

Nomenclatura y propiedades químicas y físicas de las Sustancias Per-y Polifluoroalquiladas (PFAS)

1 INTRODUCCIÓN

El Consejo Interestatal de Tecnología y Regulación (ITRC por sus siglas en inglés) ha desarrollado una serie de seis fichas técnicas para resumir los últimos avances científicos y tecnologías emergentes sobre las PFAS. El propósito de esta ficha técnicas es:

- Proporcionar una reseña de la terminología, nombres, y acrónimos de las PFAS, enfocándose en los referencias más comunes en el ambiente. La ficha técnica se enfoca en las pruebas más comunes de PFAS por los métodos analíticos actuales, pero también describe otras clases importantes de PFAS.
- Resumir las propiedades físicas y químicas más comunes asociadas con las PFAS, además de debatir aquellas propiedades cuyos datos no estén actualmente disponibles.

Los temas cubiertos en esta ficha técnica incluyen:

- PFAS Polímeros vs. No-polímeros
- Sustancias perfluoroalquiladas
- Sustancias polifluoroalquiladas
- Nomenclatura de los PFAA
- Cadena corta vs. Cadena larga
- Lineal vs. ramificado
- Ácido vs. anión
- Sustitución química
- Propiedades físicas y químicas

Además, estas fichas usan tres convenciones que vale la pena reseñar:

- Formas aniónicas de los nombres: Las PFAS pueden encontrarse en varios estados iónicos (por ejemplo, ácidos, aniones, cationes), los cuales tienen implicaciones importantes en sus propiedades físicas y químicas. En muchos casos, esta ficha técnica usa el nombre de la forma aniónica de un tipo dado de PFAS, ya que es el estado en el que muchas PFAS se encuentran en el ambiente.
- No se usará el acrónimo “PFC”: este acrónimo está poco definido en la literatura científica, pero suele hacer referencia a compuestos perfluorados. Esto no incluye las sustancias polifluoradas, las cuales se reconocen (cada vez más) como contaminantes en

sitios PFAS, mientras que incluye productos químicos no relacionados que no son de preocupación en estos sitios.

- “PFAS” no “PFASs”: el acrónimo PFAS sirve para sustancias poli- y perfluoradas (del inglés *poly- and perfluorinated substances*). NO hay ning’un compuesto dentro de este grupo que pueda incluirse en ambos grupos (polifluorado y perfluorado), de forma que por definición es en plural y no hace falta una “s” minúscula al final (PFASs). Algunos autores eligen añadir esta letra para enfatizar el plural, pero no es necesario. Cuando se quiera referir a un único compuesto dentro de las PFAS es más preciso nombrar el compuesto concreto.

La USEP ha compilado un recurso en línea para la información sobre las PFAS. La información incluye temas como Políticas y Directrices, Química y Comportamiento, Ocurrencia, Toxicología, y Tecnologías para la Caracterización y Remediación (USEPA 2017).

1.1. ¿Por qué necesitamos entender la nomenclatura de las PFAS?

El número y complejidad de PFAS de relevancia ambiental, junto con el incremento exponencial de las publicaciones científicas ha conllevado a la confusión de la comunidad ambiental y el público general (Buck et al. 2011; Wang et al. 2017). El uso de acrónimos no específicos, como componentes perfluorados (PFC), ha obstaculizado la claridad de los resultados de investigación. El uso de nomenclatura consistente por parte de investigadores, reguladores y partes interesadas reducirán y contribuirán a una comunicación más clara.

Una nomenclatura adecuada también ayuda a distinguir las PFAS de otros compuestos orgánicos que contengan flúor. Las PFAS, que son sustancias fluoradas alifáticas (cadena de carbono), no incluyen sustancias aromáticas (anillo de carbono) que contiene enlaces de carbono-flúor (C-F) (por ejemplo, ingredientes farmacéuticos activos, protección de cultivos) o clorofluorocarbonos (refrigerantes). Esta es otra razón por la que evitar el uso del acrónimo genérico, PFC, ya que incluye estas sustancias que no son PFAS.

Los números del Servicio Químico Abstracto (CAS de *Chemical Abstract Service*) es otra herramienta útil para identificar claramente al producto químico al que se está haciendo referencia. Sin embargo, incluso estos han llevado a la confusión cuando se trata de PFAS. Algunas PFAS pueden encontrarse en varios estados iónicos, tales como los ácidos, aniones (cargados negativamente), cationes (sales cargadas positivamente), y zwitteriones (con moléculas dipolares cargadas positiva y negativamente), cada una de éstas tiene su propio número CAS (y algunas no tienen número CAS). El estado iónico determina su carga eléctrica y sus propiedades físicas y químicas, las cuales a su vez controlan su destino y transporte en el ambiente y los efectos potenciales ecológicos y a la salud humana. Las propiedades físicas y químicas de varios estados de determinadas PFAS pueden alterar completamente aspectos críticos de las PFAS, tales como la solubilidad, volatilidad, y potencial bioacumulativo. Como resultado, se debe tener gran cuidado al seleccionar el número correcto de CAS para evitar confusiones con respecto a la química y comportamiento del químico que está siendo descrito.

2 FAMILIAS DE LAS PFAS

Las PFAS engloban un amplio universo de sustancias con muchas propiedades físicas y químicas diferentes, incluyendo gases (por ejemplo, el perfluorobutano), líquidos (por ejemplo, alcoholes fluoroteloméricos), surfactantes (por ejemplo, sulfonato de perfluorooctano), y materiales poliméricos sólidos de alto peso molecular (por ejemplo, politetrafluorotileno [PTFE]). Por esta razón, es de gran ayuda organizar las PFAS que compartan propiedades físicas y químicas entre las familias.

Las familias de PFAS pueden dividirse en dos categorías principales: polímeros y no-polímeros como se muestra en la Figura 1. Esta ficha técnica está enfocada principalmente en las PFAS no-poliméricas detectadas más comúnmente en el ambiente. Esta ficha técnica no está dirigida a las familias poliméricas de PFAS. Buck et al. (2011) es un documento de acceso abierto que brinda una explicación más detallada de la terminología de las PFAS, su clasificación, origen, y recomendaciones claras, específicas, y terminología descriptiva, nombres, y acrónimos para las PFAS.

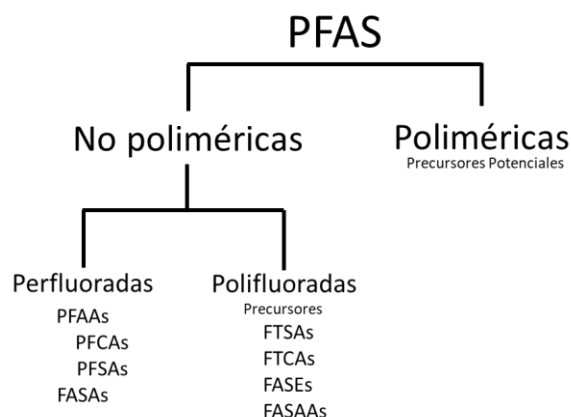


Figura 1. Resumen de la familia PFAS

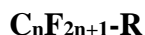
2.1. PFAS no poliméricas

La familia PFAS no poliméricas incluye dos clases principales: las sustancias perfluoroalquiladas y las polifluoroalquiladas, las cuales incluyen muchos subgrupos de compuestos químicos, algunos de los cuales se muestran en la Figura 1. La tabla 1 proporciona la clasificación general y estructura química, ejemplos de cada clase, y los principales usos de las PFAS no poliméricas resaltadas en la Figura 1. Estos compuestos químicos fueron seleccionados el centro de esta ficha técnica puesto que (1) son los detectados más comúnmente en humanos, biota, y otros medios; (2) parecen ser relativamente más abundantes en sitios de investigación de las PFAS; (3) pueden tener valores de orientación estatal o federal (ver la ficha técnica de *Resumen regulatorio*); y/o (4) son los más incluidos en las listas de análisis de PFAS en el laboratorio.

2.1.1 Sustancias perfluoroalquiladas

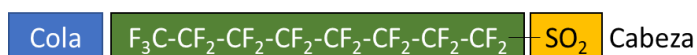
Las sustancias perfluoroalquiladas son moléculas alquiladas (cadenas de carbono) completamente fluoradas (perfluoro-). Su estructura química básica es una cadena (o unión) de

dos o más átomos de carbono con una *cabeza* de grupo funcional cargada en un extremo. Frecuentemente los grupos funcionales son carboxilos o ácidos sulfónicos, sin embargo, hay otras formas que también se detectan en el ambiente. Los átomos fluorados se encuentran unidos en todos los enlaces disponibles a lo largo de la cadena de carbono hasta la cola, excepto uno de los enlaces del último carbono, donde se une la cabeza del grupo funcional. Esta estructura, es la que se muestra en la Figura 2 para el sulfanato perfluorooctano (PFOS) y el perfluorooctanoato (PFOA), que puede ser escrito como:



donde “ C_nF_{2n+1} ” define la longitud de la cadena del perfluoroalquil, “n” es ≥ 2 y “R” representa la cabeza del grupo funcional atraído. Notar que el grupo funcional puede contener 1 o más átomos de carbono, que son incluidos en el número total de carbono cuando el compuesto químico es nombrado.

Sulfanato de perfluorooctano (PFOS)



Carboxilato de perfluorooctano (PFOA)

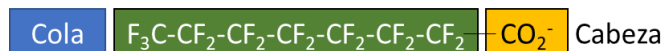


Figura 2. La estructura de cabeza y cola de las moléculas PFOS y PFOA. Adaptado con permiso de Buck, R.C., J. Franklin, U. Berger, J. M. Conder, I. T. Cousins, P. de Voogt, A. A. Jensen, K. Kannan, S. A. Mabury, and S. P. van Leeuwenet. 2011. “Perfluoroalkyl and Polyfluoroalkyl Substances in the Environment: Terminology, Classification, and Origins.” *Integrated Environmental Assessment and Management*, 7:513541. Open access. Copyright 2011 SETAC. <http://dx.doi.org/10.1002/ieam.258>

Tabla 1. Principales clases de PFAS discutidas en esta ficha técnica (modificado por Buck et al. 2011).

Familia	Clase	Grupo	Estructura química general: $C_nF_{2n+1}R$, Donde R =	Ejemplos	Usos	
PERFLUORADOS	Ácidos perfluoroalquílicos (PFAAs)	Ácidos carboxílicos perfluoroalquílicos (PFCAs)	-COOH	Ácido perfluorooctanoico (PFOA), $C_7F_{15}COOH$	Surfactante	
		Carboxilatos perfluoroalquílicos (PFCAs)	-COO ⁻	Perfluorooctanoato (PFOA), $C_7F_{15}COO^-$		
		Ácidos sulfónicos de perfluoroalcanos (PFSAs)	-SO ₃ H	Ácido sulfónico de perfluorooctano (PFOS), $C_8F_{17}SO_3H$	Surfactante	
		Sulfonatos de perfluoroalcanos (PFSAs)	-SO ₃ ⁻	Sulfonato de perfluorooctano (PFOS), $C_8F_{17}SO_3^-$		
	Sulfonamidas de perfluoroalcanos (FASAs)			-SO ₂ NH ₂	Sulfonamida de perfluorooctano, $C_8F_{17}SO_2NH_2$	Materia prima principal para productos de protección de superficies y surfactantes
		Sulfonamidas de N-Alquil-perfluoroalcanos (MeFASAs, EtFASAs, BuFASAs)		-SO ₂ N(R')H Donde R' = C_mH_{2m+1} (m = 0, 1, 2, 4)	Sulfonamida de N-Etil-perfluorooctano (EtFOSA), $C_8F_{17}SO_2N(C_2H_5)H$ Sulfonamida de N-Metil-perfluorooctano (MeFOSA), $C_8F_{17}SO_2N(CH_3)H$	Productos intermedios de transformación ambiental
POLIFLUORADOS	Sustancias fluoroteloméricas	Alcoholes fluoroteloméricos n:2 (n:2 FTOHs)	-CH ₂ CH ₂ OH	Alcohol fluorotelomérico 10:2 (10:2 FTOH), $C_{10}F_{21}CH_2CH_2OH$	Materia prima principal para productos de protección de superficies y surfactantes	
		Ácidos sulfónicos fluoroteloméricos n:2 (n:2 FTSA)	-CH ₂ CH ₂ SO ₃ H	Ácido sulfónico fluorotelomérico 8:2 (8:2 FTSA), $C_8F_{17}CH_2CH_2SO_3H$	Productos de surfactante y transformación ambiental	

Familia	Clase	Grupo	Estructura química general: $C_nF_{2n+1}R$, Donde R =	Ejemplos	Usos
		Ácidos carboxílicos fluoroteloméricos (FTCAs)	-CH ₂ COOH	Ácido carboxílico fluorotelomérico 6:2 (6:2 FTCA), C ₆ F ₁₃ CH ₂ COOH	Producto intermedio de transformación ambiental
			-CH ₂ CH ₂ COOH	Ácido carboxílico fluorotelomérico 5:3 (5:3 Acid), C ₅ F ₁₁ (CH ₂) ₂ COOH	
	Sulfonamido perfluoroalcanos	Etanol-sulfonamido perfluoroalcanos (FASEs) y N-alkil-Etanol-sulfonamido perfluoroalcano (MeFASEs, EtFASEs, BuFASEs)	-SO ₂ N(R')CH ₂ CH ₂ OH where R' = C _m H _{2m+1} (m = 0, 1, 2, 4)	N-etil-perfluorooctano sulfonamidoetanol (EtFOSE), C ₈ F ₁₇ SO ₂ N(C ₂ H ₅)CH ₂ CH ₂ OH	Materia prima principal para productos de protección de superficies y surfactantes
				N-Metil-perfluorooctano sulfonamido etanol (MeFOSE), C ₈ F ₁₇ SO ₂ N(CH ₃)CH ₂ CH ₂ OH	
		Ácido perfluoroalcano sulfonamido acético (FASAAs) y Ácido N-alkil-perfluoroalcano sulfonamido acético (MeFASAAs, EtFASAAs, BuFASAAs)	-SO ₂ N(R')CH ₂ COOH where R' = C _m H _{2m+1} (m = 0, 1, 2,4)	Ácido N-Etil -perfluorooctano-sulfonamido acético (EtFOSAA), C ₈ F ₁₇ SO ₂ N(C ₂ H ₅)CH ₂ CO ₂ H	Producto intermedio de transformación ambiental
				Ácido N-Metil-perfluorooctano-sulfonamido-acético. (MeFOSAA), C ₈ F ₁₇ SO ₂ N(CH ₃)CH ₂ CO ₂ H	

2.1.1.1 Ácidos perfluoroalquilados (PFAAs)

Los ácidos perfluoroalquilados (PFAAs) son algunas de las moléculas más básicas de las PFAS. Estos son esencialmente no-degradables y actualmente son la clase de PFAS más estudiadas en el medio ambiente. La degradación biótica y abiótica de las PFAS puede resultar en la formación de PFAAs. Como resultado, se hace referencia a los PFAAs como “PFAS terminales” o “productos de degradación terminal”, lo que significa que no se formarán más productos de degradación bajo condiciones ambientales. Los PFAS que se degradan para crear PFAAs terminales son nombrados como “precursores”. La clase de PFAA es dividida en dos grupos principales (como se muestra en la Tabla 1):

- Ácidos perfluoroalquilcarboxílicos (PFCAs), o perfluoroalquilcarboxilatos, son productos de degradación terminal de precursores de PFAS específicos, como los alcoholes fluoroteloméricos (FTOHs). El PFCA más frecuentemente detectado es PFOA.
- Ácidos perfluoroalcanosulfónicos (PFSAs), o sulfonatos perfluoroalquilados, son también productos de degradación terminal de productos específicos de PFAS, como los perfluoroalquilsulfonamido-etanoles (PFOSEs). El PFSA más detectado frecuentemente es PFOS.

2.1.1.2 Sulfonamidas de perfluoroalcanos (FASAs)

Las sulfonamidas de perfluoroalcanos (FASAs), como la sulfonamida de perfluorooctano (FOSA), se usan como materia prima para hacer las sustancias sulfonamida-perfluoroalquiladas que son usadas como surfactantes y tratamientos superficiales. Las FASAs pueden degradarse para formar PFAAs como el PFOS. Ejemplos incluyen a la sulfonamida de N-metil-perfluorooctano (MeFOSA) y la sulfonamida de N-Etil-perfluorooctano (EtFOSA).

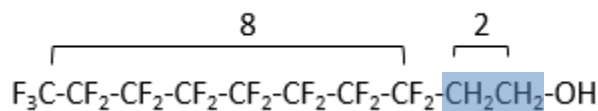
2.1.2 Sustancias polifluoroalquiladas

Las sustancias polifluoroalquiladas y algunos polímeros de cadena lateral fluorada están siendo identificados crecientemente como importantes para la comprensión del transporte y disposición de las PFAS en sitios de emisión y el medio ambiente (OECD, 2013, Butt et al. 2014, Liu y Mejia-Avendaño, 2013, Wang et al. 2011, Mejia-Avendaño et al. 2016). La figura 1 destaca las sustancias polifluoroalquiladas que, hasta la fecha, han sido detectadas de forma frecuente en sitios de PFAS (véase Barzen-Hanson et al. 2017).

Las sustancias polifluoroalquiladas se distinguen de las sustancias perfluoroalquiladas ya que no están completamente fluoradas. En su lugar, éstas tienen un átomo no fluorado (comúnmente hidrógeno u oxígeno) adherido al menos a uno, pero no todos, de los átomos de carbono. Mientras que los últimos dos, o más, de los carbonos restantes en la cadena están totalmente fluorados (Figura 3).

Las sustancias polifluoroalquiladas basadas en fluorotelómeros se nombran usando el prefijo “n:x” donde “n” indica el número de los átomos de carbono totalmente fluorados ($n \geq 2$) y “x” indica el número de átomos de carbono que no están fluorados totalmente ($x \geq 1$). Un ejemplo de

una sustancia polifluoroalquilada se muestra en la Figura 3, que ilustra la relación para la denominación de “n:x”.



8:2 FTOH (8:2 alcohol fluorotelómero)

Figura 3: Ejemplo de una sustancia polifluoroalquilada donde dos de los carbonos de la cola de (sombreado azul) no están totalmente fluorados, mientras que el resto de los carbonos lo está. Esto también muestra la relación de denominación “n:x” donde “n” es el número de carbonos totalmente fluorados (en este caso 8) y “x” que es el número de carbonos que no están totalmente fluorados (en este caso 2).

El enlace hidrógeno-carbono (o algún otro sin flúor) en las moléculas polifluoroalquiladas crea un punto “débil” en la cadena de carbonos que es susceptible a la degradación biótica o abiótica. Como resultado, muchas sustancias polifluoroalquiladas que contienen un grupo perfluoroalquilo $\text{C}_n\text{F}_{2n+1}$ son compuestos químicos precusores que tienen el potencial de transformarse en PFAAs.

Las Figuras 4 y 5 proporcionan algunos ejemplos de vías de degradación para precursores polifluoroalquilados ambientalmente relevantes derivados de dos métodos de producción de PFAS, la telomerización y fluorinación electroquímica (ECF por sus siglas en inglés). Nótese que estas figuras incluyen algunas PFAS que no se discutieron en esta ficha técnica, pero que están descritas en Buck et al. (2011).

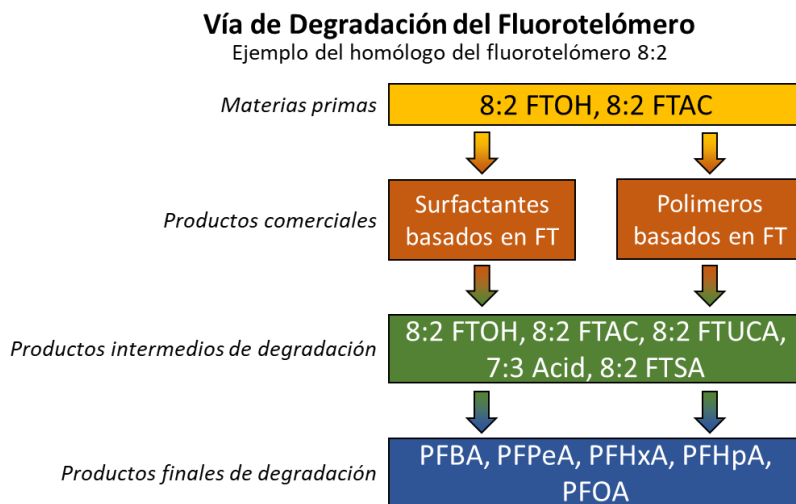


Figura 4. Vía de degradación del fluorotelómero (Ejemplo de un homólogo del fluorotelómero 8:2).

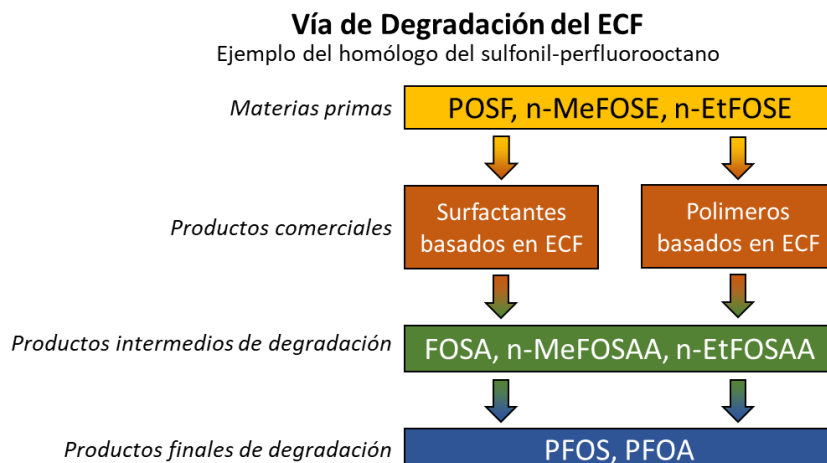


Figura 5. Vía de degradación de la ECF (Ejemplo de un homólogo del sulfonil perfluorooctano).

2.1.2.1 Sustancias Fluoroteloméricas

Las sustancias fluoroteloméricas son sustancias polifluoroalquiladas producidas por los procesos de telomerización. Como se observa en la Figura 4, la degradación de sustancias basadas en el fluorotelómero es una fuente potencial de PFCAs en el ambiente (Buck et al. 2011). Para muchos de estos compuestos químicos, la nomenclatura identifica el número de carbonos perfluorados y no fluorados.

Las siguientes sustancias de fluoroteloméricas (mostradas también en la Tabla 1) son, hoy en día, las más detectadas en el ambiente:

- Los *Alcoholes de fluoroteloméricos* (FTOHs por sus siglas en inglés): Los alcoholes de fluorotelómero n:2 (n:2 FTOHs) son materias primas claves en la producción de acrilatos de fluorotelómero n:2 y metacrilatos de fluototelómero n:2 (Buck et al. 2011).
- Los *Ácidos sulfónicos de fluoroteloméricos* (FTSA por sus siglas en inglés): Los ácidos sulfónicos de fluorotelómero n:2 (n:2 FTSAAs) han sido detectados a partir de matrices ambientales en sitios donde se ha usado espuma formadora de película acuosa (AFFF, del inglés *aqueous film forming foam*), de igual manera que en los efluentes de plantas de tratamiento de agua residual y el lixiviado de los vertederos. FTSAAs son compuestos químicos precursores y pueden someterse a la biotransformación aeróbica de PFCAs (Buck et al. 2011).
- Los *Ácidos carboxílicos de fluorotelómeros* (FTCA por sus siglas en inglés): Estos son compuestos químicos formados a través de la biodegradación de FTOHs (Figura 3; Buck et al. 2011, Liu y Avendaño, 2013) y se han detectado en el lixiviado de vertederos. Nótese que el grupo funcional –COOH en estos compuestos químicos fluoroteloméricos significa que éstos pueden tener un número par o impar de carbonos, por lo que estos pueden tener prefijos n:2 n:3.

2.1.2.2 Sulfonamidas de Perfluoroalcano

Todas las familias de las sustancias sulfonamidas de perfluoroalcano que se muestran en la Tabla 1 y se discuten a continuación han sido detectadas en el ambiente y en los humanos. El perfluoroalcano se refiere a la cola de la cadena que está completamente fluorada, pero estos compuestos químicos también contienen uno o más grupos CH₂ en la cabeza y la molécula unida a la sulfonamida (ver Figura 6). Estos son usados ya sea como materia prima para surfactantes y sus productos para el tratamiento de la superficie, o están presentes como productos de transformación intermedia de las materias primas. Como se muestra en la Figura 5, algunas sustancias sulfonamidas de perfluoroalcano se han encontrado al degradarse los PFOS (Mejia y Lui, 2015). Las sustancias sulfonamidas de perfluoroalcano relevantes ambientalmente incluyen:

- Los etanoles de perfluoroalcano sulfonamido (FASEs) por sus siglas en inglés y los *N*-alquil sulfonamido perfluoroalcanos (MeFASEs, EtFASEs, BuFASEs por sus siglas en inglés) son materias primas para surfactantes y el tratamiento de la superficie de los productos (Buck et al. 2011). La Figura 6 muestra la estructura del N-EtFOSE.
- *Ácido acético sulfonamido de perfluoroalcano* (FASAAs) y el *ácido acético sulfonamido de N-alquil perfluoroalcano* (MeFASAAs, EtFASAAs, BuFASAAs) son productos de transformación inmediata de FASEs MeFASEs, EtFASEs, y BuFASEs (ver Figura 5) (Buck et al. 2011).

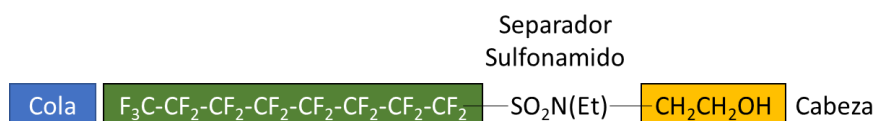


Figura 6. Ejemplo de un Alcohol sulfonamido perfluoroalcano (FASE).

2.2. PFAS poliméricos

Un polímero es una macromolécula compuesta de muchas subunidades menores repetidas (monómeros). Las sustancias poliméricas en la familia de las PFAS incluyen los fluoropolímeros, poliésteres poliméricos, y polímeros fluorados en la cadena lateral.

Los polímeros de cadena fluorada contienen un esqueleto polimérico no fluorado desde el cual se ramifican las cadenas laterales fluoradas. Algunas pueden convertirse en precursores de PFAAs cuando el punto de conexión a la cadena lateral fluorada se rompe, liberando PFAAs.

En general, se cree que las sustancias poliméricas presentan menos riesgos inmediatos ecológicos y a la salud humana en relación con algunas PFAS no poliméricas. Como se mencionó con anterioridad, muchos de los compuestos químicos de interés en sitios de liberación ambiental son los no-poliméricos.

3 NOMENCLATURA DE LOS PFAA

Los PFAAs son la clase de PFAS que constituyen la mayoría de las PFAS típicamente incluidas en la lista de muestras objetivo en los laboratorios comerciales. Además son las PFAS principales a las cuales se ha establecido valores federales o estatales. Como resultado, estos compuestos suelen dirigir las decisiones en los sitios de investigación y remediación, por lo que

es de mucha ayuda comprender la nomenclatura para cada clase. Muchas de las PFAS comúnmente detectadas se denotan usando la taquigrafía estructural:

PFX_Y

Donde:

PF = perfluoroalquil

X = la longitud de la cadena de carbono, usando la misma nomenclatura que los hidrocarburos basada en el número de carbonos (por ejemplo, B para butano de 4 carbonos, Pe para pentanos de 5 carbonos)

Y = el grupo funcional

La Tabla 2 ilustra cómo trabaja esta nomenclatura para los PFCAs y PFSAs que se refieren colectivamente como PFAAs.

Tabla 2. Estructura básica de la nomenclatura y abreviatura en los ácidos perfluoroalquilados (PFAAs).

X	Y	Acrónimo	Nombre	Fórmula	CAS No.
B = buta (4 carbonos)	A = Carboxilato o ácido carboxílico	PFBA	Perfluorobutanato	C ₃ F ₇ CO ₂ ⁻	45048-62-2
			Ácido perfluorobutanoico	C ₃ F ₇ COOH	375-22-4
	S = Sulfonato o ácido sulfónico	PFBS	Sulfonato de perfluorobutano	C ₄ F ₉ SO ₃ ⁻	45187-15-3
			Ácido sulfónico de perfluorobutano	C ₄ F ₉ SO ₃ H	375-73-5
Pe = penta (5 carbonos)	A = Carboxilato o ácido carboxílico	PFPeA	Perfluoropentanato	C ₄ F ₉ CO ₂ ⁻	45167-47-3
			Ácido perfluoropentanóico	C ₄ F ₉ COOH	2706-90-3
	S = Sulfonato o ácido sulfónico	PFPeS	Sulfonato de perfluoropentano	C ₅ F ₁₁ SO ₃ ⁻	ND
			Ácido sulfónico de perfluoropentano	C ₅ F ₁₁ SO ₃ H	2706-91-4
Hx = hexa (6 carbonos)	A = Carboxilato o ácido carboxílico	PFH _x A	Perfluorohexanato	C ₅ F ₁₁ CO ₂ ⁻	92612-52-7
			Ácido perfluorohexanóico	C ₅ F ₁₁ COOH	307-24-4
	S = Sulfonato o ácido sulfónico	PFH _x S	Sulfonato perfluorohexano	C ₆ F ₁₃ SO ₃ ⁻	108427-53-8
			Ácido sulfónico perfluorohexano	C ₆ F ₁₃ SO ₃ H	355-46-4
Hp = hepta (7 carbonos)	A = Carboxilato o ácido carboxílico	PFHpA	Perfluoroheptanato	C ₆ F ₁₃ CO ₂ ⁻	120885-29-2
			Ácido perfluoroheptanoico	C ₆ F ₁₃ COOH	375-85-9
	S = Sulfonato o ácido sulfónico	PFHpS	Sulfonato de perfluoroheptano	C ₇ F ₁₅ SO ₃ ⁻	ND
			Ácido sulfónico perfluoroheptano	C ₇ F ₁₅ SO ₃ H	375-92-8

X	Y	Acrónimo	Nombre	Fórmula	CAS No.
O = octa (8 carbonos)	A = Carboxilato o ácido carboxílico	PFOA	Perfluoroheptanato	$C_7F_{15}CO_2^-$	45285-51-6
			Ácido perfluorooctanoico	$C_7F_{15}COOH$	335-67-1
	S = Sulfonato o ácido sulfónico	PFOS	Sulfonato de perfluorooctano	$C_8F_{17}SO_3^-$	45298-90-6
			Ácido sulfónico perfluorooctano	$C_8F_{17}SO_3H$	1763-23-1
N = nona (9 carbonos)	A = Carboxilato o ácido carboxílico	PFNA	Perfluorononanoato	$C_8F_{17}CO_2^-$	72007-68-2
			Ácido perfluorononanoico	$C_8F_{17}COOH$	375-95-1
	S = Sulfonato o ácido sulfónico	PFNS	Sulfonato perfluorononano	$C_9F_{19}SO_3^-$	ND
			Ácido sulfónico perfluorononano	$C_9F_{19}SO_3H$	474511-07-4
D = deca (10 carbonos)	A = Carboxilato o ácido carboxílico	PFDA	Perfluorodecanato	$C_9F_{19}CO_2^-$	73829-36-4
			Ácido perfluorodecano	$C_9F_{19}COOH$	335-76-2
	S = Sulfonato o ácido sulfónico	PFDS	Sulfonato perfluodecano	$C_{10}F_{21}SO_3^-$	126105-34-8
			Ácido sulfónico perfluorodecano	$C_{10}F_{21}SO_3H$	335-77-3
Un = undeca (11 carbonos)	A = Carboxilato o ácido carboxílico	PFUnA or PFUnDA	Perfluoroundecanato	$C_{10}F_{21}CO_2^-$	196859-54-8
			Ácido perfluoroundecanoico	$C_{10}F_{21}COOH$	2058-94-8
	S = Sulfonato o ácido sulfónico	PFUnS or PFUnDS	Sulfonato perfluoroundecano	$C_{11}F_{23}SO_3^-$	ND
			Ácido sulfónico perfluoroundecano	$C_{11}F_{23}SO_3H$	749786-16-1
DoD = dodeca (12 carbonos)	A = Carboxilato o ácido carboxílico	PFDoDA	Perfluorododecanato	$C_{11}F_{23}CO_2^-$	171978-95-3
			Ácido perfluorododecanoico	$C_{11}F_{23}COOH$	307-55-1
	S = Sulfonato o ácido sulfónico	PFDoDS	Sulfonato perfluorododecano	$C_{12}F_{25}SO_3^-$	ND
			Ácido sulfónico perfluorododecano	$C_{12}F_{25}SO_3H$	79780-39-5
TrD = trideca (13 carbonos)	A = Carboxilato o ácido carboxílico	PFTrDA	Perfluorotridecanato	$C_{12}F_{25}CO_2^-$	862374-87-6
			Ácido perfluorotridecanoico	$C_{12}F_{25}COOH$	72629-94-8
	S = Sulfonato o ácido sulfónico	PFTrDS	Sulfonato de perfluorotridecano	$C_{13}F_{27}SO_3^-$	ND

X	Y	Acrónimo	Nombre	Fórmula	CAS No.
			Ácido sulfónico perfluorotridecano	$C_{13}F_{27}SO_3H$	ND
TeD = tetradeca (14 carbonos)	A = Carboxilato o ácido carboxílico	PFTeDA	Perfluorotetradecanato	$C_{13}F_{27}CO_2^-$	365971-87-5
			Ácido perfluorotetradecanóico	$C_{13}F_{27}COOH$	376-06-7
	S = Sulfonato o ácido sulfónico	PFTeDS	Sulfonato de perfluorotetradecano	$C_{14}F_{29}SO_3^-$	ND
			Ácido sulfónico de perfluorotetradecano	$C_{14}F_{29}SO_3H$	ND

ND = no disponible

Téngase en cuenta que, para los carboxilatos, el número total de carbonos utilizado para nombrar los compuestos incluye el carbono en el grupo funcional carboxilato (COOH), por lo que, aunque el PFOA tienen siete carbonos en su cola fluoroalquilo, los ocho carbonos de la molécula se utilizan para nombrarlo (perfluorooctanato). Sin embargo, en términos de comportamiento químico, el PFOA sería más análogo al sulfonato de perfluoroheptano de siete carbonos (PFHpS), que a la molécula de ocho carbonos que sería el sulfonato de perfluorooctano (PFOS).

Obsérvese en la Tabla 2, los nombres y fórmulas de PFAA se muestran tanto en las formas desprotonadas (aniónicas) y protonadas (ácidas o neutras). La forma desprotonada es el estado en el que se encuentran los PFAA en el medio ambiente, excepto en situaciones muy raras (por ejemplo, cuando el pH es extremadamente bajo). Las formas desprotonadas y protonadas de nombres de PFAA a menudo se usan incorrectamente de manera intercambiable (por ejemplo, sulfonato de perfluorooctano y ácido perfluorosulfónico) y el mismo acrónimo (en este caso, PFOS) se aplica a ambas formas. Sin embargo, como se discutió en las secciones 3.2 y 6.2.2, sus propiedades físicas y químicas son bastante diferentes y es importante saber qué forma se está describiendo.

Nota sobre el nombramiento de PFAS en informes de laboratorio

Aún cuando las PFAAs aparezcan en el medio ambiente como aniones, algunos laboratorios informan de todos sus resultados usando la forma ácida, mientras que otros pueden nombrar las PFCAs como ácidos (por ejemplo, ácido perfluorooctanóico) y PFSAs como aniones (por ejemplo, sulfonato perfluorooctano). Esto ha llevado a la confusión con respecto a qué forma de PFAA se está midiendo exactamente. Aunque un laboratorio esté midiendo la concentración de aniones de PFAA presente en la muestra, los resultados pueden ser reportados como ácidos, ya que se ajusta el valor para el catión H^+ (tiene poca masa, y no afecta la concentración resultante).

Cabe señalar que los estándares utilizados por los laboratorios para realizar análisis se pueden preparar a partir de sales de PFAA, como suele ser el caso para los estándares de sulfonatos. Si es así, el laboratorio debe ajustar la concentración encontrada para tener en cuenta la masa del contraión (normalmente Na^+ o K^+). El cálculo para hacer esto se describe en la sección 7.2.3. del método 537 de la EPA (Shoemaker, Grimmer, and Boutin 2009).

Hasta hace poco, los carboxilatos y sulfonatos han sido las clases más comúnmente usadas en el medio ambiente. Sin embargo, existe una amplia gama de PFAS con otros grupos funcionales los cuales pueden aplicarse o no con la misma taquigrafía “PFX_Y” que se muestra arriba. Para la nomenclatura de los compuestos consulte to Buck et al (2011).

3.1. Distinción entre cadena larga y cadena corta:

Algunas veces las FAAs se describen como *de cadena larga* y *cadena corta* como una forma abreviada de agrupar PFCA y PFSA que pueden comportarse de manera similar en el medio ambiente. Sin embargo, es importante no generalizar sobre el comportamiento de las PFAA basado sólo en la longitud de las cadenas. Como recientemente sugieren los investigadores, otros factores, además de la longitud de la cadena, afectan la bioacumulación potencial de las PFAS (Ng y Hungerbühler, 2014).

De acuerdo con la Organización para la cooperación y el Desarrollo Económico (2013, OCDE por sus siglas en inglés):

- *Cadena larga* se refiere a:
 - Ácidos carboxílicos perfluoroalquilados, PFCAs, con ocho o más carbonos (siete o más carbonos están perfluorados).
 - Sulfonatos de perfluoroalcanos, PFSAs, con seis o más carbonos (seis o más carbonos están perfluorados).
- *Cadena corta* se refiere a:
 - Ácidos carboxílicos perfluoroalquilados con siete o menos carbonos (seis o menos están perfluorados).
 - Sulfonatos de perfluoroalcanos: con cinco o menos carbonos (cinco o menos carbonos perfluorados).

La Tabla 3 ilustra las diferencias entre los PFCAs y PFSAs de cadena corta y cadena larga:

Tabla 3. PFCAs y PFSAs de cadena corta y cadena larga.

PFCAs de cadena corta				PFCAs de cadena laga				
PFBA	PFPeA	PFH _x A	PFHpA	PFOA	PFNA	PFDA	PFUnA	PFDoA
PFBS	PFPeS	PFH _x S	PFHpS	PFOS	PFNS	PFDS	PFUnS	PFDoS
PFSAs de cadena corta		PFSAs de cadena larga						

3.2. Forma aniónica vs ácida.

Como se indicó anteriormente, los nombres de las formas aniónicas o ácidas de PFAS se suelen usar indistintamente. Sin embargo, es importante saber de qué forma se está hablando debido a las diferencias entre sus características físicas-químicas y su comportamiento en el medio ambiente (ver Sección 6). Algunas cosas importantes a tener en cuenta son:

- Muchos de los PFAAs están presentes en el medio ambiente y las matrices humanas en su forma aniónica. Por ejemplo, PFOS está en el medio ambiente en la forma aniónica (sulfonate de perfluorooctano).
- Aunque los laboratorios se encuentren reportando PFOA o PFOS usando el nombre de la forma ácida, en realidad están midiendo la forma aniónica (por ejemplo, octanoato o sulfonato), ya que esta es la forma que existe en el medio ambiente.
- La forma ácida y sus sales catiónicas asociadas tienen números CAS, mientras que las formas aniónicas no siempre lo poseen (ver Tabla 1). Por ejemplo, el PFOS puede existir como diferentes sales (catiónicas), incluyendo sodio, litio, potasio, o amonio. Cada una de estas sales tiene un número CAS diferente:
 - PFOS, forma ácida CAS No.: 1763-23-1
 - PFOS, sal de potasio CAS No.: 2795-39-3
 - PFOS, sal de amonio CAS No.: 29081-56-9
- Cuando la sal o ácido existe en agua u otros líquidos, disociándose y formando el anión (COO^-). La Figura 7 ilustra la disociación del ácido perfluorobutanoico.
- Es de vital importancia distinguir entre la forma acídica y la aniónica cuando se reporten las propiedades físicas o químicas. En este informe se hace referencia principalmente a las formas aniónicas, en caso de que se hable de la forma acídica se menciona expresamente.

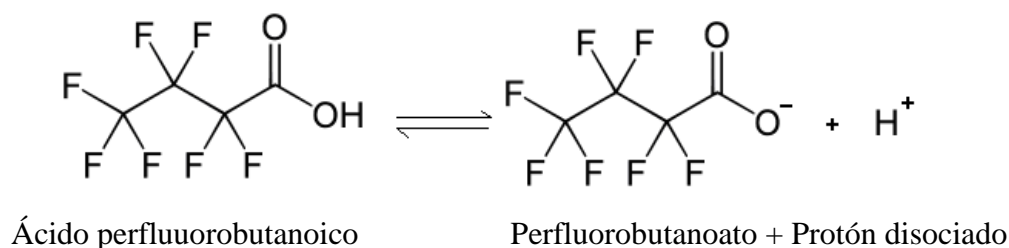


Figura 7. Disociación del ácido perfluorobutanoico.

4 ISÓMEROS LINEALES Y RAMIFICADOS DE LAS PFAS

Muchas PFAS pueden estar presente como mezclas de isómeros lineales y ramificados (químicos con la misma fórmula química, pero con diferente estructura molecular) dependiendo del proceso de fabricación. Estas diferencias estructurales son importantes porque pueden afectar la forma en que los compuestos se comportan en el ambiente y pueden proporcionar un indicador de la fuente de origen. Las diferencias estructurales se describen a continuación:

- Un *isómero lineal* está compuesto de átomos de carbono unidos sólo a uno o dos carbonos, los cuales forman una columna de carbono recta. Puede haber sólo un isómero lineal en un grupo homólogo de C_n (compuesto por el mismo número de carbonos en el cabo).

- En un *isómero ramificado*, al menos un átomo de carbono está unido a más de dos átomos de carbono que forma una ramificación a la red de carbono. Puede haber muchos isómeros por grupo homólogo de C_n.

La figura 8 muestra la estructura de un PFOS lineal ramificado.

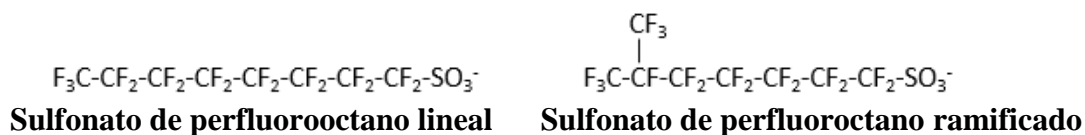


Figura 8. Isómero lineal y ramificado de PFOS.

La fórmula “C_nF_{2n+1}-” (cuando n es mayor o igual a 3) incluye las estructuras lineales y ramificadas. Por ejemplo, PFOS y PFHxS están continuamente presentes en el ambiente como una mezcla de isómeros lineales y ramificados.

Las mezclas de isómeros lineales y ramificados pueden presentar desafíos en la cuantificación precisa de PFAS en matrices ambientales. Sin embargo, pueden ser útiles para comprender las fuentes de PFAS y la edad de la fuente, ya que la producción de isómeros varía según los procesos de fabricación. Por ejemplo, el proceso de telomerización produce sólo PFAAs lineales, mientras que el proceso de fluoración electroquímica (ECF) produce una mezcla de isómeros de PFAAs lineales y ramificados (consulte la Tabla 4 y la Hoja de datos de historia y uso). La presencia de isómeros lineales y ramificados también puede tener implicaciones para la partición y el transporte.

Tabla 4. Procesos de Fabricación y Posibles PFAA Producidos

Proceso de fabricación	Sustancia polifluorada comúnmente encontrada (precursores)	Posibles PFAAs producidos
Telomerización	FTSA ¹	PFCAs lineal
	FTCA ²	PFCAs lineal
	FTOH	PFCAs lineal
Fluoración electroquímica	FOSE	PFCAs ramificado y lineal PFSAs ramificado y lineal
	FOSAA	PFCAs ramificado y lineal PFSAs ramificado y lineal

¹Sulfonato de fluorotelómero: encontrados en sitios AFFF
²ácido fluorotelómero carboxílico (e.j., ácido 5:3) encontrado en el lixiviado de vertederos

5 QUÍMICA DE REEMPLAZO

La preocupación sobre la persistencia, bioacumulación y posibles efectos ecológicos y de salud humana de los PFAA de cadena larga ha llevado a los fabricantes a desarrollar químicas de reemplazo de PFAS de cadena corta que no deberían degradarse a PFAA de cadena larga (USEPA, 2006; OCDE, 2017). Las alternativas de cadena corta incluyen productos basados en fluorotelómeros con una cadena de perfluoroalquilo de seis carbonos y productos basados en la ECF con una cadena de perfluoroalquilo de cuatro carbonos. Estos productos pueden degradarse para formar PFAA de cadena corta, como PFHxA y PFBS, respectivamente (Wang et al., 2013; Buck, 2015). Si bien aquí no es posible una discusión completa de tales químicos de reemplazo, es importante estar al tanto de esta tendencia hacia las químicas de cadena más corta, ya que puede algunos de estos compuestos PFAS comiencen a encontrarse cada vez más en el ambiente.

Un ejemplo de esta tendencia son las sustancias PFAS de reemplazo que se han desarrollado para su uso como coadyuvantes en la producción de fluoropolímeros. Los reemplazos generalmente son carboxilatos de éter fluorado. Dos de estos que se han detectado en el entorno y generaron preocupación pública y medidas regulatorias son (sus estructuras moleculares se ilustran en la Figura 9):

- **GenX**-nombre comercial para el amonio, 2,3,3,3-tetrafluoro-2- (heptafluoropropoxi) propanoato [$\text{CF}_3\text{CF}_2\text{CF}_2\text{OCF}(\text{CF}_3)\text{COO-NH}_4^+$, N° CAS 62037-80-3], un tensioactivo carboxilato de perfluoropoliéter (Wang, et al. 2013; Buck 2015)
- **ADONA**: nombre comercial del 4,8-dioxa-3H-perfluorononanoato de amonio [$\text{CF}_3\text{OCF}_2\text{CF}_2\text{CF}_2\text{-OCHF}_2\text{COO-NH}_4^+$, N° CAS 958445-44-8], un tensioactivo de polifluoropoliéter carboxilato (Gordon, 2011)

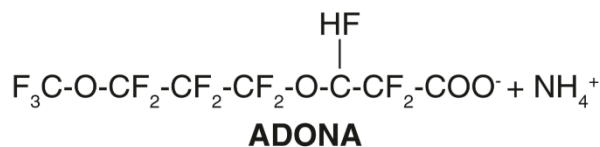
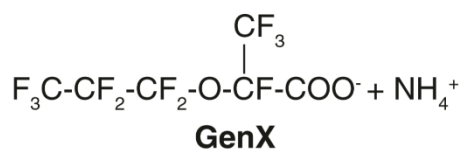


Figura 9. Estructuras de la química de reemplazo

6 PROPIEDADES FÍSICAS Y QUÍMICAS

Las propiedades físicas y químicas de las PFAS, junto con las características del sistema ambiental, determinan el comportamiento ambiental de los contaminantes orgánicos, incluido el estado del compuesto y el comportamiento de reparto (Banks et al., 1994). El reparto puede ocurrir entre formas moleculares neutra e iónica, estados sólidos y líquidos, y entre diferentes medios y biota (acuosa, fase pura, suelo / sedimento, biota y atmosférica). El comportamiento ambiental de muchos PFAS se complica aún más por sus propiedades surfactantes

La Figura 10 ilustra las propiedades químicas y físicas clave y los coeficientes de reparto. La comparación de las propiedades químicas y físicas de diferentes PFAS proporciona una idea de las similitudes y diferencias en su comportamiento ambiental y puede informar el diseño de la investigación.

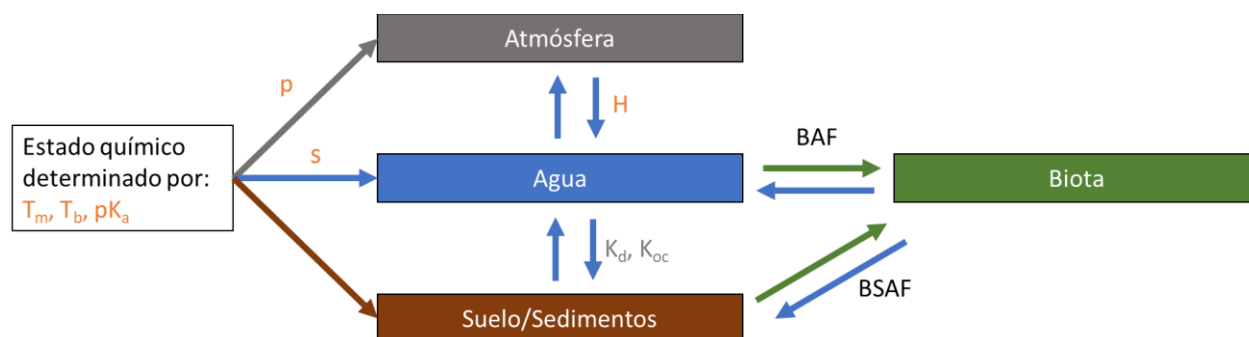


Figura 10. El papel de las propiedades físicas y químicas clave (mostradas en naranja) en el comportamiento de los compuestos ambientales. Otros coeficientes de distribución importantes (por ejemplo, K_d , K_{oc} se muestran en gris) se abordan en las discusiones sobre el destino y el transporte de PFAS. T_m = punto de fusión; T_b = punto de ebullición; pK_a = constante de disociación ácida; p = presión de vapor; S = solubilidad; H = constante adimensional de la ley de Henry; K_d = coeficiente de reparto del suelo y del sedimento; K_{oc} = coeficiente de partición de carbono orgánico; BAF = factor de bioacumulación; y $BSAF$ = factor de acumulación biota-sedimento.

Existe una gran variación en los datos publicados sobre las propiedades químicas y físicas de PFAS. Las propiedades físicas y químicas confiables para PFAS son escasas (por ejemplo, la presión de vapor y las constantes de la ley de Henry) y algunos de los valores disponibles se modelan en lugar de medirse directamente. Muchas de las propiedades disponibles se basan en la forma ácida del PFAA, que no están presentes en el medio ambiente, a menos que el pH sea < 3 , lo que no es típico.

La Tabla 5 proporciona un resumen general de la información de propiedades físicas y químicas disponible para PFCA y la sensibilidad de esta información en relación con la forma neutra vs. aniónica. Por ejemplo, las formas aniónicas de PFOA y PFOS tienen un factor de bioconcentración documentado y propiedades del factor de bioacumulación (Martin et al., 2003a, Martin et al., 2003b) mientras que otras propiedades no están disponibles.

Tabla 5. Propiedades físicas y químicas para las PFCAs

Propiedades								Relevancia Ambiental?
Estado	CAS #	S _w	P ^o	K _h	K _{ow}	K _{oc}	BCF and/or BAF	
Ácido	Y	Y	Y	E	E	E	N	No
Catión:								No
NH ₄ ⁺	Y	Y	N	N	N	N	N	
Li ⁺	Y	Y	N	N	N	N	N	
Na ⁺	Y	Y	N	N	N	N	N	
Anión	M	N	N	N	N	N	Y	Yes

S_w = solubilidad en agua

Y= datos disponibles

P^o = presión de vapor

N = no hay datos disponibles

K_h = constante de la ley de Henry

M = algunos datos disponibles

K_{ow} = coeficiente de partición octanol/agua

E = datos estimados, no medido directamente

K_{oc} = coeficiente de partición de carbon orgánico

BAF = factor de bioacumulación

BCF = factor de bioconcentración

6.1. Propiedades físicas

Muchos PFAS se encuentran en forma sólida a temperatura ambiente, a menudo como un polvo blanco o sustancia cerosa, aunque algunos pueden ser líquidos. Como se mencionó anteriormente, los datos con respecto a las propiedades físicas del PFAS son escasos, y para los PFAA pueden estar relacionados con la forma ácida del compuesto, que no es la forma más relevante para el medio ambiente. Algunos datos de punto de fusión están disponibles para los estándares de PFCA en forma ácida. También se encuentran disponibles presiones de vapor medidas para la forma ácida de PFOA, PFNA, PFDA, PFUnA y PFDoA (Barton et al., 2008; Kaiser et al., 2005) y alcoholes de fluorotelómeros (Krusic et al., 2005). De manera similar, las constantes de la Ley de Henry están disponibles para los alcoholes de fluoroteloméricos (Goss et al. 2006). En los PFAAs, se sabe que la forma ácida se transfiere a fases gaseosas en soluciones de pH muy bajo (Kaiser et al. 2010). Se debe tener cuidado cuando se revisen las propiedades físicas de las PFAS y asegurarse de que se aplica a la forma (acídica o aniónica) de interés en el sitio.

6.2. Propiedades químicas

6.2.1. Enlace de Flúor y carbono-flúor (C-F)

Como se mencionó anteriormente, la comprensión de las propiedades químicas de PFAS es clave para comprender la diversidad de usos y aplicaciones asociadas con esta clase de compuestos, así como su comportamiento ambiental único. Algunas de las propiedades químicas clave del flúor y las características que imparten al PFAS se proporcionan en la Tabla 6.

Propiedades tales como la alta electronegatividad y el pequeño tamaño del flúor conducen a un fuerte enlace C-F, el enlace covalente más fuerte en la química orgánica (Kissa 2001, Banks et al., 1994). La baja polarizabilidad del flúor conlleva interacciones intermoleculares débiles,

como las fuerzas de van der Waals y los enlaces de hidrógeno (Kissa 2001, Banks et al., 1994). Son principalmente las propiedades únicas del flúor las que confieren a muchos PFAS sus propiedades hidro- y lipofóbicas (resistentes a las manchas), tensioactivas y los hacen estables térmica y químicamente. No todas estas características (por ejemplo, actividad superficial) son universales para todos los PFAS.

Table 6. Características del flúor, características resultantes y propiedades del PFAS.

Características del Flúor	Descripción	Resultados	Propiedad final de las PFAS
Alta electronegatividad	Tendencia a atraer electrones al enlace	Enlace C-F fuerte	Estabilidad térmica
		Enlace polar con cierta carga negativa hacia el F	Estabilidad química/ Baja reactividad
Baja polarizabilidad	La densidad electrónica no se ve afectada por los campos eléctricos de otras moléculas	Interacciones intermoleculares débiles (fuerzas de van der Waals, puentes de hidrógeno)	Propiedades surfactantes hidrofóbicas y lipofóbicas ²
		Baja energía superficial	
Pequeño tamaño	El radio atómico para un enlace covalente son 0,72 Å	Protege al carbono	Estabilidad química (baja reactividad)

¹Cuando está apareado con un grupo funcional como los ácidos carboxílicos o sulfónicos.
²Cuando está apareado con un grupo funcional hidrofílico (como un carboxilato)
 Å= Angstrom

6.2.2. Constantes de disolución ácidas

Saber si un producto químico se disociará en otros líquidos es importante para comprender su destino y su transporte en el medio ambiente. La constante de disociación ácida (K_a) es una medida cuantitativa de la concentración de un ácido en solución, aunque generalmente se presenta en forma de la constante logarítmica (pK_a). Cuanto mayor sea el valor de pK_a , menor será el grado en que el producto químico se disociará a un pH dado. Los productos químicos con valores pequeños de pK_a se llaman ácidos fuertes y aquellos con valores grandes de pK_a se llaman ácidos débiles.

Muchos PFAAs, como los PFCAs y PFSAs, son ácidos fuertes debido a los efectos de atracción de electrones que ejerce el flúor, y que se extiende a los grupos funcionales ácidos (Kissa 2001, Banks et al., 1994). Como resultado, la mayoría de los PFAAs se disocian fácilmente en agua y otras matrices ambientales. Por lo tanto, en la mayoría de los pH ambientalmente relevantes, los PFCa y los PFSA están presentes en la forma aniónica disociada, desprotonada, más que en la forma ácida protonada.

Como se señaló anteriormente, las formas protonadas y aniónicas tienen propiedades físicas y químicas muy diferentes. Por ejemplo, el anión de perfluorooctanoato es altamente soluble en agua y tiene una presión de vapor despreciable, mientras que el ácido perfluorooctanoico tiene una solubilidad en agua muy baja y una presión de vapor suficiente para repartirse del agua al aire. Es esencial hacer una distinción entre la forma ácida protonada y la forma aniónica cuando se observan las propiedades físicas y químicas o las evaluaciones de destino y transporte.

Los valores específicos de pKa para PFAA generalmente no están disponibles. Hay limitados valores experimentales y predichos disponibles para el PFOA, y varían de -0.5 a 3.8 (Burns y otros 2008, Kissa 2001, Barton y otros 2007, Goss, 2008), lo que sugiere que a pH casi neutro (pH = 7.0), el PFOA existirá en la fase acuosa en forma aniónica y la cantidad de PFOA protonado en la mayoría de los sistemas ambientalmente relevantes será insignificante. Un estudio reciente estima que los valores de pKa de PFBA, PFHxA, PFHpA, PFOA, PFNA, PFDA y PUnA son inferiores a 1,6 y se espera que los valores de pKa de PFSA sean aún más bajos (Vierke et al., 2013).

6.2.3. Estabilidad térmica y química

PFAAs terminales, como PFOA o PFOS son altamente estables, térmica y químicamente, resistiendo la degradación y la oxidación. La estabilidad térmica de los PFAAs se atribuye principalmente a la fuerza del enlace C-F de la cola fluoroalquilada (Kissa 2001). La estabilidad se determina el grupo funcional unido a esta cola. Los PFCAs y PFSAs son los surfactantes fluorados más estables. Las formas ácidas de estos PFAAs se descomponen a temperaturas mayores de 400°C, pero la mineralización completa ocurre a temperaturas superiores a 1000°C. en las situaciones prácticas como una incineradora municipal, la temperatura de mineralización puede ser menor debido a la presencia de otras sustancias hidrogenadas. La estabilidad térmica es menor para las sales de PFAAs y dependerá del catión que sea el contra-ión. La temperatura de descomposición del 20% del perfluorooctanoato de sodio es 298°C, pero es 341°C para el perfluorooctanoato de litio (Kissa 2001). Además, las sales de los PFSAs son más estables térmicamente que las sales correspondientes de los PFCAs (Kissa 2001).

La fuerza del enlace C-F, protege el carbono, y efectos inductivos (causados por la electronegatividad del flúor) conllevan a la estabilidad química de las PFAS. Por ejemplo, especies químicas ricas en electrones (llamadas nucleófilas) se verían atraídas por la carga parcialmente positiva del carbono. Si fuesen capaces de acercarse lo suficiente al enlace de carbono, eliminarían el flúor de la molécula, haciéndola susceptible a la degradación. Sin embargo, el tamaño del flúor evita que esto ocurra (Banks, Smart, and Tatlow 1994; Schwarzenbach, Gschwend, and Imboden 2003). Este es el porqué procesos como la hidrólisis, que suponen la eliminación de uno o más flúor, son inefectivos para degradar PFAS. De forma similar, muchas PFAS son resistentes a la degradación oxidativa basada en la pérdida de electrones (Kissa 2001). Las PFAS también resisten procesos reductivos (ganancia de electrones). A pesar de tener alta afinidad por los electrones, el flúor no tiene orbitales libres que le permitan aceptar electrones adicionales (Park et al. 2009).

6.2.4. Coeficiente de reparto octanol/agua, K_{ow}

El coeficiente de reparto octanol/agua (K_{ow}) a veces se usa como un proxy para la captación en sistemas biológicos. El valor de K_{ow} se define como “el ratio de la concentración de un

compuesto en la fase de octanol con respecto a la concentración en la fase acuosa de un sistema [octanol/agua] de dos fases” (USEPA 2015d). La presión de vapor, el punto de fusión y el punto de ebullición PFAS neutras, volátiles y no poliméricas (por ejemplo, FTOH) pueden medirse, y K_{ow} puede ser estimada o medida. Los valores de K_{ow} que suelen estar tabulados para los PFCA y los PFSA son para la forma protonada y, por lo tanto, no son relevantes porque los PFCA y los PFSA son aniónicos (no neutros) a pH ambientales. Además, debido a que muchos PFAS se unen a proteínas, algunos PFAS pueden bioacumularse por mecanismos distintos de los que impulsan contaminantes hidrofóbicos más tradicionales (Ng y Hungerbühler 2013; 2014). Otras PFAS pueden simplemente detectarse en organismos debido a exposiciones en curso y sus vidas medias extensas en humanos (por ejemplo, concentraciones en el agua potable) (Wiesmueller 2012, Gyllenhammar et al., 2015). Se debe tener en cuenta que, aunque el K_{ow} para algunos contaminantes orgánicos puede usarse para estimar el K_{oc} , esto no se puede realizar para estimar valores para PFAS.

7. RESUMEN

Esta ficha técnica aborda las convenciones de nomenclatura y las propiedades físicas y químicas de algunos de los PFAS más comunes considerando el uso histórico y el estado actual de la investigación científica relacionada con la ocurrencia ambiental y análisis comerciales disponibles. Consúltase Buck et al. (2011) para convenciones adicionales en materia de nomenclatura. En general, los valores de las propiedades físicas y químicas de muchos PFAS no poliméricos no están disponibles. Desde 2015, con la eliminación progresiva de los principales productores mundiales de PFAAs de cadena larga y sus precursores potenciales, como los basados en la química C8 (véase la *Ficha Técnica de Historia y Uso*), PFAS de reemplazamiento (como alternativas de cadena corta o perfluoropoliéteres no poliméricos) han sido introducidos comercialmente (muchos siguiendo revisiones de la USEPA) y muchos continúan en desarrollo. En el futuro, puede que sea necesario expandir las convenciones en nomenclatura y acrónimos para asegurar que existen nomenclaturas estandarizadas para miembros adicionales de esta clase de compuestos. Además, a medida que se incluyan más PFAS en estudios de salud humana, se irá adquiriendo información adicional de las propiedades físicas o químicas de estos compuestos. Consulte las otras Fichas Técnicas sobre las PFAS para obtener más información sobre sus propiedades y sobre cómo se aplican prácticamente.

8. REFERENCIAS Y ACRÓNIMOS

Las referencias citadas en esta Ficha Técnica, y otras Fichas Técnicas sobre las PFAS se incluyen en una lista combinada que está disponible en la web del ITRC. La lista combinada de acrónimos también está disponible.