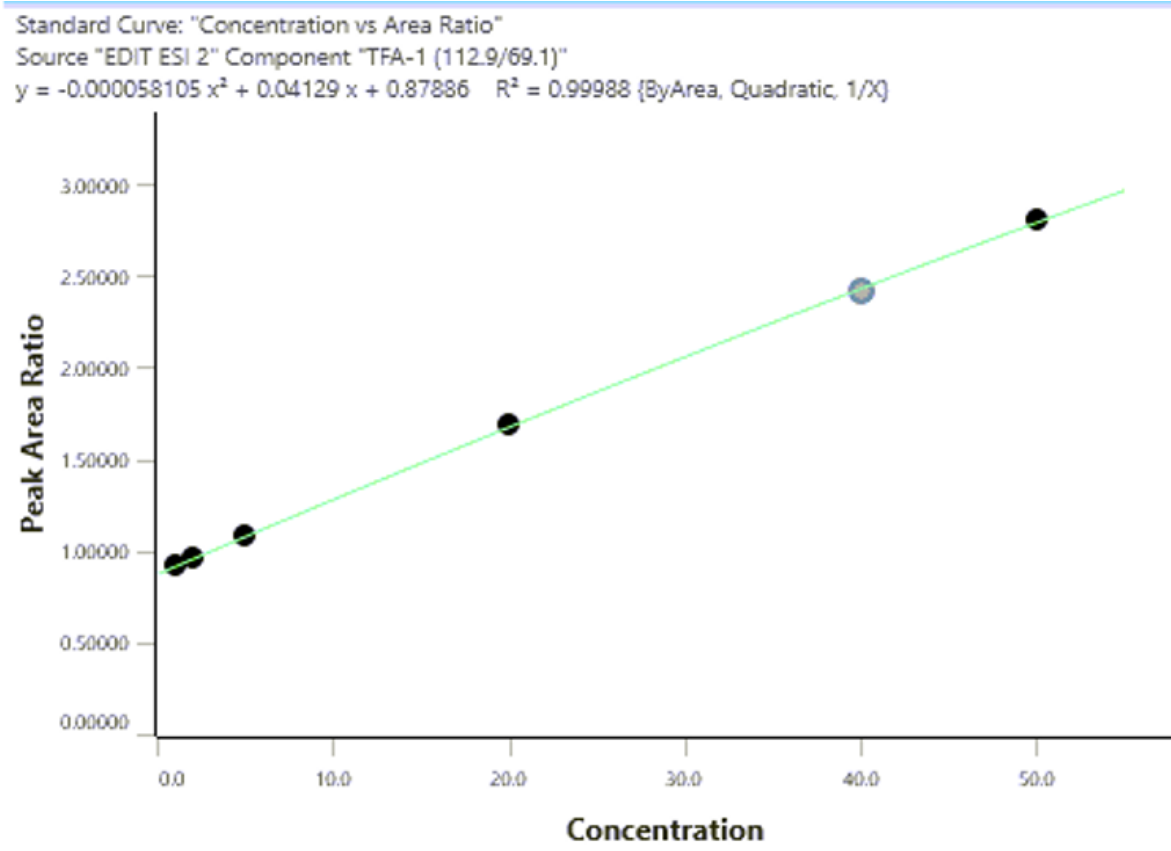
Paramètre source EDIT	Valeur
Mode d'ionisation	ESI négatif
Drying Gas	60
Température HSID	250 °C
Nébuliseur (sonde 2)	150
Tension Electrospray	-3 200 V
Tension Tip	-3 000 V
Offset	200 V
Température de source	650 °C

Table MRM – mode négatif, résolution Low/Low

Composé	Q1	Q2	Tr (min)	Fenêtre (min)	CE	EV	CCL2	Dwell (ms)	Rôle
TFA-1	112,9	69,1	4,52	3	16	-3	24	263,7	Quantification (CF ₃ ⁻)
TFA-2	112,9	19,1	4,52	3	50	-3	28	263,7	Confirmation (F ⁻)
M2-TFA	114,9	70,0	4,52	3	15	-1	24	263,7	Étalon interne ¹³ C ₂ -TFA

- Deuxième transition 113 → 19 (F⁻) : confirmation possible malgré une fragmentation pauvre
- Étalon interne ¹³C₂-TFA : correction des effets matrice et de la dérive

TFA en UHPLC-HILIC : étalonnage

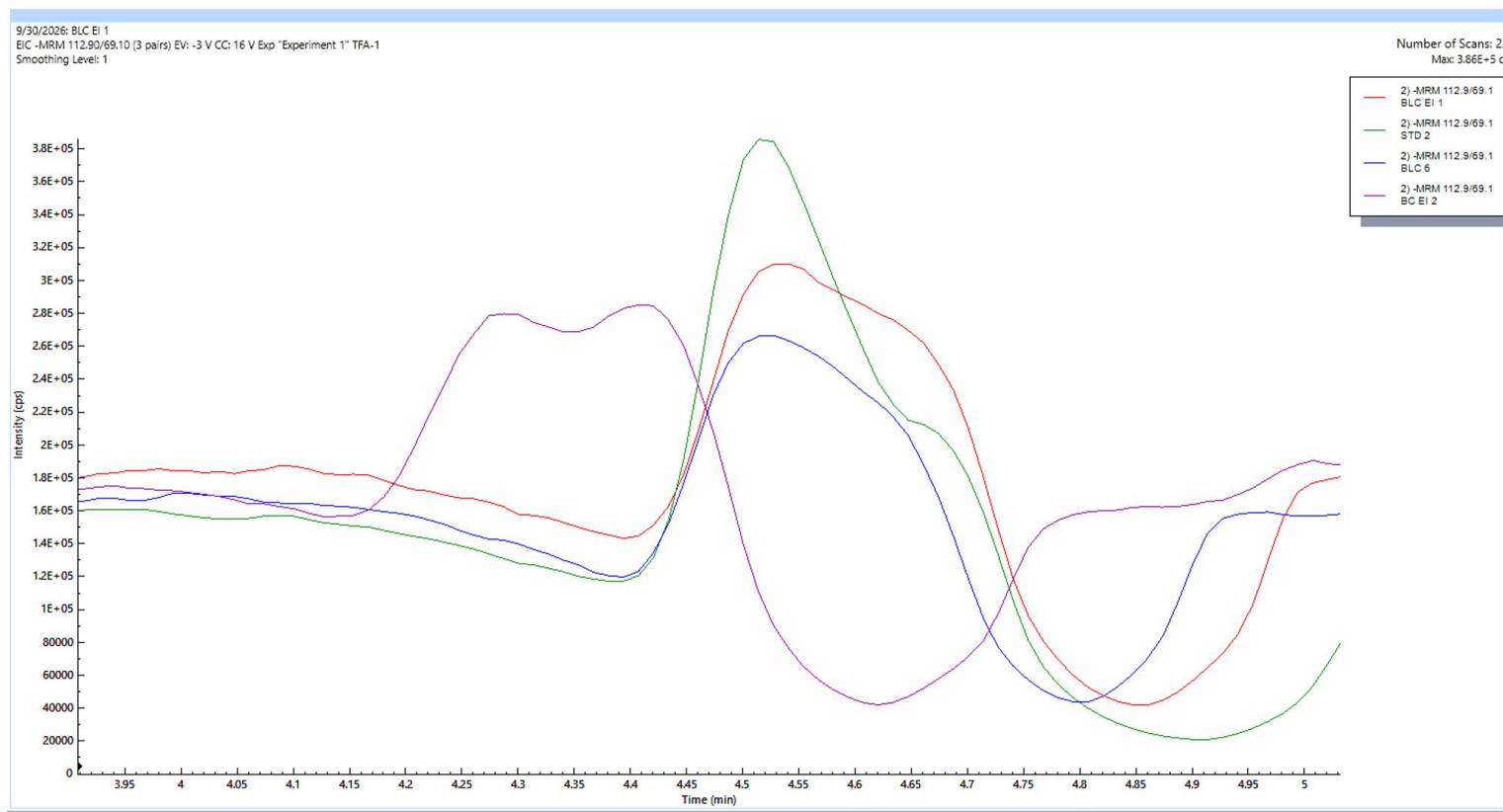


Étalon	Attendue (ng/L)	Calculée (ng/L)	Exactitude
STD 1	1	0,99	99,4 %
STD 2	2	2,03	101,3 %
STD 5	5	4,94	98,9 %
STD 20	20	20,22	101,1 %
STD 40	40	39,48	98,7 %
STD 50	50	50,34	100,7 %

- **Exactitude 98,7 – 101,3 %** sur toute la gamme de 1 à 50 ng/L

TFA-1 (112,9 → 69,1) – ratio d'aire / $^{13}\text{C}_2$ -TFA, 1 à 50 ng/L, quadratique 1/x : $R^2 = 0,99988$

TFA en UHPLC-HILIC : maîtrise des blancs



TFA-1 (112,9 → 69,1) – **BLC EI 1** blanc de début de séquence · **STD 2** standard 2 ng/L · **BLC 6** blanc de fin de séquence

Le point critique n'est pas la sensibilité du QSight 500, mais le maintien de blancs bas et stables

- Signal TFA présent dans les blancs, du même ordre de grandeur que le standard à 2 ng/L
- Blanc de fin de séquence au niveau du blanc de début : pas d'accumulation au fil de la séquence
- La limite de quantification est fixée par le niveau des blancs

TFA : IC-MS/MS ou UHPLC-HILIC ? Conclusion

	IC-MS/MS	UHPLC-HILIC-MS/MS
Système	Chromatographie ionique + suppresseur + QSight 500	UHPLC LX-50 + QSight 500 (même chaîne que les PFAS)
Colonne	SH-AC-11 (4,6 × 250 mm)	Restek Raptor Polar X (50 × 2,1 mm)
Phase mobile	KOH 40 mM, isocratique	Eau 10 mM formiate d'ammonium / ACN (10:90), isocratique
Débit / durée	1 mL/min – 7 min	0,4 mL/min – 5,7 min
Mécanisme de rétention	Échange d'anions	HILIC (partage hydrophile)
Sensibilité	2 ng/L (S/N 21)	2 ng/L – identique
Atout clé	Méthode éprouvée sur eaux, gamme 2 à 5 000 ng/L	Pas de matériel dédié : bascule rapide sur l'UHPLC, analyse plus courte

Sensibilité identique en IC et en UHPLC-HILIC : le choix se fait sur l'équipement disponible et la durée d'analyse, la limite réelle étant fixée par les blancs

Conclusion : une stratégie par matrice



Eaux propres

Injection directe 100 µL (NF EN 17892) : 20 PFAS de la directive quantifiables à 1 ng/L, 53 PFAS en 15 min



Matrices complexes

SPE GCB/WAX (EPA 1633) validée sur sols et eaux résiduelles (essai d'aptitude, interlabo) ; dilute & shoot pour les échantillons très chargés



Matrices alimentaires

Séparation des acides biliaires (TDCA) du PFOS ; robustesse démontrée sur 750 injections d'extrait de saumon



TFA

IC-MS/MS ou UHPLC-HILIC (Raptor Polar X) : sensibilité identique (2 ng/L), la limite est fixée par les blancs



Maîtrise des blancs

Colonne delay, kit PFAS-free, dilution isotopique : la condition de toute quantification au ng/L



Merci !

Nicolas BONGARD

nicolas.bongard@perkinelmer.com

+33 6 85 01 13 97

Christian MISSITCH

christian.missitch@perkinelmer.com

+33 6 80 46 46 27