

可疑与非靶向筛查： 超高效液相色谱串联飞行时间质谱法 筛查消防泡沫及受影响水体中的全氟 和多氟烷基物质

作者

刘立全，黄俊，余刚
清华大学环境学院

吕美玲
安捷伦科技（中国）有限公司

摘要

全面掌握 PFAS 组分特征是开展风险评估的重要前提。本研究采用超高效液相色谱-四极杆飞行时间质谱联用仪 (UHPLC/QTOF-MS)，建立了 PFAS 可疑与非靶向筛查方法，通过建立完善的 PFAS 类化合物精确质量数据库与二级质谱图库结合质谱数据非依赖型采集模式，显著提高了筛查通量和效率，适用于离子型 PFAS 赋存的非靶向分析以及转化过程中 PFAS 中间产物的识别。应用该方法揭示了典型消防泡沫及受影响水体中 PFAS 组分特征，并识别到这些基质中共七十余种 PFAS，发现新型离子型 PFAS 是消防泡沫中总氟的重要组成部分。

前言

美国化学文摘社 (CAS) 已登记超过 2 亿种化学物质, 美国 EPA 毒性数据库 DSSTox 摘录的 PFAS 达到 14000 余种。随着 PFAS 定义的演变, 目前 PubChem 数据库中收录的 PFAS 已达 600 万种。消防演练和火灾现场用于扑灭 B 类火时广泛使用的水成膜泡沫 (AFFF) 被认为是环境中 PFAS 的主要来源之一, 这是由于其配方的核心成分是含有 PFAS 的氟碳表面活性剂 (FS)。为了全面了解由于 AFFF 排放导致的环境中 PFAS 的累积及其污染特征, 有必要对市场上主流的 AFFF 及 FS 的 PFAS 组分特征进行解析, 这将有助于评估 AFFF 排放源对受影响地区的生态与健康风险。

然而, 受限当前色谱技术的分离能力和有限的化学标准品, 基于液相色谱与串联四极杆质谱的靶向分析技术通常只能实现对数十种 PFAS 的定量分析^[1]。液相色谱-高分辨质谱联用技术越来越多地应用于离子型 PFAS 的筛查。该技术用于化合物筛查时既可以开展基于化合物列表的可疑物筛查, 也可以开展无先验信息的非靶向筛查^[4]。对于液相色谱高分辨质谱联用技术, 在数据采集模式方面, 可以提供多种模式, 包括数据依赖的二级质谱采集 (如 Auto MS/MS 模式), 可以结合迭代采集技术, 提升采集的化合物的二级质谱数量与质量, 为后期更多化合物的识别与鉴定奠定基础; 也包括数据非依赖的二级质谱采集技术, 如 All Ions MS/MS 采集模式, 可以通过一次进样获得所有母离子的碎片离子信息, 进而结合数据库与谱图库对化合物进行识别与鉴定。将多种采集模式与筛查模式相结合, 可以更加全面地识别与鉴定样品中未知的化合物。

随着近年来液相色谱与高分辨质谱联用技术的快速发展与数据处理效率的提升, 定性鉴别环境介质中 PFAS 的能力也有了显著的增强^[2], 使近年来报道的 PFAS 种类呈现爆炸式增加。目前环境介质中已有超过 1000 种 PFAS 见诸报道^[3]。

本研究采用超高效液相色谱-四极杆飞行时间质谱联用仪 (UHPLC/QTOF-MS), 建立了 PFAS 可疑与非靶向筛查方法, 提高了 PFAS 筛查通量和效率, 为解析消防泡沫、其核心配方 FC 及受影响水体样品中的 PFAS 特征提供了技术手段。

实验部分

试剂和样品

实验所用的甲醇 (CH₃OH, LC-MS 级) 购于 Merck KGaA (德国), 乙酸铵 (NH₄Ac, HPLC 级, ≥ 99.0%) 购于 Sigma-Aldrich Fluka (美国) 公司, 氨水 (NH₃·H₂O, HPLC 级) 购于阿拉丁试剂有限公司, 高纯水由 Milli-Q 装置 (Millipore 公司, 美国) 提供。

本研究收集了中国市场占有率最大的泡沫用氟表面活性剂 (FS) 生产商 (上海威腾) 以及国际两大主流厂商的系列 FS 样品、代表性泡沫浓缩液样品以及来自火灾现场受影响水体的样品。

仪器和设备

采用 Agilent 1290 Infinity II 超高效液相色谱和 Agilent 6546 四极杆飞行时间质谱系统。色谱柱选用 Agilent InfinityLab Poroshell 120 EC-C18 (2.1 × 150 mm, 2.7 μm)。

样品前处理

取 20 μL 样品, 用甲醇/水 (体积比为 1:1) 逐级稀释至合适浓度后, 向其中加入 10 ng 同位素内标, 老化 30 min 后富集; 采用固相萃取装置, 使 4 mL 含 0.5% 氨水的甲醇溶液、4 mL 甲醇和 4 mL 高纯水依次通过 WAX 小柱, 将其活化, 控制流速为 5–10 mL/min; 然后上样, 并在上样完毕后加入 4 mL 醋酸铵水溶液 (25 mM) 冲洗小柱, 采用真空泵抽真空至小柱填料成流沙状; 然后向抽干的 WAX 小柱中依次加入 4 mL 甲醇和 4 mL 含 0.5% 氨水的甲醇溶液进行洗脱, 并将洗脱液收集到 15 mL 离心管中; 随后采用氮气吹干仪将洗脱液浓缩至 500 μL, 向其中加入 500 μL 高纯水, 然后加入 10 ng 进样内标 M2-PFOA, 涡旋振荡以将样品混匀; 将样品通过 0.22 μm 尼龙微孔滤膜过滤, 然后储存于 4 °C 冰箱中, 待上机分析。

液相色谱条件

色谱柱: InfinityLab Poroshell 120 EC-C18, 2.1 × 150 mm, 2.7 μm
柱温: 35 °C
流动相: A) NH₄Ac 水溶液 (2 mmol/L); B) 甲醇
流速: 0.3 mL/min
进样体积: 2 μL
梯度洗脱条件: 见表 1

表 1. 液相色谱梯度洗脱条件

时间 (min)	流动相 A (%)	流动相 B (%)	流速 (mL/min)
0.00	95.0	5.0	0.3
1.00	95.0	5.0	0.3
6.00	50.0	50.0	0.3
14.00	2.0	98.0	0.3
19.00	2.0	98.0	0.3
19.50	95.0	5.0	0.3
21.00	95.0	5.0	0.3

质谱条件

QTOF 质谱的主要采集参数如表 2 所示。

表 2. 飞行时间质谱仪器参数

参数	值
气体温度 (°C)	320
气体流量 (L/min)	8
喷雾器压强 (psig)	35
鞘流气温度 (°C)	350
鞘流气流量 (L/min)	11
毛细管电压 (V)	3000
喷嘴电压 (V)	1000
碎裂电压 (V)	110
锥孔电压 (V)	65
八极杆射频峰值 (V)	750
一级质量最小值 (m/z)	50
一级质量最大值 (m/z)	1500
一级质量扫描速率 (质谱图/秒)	4
二级质量最小值 (m/z)	50
二级质量最大值 (m/z)	1050
二级质量隔离宽度 (Da)	约 4
二级质量扫描速率 (质谱图/秒)	3
Auto MS/MS 模式碰撞能量 (V)	15、35
Target MS/MS 模式碰撞能量 (V)	10、20、40

数据采集方法

采用双喷射流 ESI 负电离模式，用全扫描 (TOF)、自动二级离子 (Auto MS/MS)、目标物二级离子 (Target MS/MS) 和全碎裂离子 (All Ions MS/MS) 模式进行质量全扫描的数据采集、优先特征 MS/MS 谱图采集以及低碰撞能量和高碰撞能量下的碎片离子扫描数据采集。在 Target MS/MS 模式下，根据导入的 m/z 和保留时间列表获取在多个碰撞能量值 (10 V、20 V 和 40 V) 下的目标分析物的 MS/MS 谱图。在 All Ions MS/MS 模式下，高分辨精确质量 (HRAM) 数据基于不同的条件进行采集，包括低碰撞能量 (0 V 和 15 V) 和高碰撞能量条件 (35 V)。低能量谱图主要显示化合物的母体离子，高能量谱图则显示母体及其碎片离子。

通过实时进样参考化合物来校正 TOF 质谱仪的质量准确度。负电离模式下的 TOF 对不同调谐离子的分辨率如下：在 m/z 112.9856 处为 32098，在 m/z 301.9981 处为 45852，在 m/z 601.9790 处为 56975，在 m/z 1033.9881 处为 61547，在 m/z 1333.9689 处为 63617。四极杆分辨率窗口设置为中等 (约 4 Da)。

数据分析方法

使用 Agilent MassHunter 定性分析软件 (10.0 版本) 的分子式查找 (FBF) 功能进行可疑物筛查。该分析将每个样品的质谱图与已建立的 PFAS 数据库中的精确质量、同位素丰度和同位素分布进行比较。可疑物筛选列表结合 NORMAN Suspect List Exchange (<https://www.norman-network.com/nds/SLE/>) 上的列表 NO.S46 和美国 EPA CompTox Chemistry Dashboard (<https://comptox.epa.gov/dashboard/chemical-lists/PFASTRUCTV2>) 上的 PFASTRUCTV2 列表。

为了提高置信度，仅对得分 ≥ 90 的分子特征通过保留时间和 m/z 值进一步采集 Target MS/MS (10 V、20 V 和 40 V) 数据以分析二级碎片信息。当结合 MS、MS/MS 及专有信息等对分子特征进行确认后，使用 Agilent MassHunter PCDL Manager B08.0.0 SP1 版收集谱图信息，以建立实验室 PFAS 列表和谱库 (PCDL)。该实验室自建 PCDL 可用作 MS/MS 谱图的来源，通过比较母离子和碎片的共流出特征对 All Ions MS/MS 数据文件快速处理，从而实现复杂基质样品中的 PFAS 进行高效筛查。

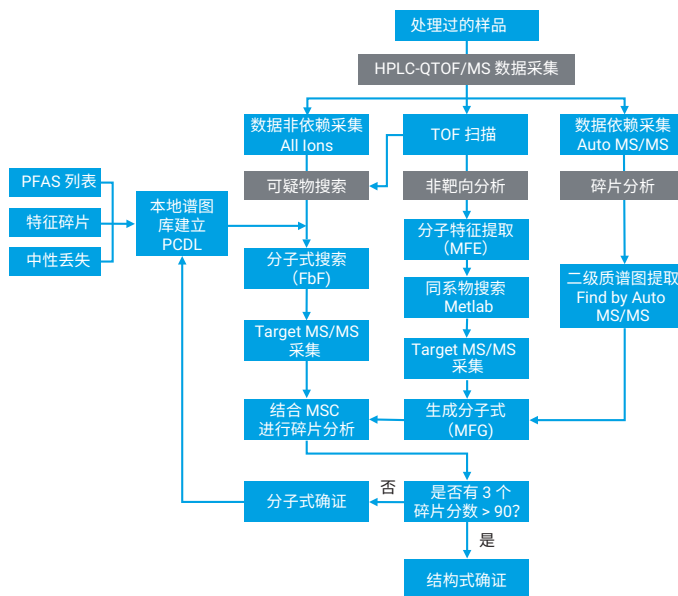


图 1. 非靶向数据处理工作流程

非靶向分析包括质量缺损过滤、 $-CF_2-$ 和 $-CF_2CF_2-$ 同系物搜索以及碎片标记。利用 Agilent MassHunter ProFinder 10.0 版从原始数据中进行批量分子特征提取（提取质量缺损为 0.85–1 和 0–0.15（向下舍入）的分子特征）。基于质量缺损进行过滤是由于绝大多数 PFAS 质量缺损都集中在整数 ± 0.15 的范围内，通过这种过滤可以剔除大量无关的其他物质。详细参数列于表 3 中。将导出的化合物交换文件 (.cef) 导入 Agilent MassHunter MassProfiler Professional 15.1 版中，以扣除目标样品中出现的存在于空白样品中的分子特征，并对提取的分子特征进行聚类分析和主成分分析。使用 Matlab 算法进行同系物搜索。利用先前见诸报道的特定类别的 PFAS 的质谱特征进行进一步分析，如中性丢失 HF (20 Da)、 CO_2 (44 Da)、N,N-二甲基氨基 (45 Da) 和特征碎片 $C_2F_5^-$ (m/z 119)、 $C_3F_7^-$ (m/z 169)、 $C_3H_8N^+$ (m/z 58)、 $C_4H_8N^+$ (m/z 70) 等。

图 1 展示了可疑物筛查和非靶向分析整体策略。每种化合物鉴定的置信水平根据 Schymanski 等人于 2014 年提出的标准确定^[9]：经过化学标准品验证的化合物为 Level 1 级；通过二级谱库或文献报道碎片加以验证能确定结构式的化合物为 Level 2 级；由碎片信息无法确定取代基位置的为 Level 3 级；只能确定分子式的为 Level 4 级；只包含 m/z 信息的则为 Level 5 级。使用 MassHunter Molecular Structure Correlator (MSC) 软件解析 MS/MS 谱图。MSC 软件根据采集到的二级质谱信息与公共化合物库中化合物母体分子结构理论预测的质谱碎片信息进行相关性分析。相关性得分越高，对应的化合物结构越可靠。为确保分析的准确性，仅将具有三个分数 > 90 的碎片确证为 Level 2 级。对于无法根据碎片确定结构式的分子特征，如部分调聚型 PFAS 由于 $-CH_2CH_2-$ 嵌入而使得 MS/MS 碎片较为复杂，根据标准将其确定为 Level 4 级的分子式。

表 3. 分子特征提取中 MassHunter ProFinder 的参数

参数	设置
峰高阈值	≥ 600
排除质量	112.9856、1033.9881
质量缺损 (Da)	-0.15 至 0.15
离子形态	-H、 $+CH_3COO$
同位素模型	常见有机分子
电荷数	1
保留时间对齐窗口 (min)	± 0.15
质量对齐窗口 (ppm)	± 7
峰高过滤阈值	≥ 6000
分子特征提取分值阈值	≥ 70
质量匹配偏差（以离子提取）(ppm)	± 10
保留时间偏差（以离子提取）(ppm)	± 0.15
积分器	Agile 2
绝对峰高（离子提取过滤阈值）	≥ 2000
分值阈值（目标物）	≥ 50
平均扫描阈值（保留谱图）	> 10% 峰高

结果与讨论

特征化合物提取与过滤

采用 MassHunter Profinder 软件 (10.0 SP1 版) 中的批量分子特征提取算法提取分子特征峰（质量缺损 -0.15 至 0.15）共计 1035 个（见图 2），然后利用 MPP 扣除空白样品中的分子特征峰，得到 591 个分子特征峰（见图 3）。借助空白样品过滤掉 43% 的分子特征峰，表明基于空白扣除和质量缺损筛选可辅助锁定潜在的 PFAS 分子特征峰。进一步采用 Matlab 算法对导出的分子特征峰进行同系物过滤（PFAS 常以同系物出现，含若干个 CF_2 ），进一步确定 PFAS 特征峰。

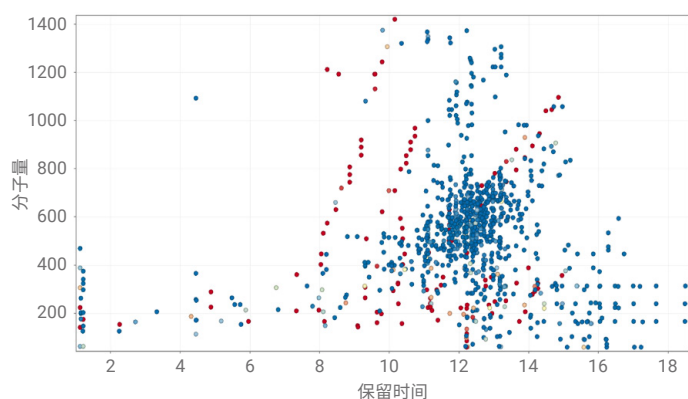


图 2. 氟表面活性剂和消防泡沫中的分子特征峰的分子量随保留时间的分布图

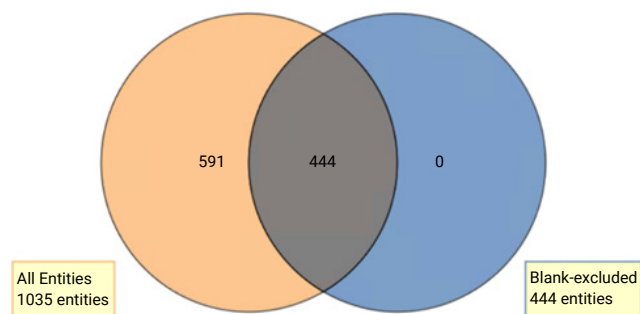


图 3. 样品和空白中分子特征峰经韦恩图分析后得到样品中独有的特征峰

PFAS 特征峰的结构解析与验证

针对上述峰特征提取和过滤后得到的 PFAS 特征峰，生成包含特征峰的保留时间和母离子精确质量数的 MS/MS 采集列表，然后采集二级谱图。采用 MSC 软件可对碎片结构进行预测，并结合母离子分子结构 Mol 文件对二级谱图进行解析。结果如图 4 所示。MSC 软件显示了各碎片的丰度、分数以及可能的结构，该结果中有 9 个碎片分数超过 90 分，表明推断的结构可信赖度较高。解析后的二级谱图如图 5 所示（确证为 PFHxSNO）。然后结合 Scifinder 专有搜索，对所识别的 PFAS 进行验证。采用上述方法在泡沫样品中识别出七十余种 PFAS，详见附录表 1。

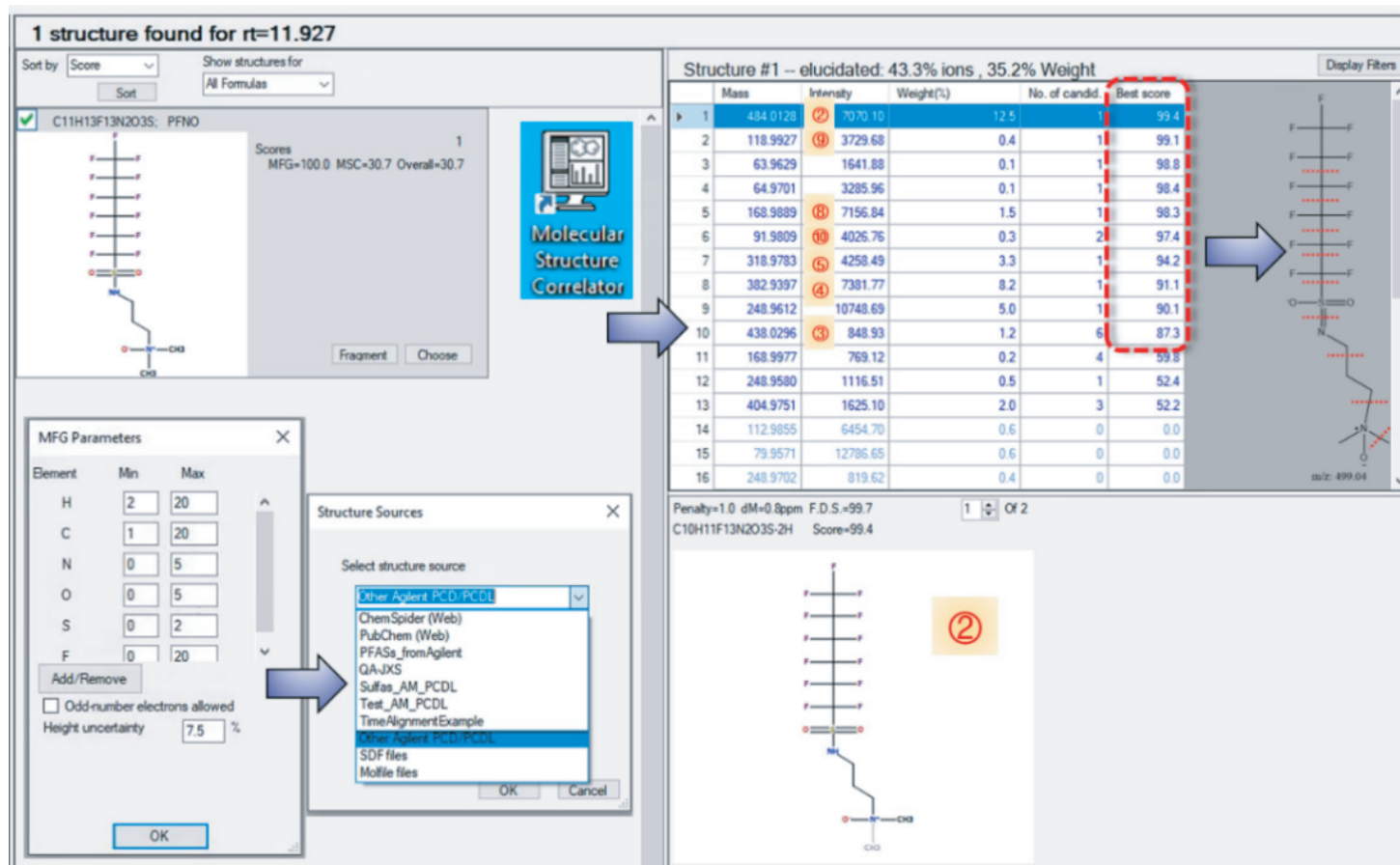


图 4. MSC 二级碎片结构解析结果 (PFHxSNO)

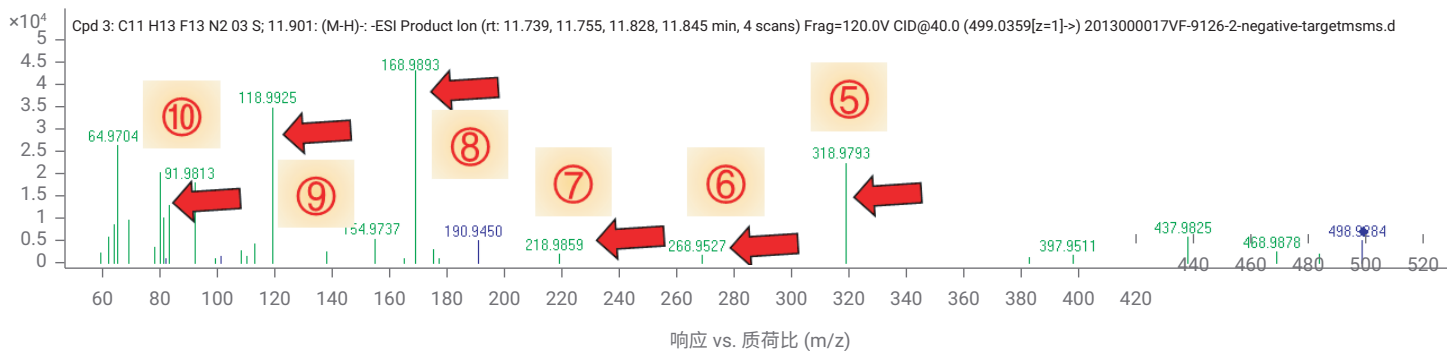
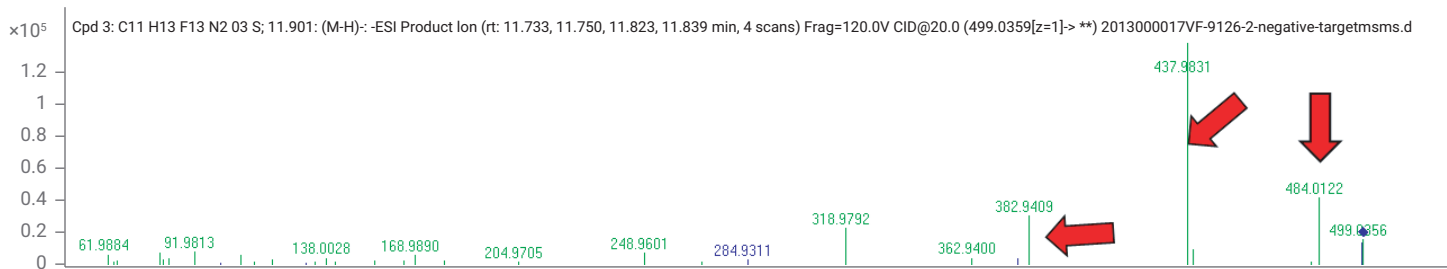
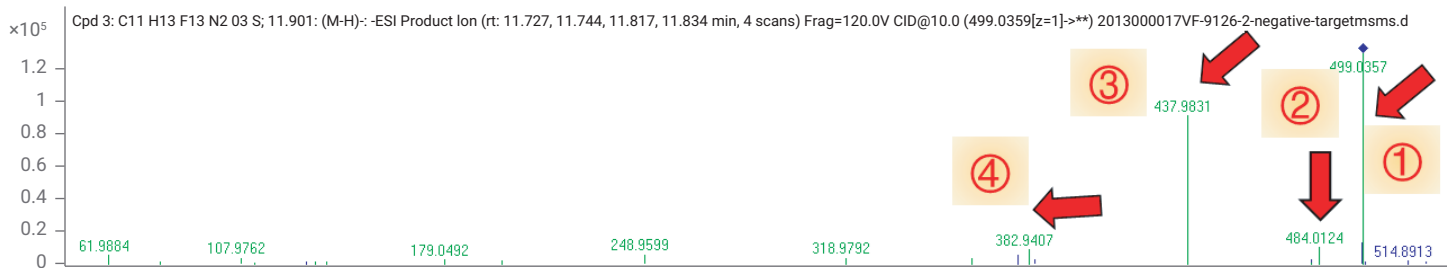


图 5. PFHxSNO 在不同碰撞能(10、20、40 V)下的二级质谱图

不同品牌 FS 样品和 AFFF 之间的关联

采用 MPP 软件中常用的工具 — 层次聚类和主成分分析来开展 PFAS 的源解析，研究不同品牌 FS 样品和 AFFF 之间的关系。结果发现，聚类分析有助于识别这些产品的从属关系以及内部相似性。中国替代 FS 产品（VF 品牌）提取的分子特征与国际品牌 C（图 6）高度相似，表明这两家供应商所用的合成工艺可能是相似的。另外，此分析还可反映 FS 样品生产工艺的变革。例如，对比图 6 中不同年份的 VF-9126 产品的特征峰，发现 VF-9126 生产工艺在 2013 年后发生了改变。

主成分分析显示了不同供应商之间不同制造工艺带来的影响，其将样品分为四组，如图 7 所示。第一主成分解释为不同的样品类型，其将 FS 样品和泡沫浓缩液样品分开；第二主成分可解释为不同的制造方法（即电氟化法和调聚法），并且其划分出的基于调聚法的 FS 产品，可解释为不同生产商所用的合成技术（如间隔基团）不同。



图 6. 分子特征峰聚类

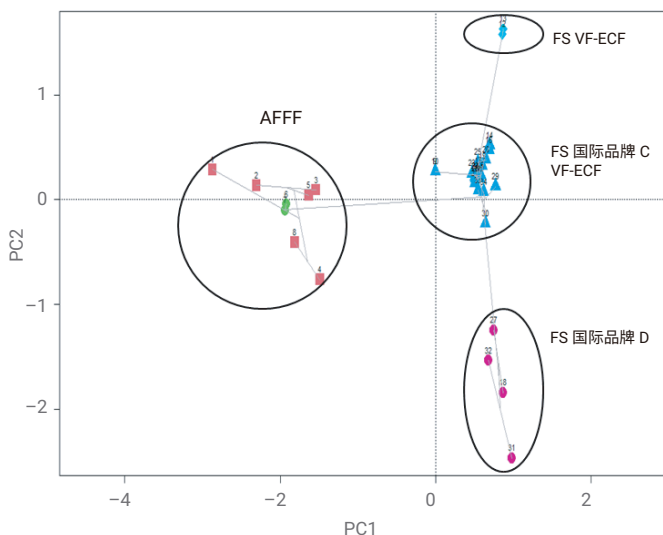


图 7. 分子特征峰主成分分析

受消防泡沫影响水体中可疑 PFAS 的筛查

利用识别出的 PFAS 建立 PCDL 谱库，可以高效鉴定受影响水体中的 PFAS。以 6:2 FTAB 为例，说明本研究中基于数据非依赖型采集模式的非靶向化合物鉴定过程。图 8 展示了建立的 PCDL 数据库中 6:2 FTAB 在 15 V 和 35 V 碰撞能量下的 MS/MS 质谱图。对样品中 6:2 FTAB 的母离子进行搜索，并将 All Ions 谱图中特征碎片离子与谱库进行比对。

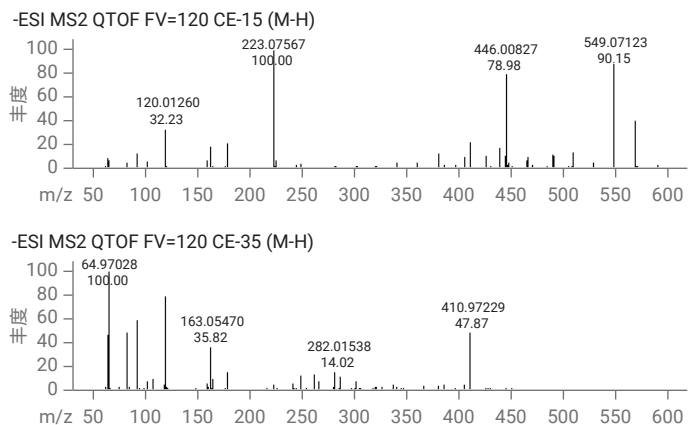


图 8. PCDL 谱库中 6:2 FTAB 的二级谱图

基于 6:2 FTAB 母离子和碎片离子的色谱图，考察同位素分布、碎片离子丰度、峰宽、信噪比、保留时间和峰形对称性等指标，计算得到母离子与各碎片离子的共流出得分。图 9-A 显示了 6:2 FTAB 母离子与碎片提取离子流图 (EIC) 的叠加图。6 个碎片 (包括 m/z 549.0725、 m/z 506.9569、 m/z 446.0091、 m/z 438.9909、 m/z 410.9730 和 m/z 223.0759) 的 EIC 与母离子的 EIC 呈现显著的共流出特性。将这 6 个碎片离子相对于母离子强度归一化，进一步发现这些碎片离子与母离子的共流出比值接近 1 (图 9-B)，表明这些碎片离子来源于 6:2 FTAB 母离子，由此实现了对 6:2 FTAB 的确证。

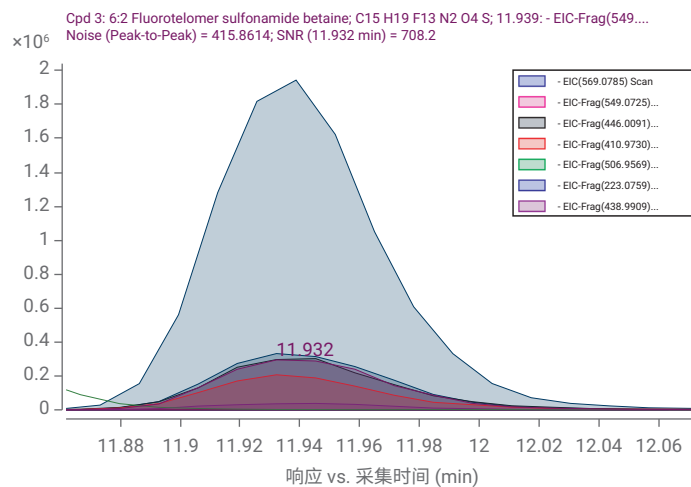


图 9-A. 6:2 FTAB 母离子和碎片提取离子流图

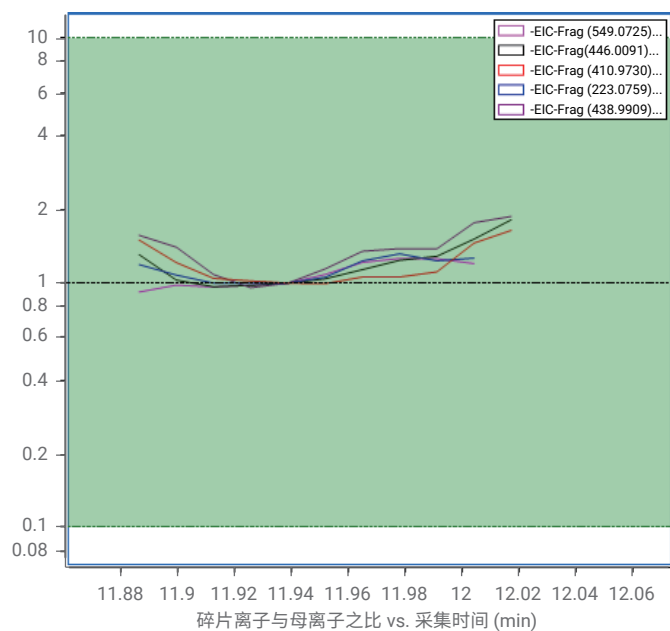


图 9-B. 6:2 FTAB 母离子和碎片离子共流出曲线

基于数据非依赖型采集模式的非靶向识别流程，初步鉴定 70 余种 PFAS 类化合物（见附录表 1）。该采集方法较传统模式效率更高，且借助所建立的 PFAS 精确质量数据库和谱图库，通过一次进样即可实现样本中未知 PFAS 的识别。随着 PFAS 谱库的进一步完善与扩充，所采集的数据可以用于回溯性分析，从而识别样本中更多的潜在 PFAS 类化合物。

结论

本研究建立了基于 UHPLC/QTOF-MS 的 PFAS 可疑和非靶向分析方法，通过建立的 PFAS 精确质量数据库与谱图库结合非依赖型数据采集模式，提高了筛查通量和效率，适用于离子型和极性 PFAS 的非靶向定性分析以及转化过程中 PFAS 中间产物识别。

参考文献

1. Barrett H, Du X, Houde M, et al. Suspect and nontarget screening revealed class-specific temporal trends (2000-2017) of poly- and perfluoroalkyl substances in St. Lawrence Beluga Whales. *Environ. Sci. Technol.*, 2021, 55(3): 1659-1671
2. 毛佳迪, 于南洋, 于红霞, 等. 环境中有机污染物的高通量筛查技术研究进展. *环境化学*, 2020, (1): 156-165
3. Liu Y, D'Agostino L A, Qu G, et al. High-resolution mass spectrometry (HRMS) methods for nontarget discovery and characterization of poly- and per-fluoroalkyl substances (PFASs) in environmental and human samples. *Trends in Anal. Chem.*, 2019, 121: 115420-115434
4. Pan Y, Wang J, Yeung L W Y, et al. Analysis of emerging per- and polyfluoroalkyl substances: Progress and current issues. *Trends in Anal. Chem.*, 2020, 124: 115481-115493
5. Schymanski E L, Jeon J, Gulde R, et al. Identifying small molecules via high resolution mass spectrometry: Communicating confidence. *Environ. Sci. Technol.*, 2014, 48(4): 2097-2098
6. Liu L, Lu M, Cheng X, Yu G, Huang J. Suspect screening and nontargeted analysis of per- and polyfluoroalkyl substances in representative fluorocarbon surfactants, aqueous film-forming foams, and impacted water in China. *Environ. Intern.* 2022, 167, 107398

附录表 1

编号	CAS 号	化合物	缩写	化学式	理论质量 (Da)	保留时间 (min)	[M-H] ⁻ 预期 m/z	碎片离子	置信度水平
1	30295-51-3	1-Octanesulfonamide, N-[3-(dimethylxidoamino)propyl]-1,1,2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8-heptadecafluoro- (9Cl, ACI)	PFASNO, n=7, I-PFOSNO	C13H13F17N2O3S	600.03754	13.217	599.0317	63.96229, 64.97024, 79.95736, 80.9652, 82.96089, 91.98112, 165.03413, 168.98936, 218.98607, 418.97367, 482.93577, 482.98039, 537.97982,	2
2	—	—	PFASNO, n=7, br-PFOSNO	C13H13F17N2O3S	600.03754	13.044	599.03138	63.96224, 64.97028, 79.95735, 80.9652, 82.96088, 91.98112, 165.03410, 168.98934, 218.98602, 418.97368, 482.93577, 482.98034, 537.97985,	3
3	178094-74-1	1-Heptanesulfonamide, N-[3-(dimethylxidoamino)propyl]-1,1,2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,7-pentadecafluoro- (9Cl, ACI)	PFASNO, n=6, I-PFHpSNO	C12H13F15N2O3S	550.04074	12.698	549.0341	63.96245, 64.97027, 79.95736, 80.96519, 82.96085, 91.98117, 168.98937, 218.98618, 368.9766, 487.9807,	2
4	—	—	PFASNO, n=6, br-PFHpSNO	C12H13F15N2O3S	550.04074	12.506	549.03362	63.96242, 64.97025, 79.95737, 80.96514, 82.96081, 91.98114, 168.98939, 218.98616, 368.9769, 487.9802,	3
5	30295-56-8	1-Hexanesulfonamide, N-[3-(dimethylxidoamino)propyl]-1,1,2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,6-tridecafluoro- (9Cl, ACI)	PFASNO, n=5, I-PFHxSNO	C11H13F13N2O3S	500.04393	11.993	499.03745	63.96249, 64.97035, 79.95728, 80.9653, 82.96095, 91.98121, 118.99253, 168.98965, 318.97978, 437.98352,	2
6	—	—	PFASNO, n=5, br-PFHxSNO	C11H13F13N2O3S	500.04393	11.876	499.03715	63.96241, 64.97032, 79.95725, 80.9655, 82.96099, 91.98126, 118.99255, 168.98968, 318.97978, 437.98353,	3
7	13417-01-1	1-Octanesulfonamide, N-[3-(dimethylamino)propyl]-1,1,2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8-heptadecafluoro- (7Cl, 8Cl, 9Cl, ACI)	PFASaAm, n=7, I-FOSaAm	C13H13F17N2O2S	584.04384	13.363	583.03672	63.96243, 64.97024, 82.9607, 118.99259, 163.05485, 168.98959, 183.06102, 218.98616, 268.98276, 418.97192,	2
8	—	—	PFASaAm, n=7, br-FOSaAm	C13H13F17N2O2S	584.04384	13.186	583.03646	63.96247, 64.97022, 82.9605, 118.99257, 163.05481, 168.98956, 183.06105, 218.98614, 268.98271, 418.97192,	3
9	67584-54-7	1-Heptanesulfonamide, N-[3-(dimethylamino)propyl]-1,1,2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,7-pentadecafluoro- (9Cl, ACI)	PFASaAm, n=6, I-FHpSaAm	C12H13F15N2O2S	534.04582	12.723	533.03845	64.97022, 82.9605, 118.99257, 268.98271, 368.9769,	2
10	—	—	PFASaAm, n=6, br-FHpSaAm	C12H13F15N2O2S	534.04582	12.51	533.03855	64.97023, 82.9601, 118.99251, 268.98278, 368.97692,	3

编号	CAS号	化合物	缩写	化学式	理论质量 (Da)	保留时间 (min)	[M-H] 预期 m/z	碎片离子	置信度水平
11	50598-28-2	1-Hexanesulfonamide, N-[3-(dimethylamino)propyl]-1,1,2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,6-tridecafluoro- (9CI, ACI)	PFASaAm, n=5, I-FHxSaAm	C11H13F13N2O2S	484.04934	11.979	483.04213	168.98918, 318.97972,	2
12	—	—	PFASaAm, n=5, br-FHxSaAm	C11H13F13N2O2S	484.04934	11.746	483.04221	168.98925, 318.97977,	3
13	754-91-6	1-Octanesulfonamide, 1,1,2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,8-heptadecafluoro- (6CI, 7CI, 8CI, 9CI, ACI)	PFASA, n=7, I-FOSA	C8H2F17N2O2S	498.95348	13.033	497.9452	77.9656, 168.98954, 318.9791, 418.9732,	2
14	—	—	PFASA, n=7, br-FOSA	C8H2F17N2O2S	498.95348	12.969	497.94645	77.9652, 168.98952, 318.9797, 418.9735,	3
15	82765-77-3	1-Heptanesulfonamide, 1,1,2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,7-pentadecafluoro- (9CI, ACI)	PFASA, n=6, I-FHpSA	C7H2F15N2O2S	448.95667	12.543	447.94929	77.9651, 168.98955, 368.97681,	2
16	—	—	PFASA, n=6, br-FHpSA	C7H2F15N2O2S	448.95667	12.335	447.9496	77.96515, 168.98948, 368.97685,	3
17	41997-13-1	1-Hexanesulfonamide, 1,1,2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,6-tridecafluoro- (9CI, ACI)	PFASA, n=5, I-FHxSA	C6H2F13N2O2S	398.95987	11.813	397.9525	77.96553, 168.98942,	2
18	—	—	PFASA, n=5, br-FHxSA	C6H2F13N2O2S	398.95987	11.621	397.95242	77.96547, 168.98935,	3
19	2355-31-9	Glycine, N-[(1,1,2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,8-heptadecafluorooctyl) sulfonyl]-N-methyl- (ACI)	I-N-MeFOSAA	C11H6F17N2O4S	570.9742	12.577	569.96713	—	4
20	—	—	br-N-MeFOSAA	C11H6F17N2O4S	570.9742	12.402	569.96741	—	4
21	2991-50-6	Glycine, N-ethyl-N-[(1,1,2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,8-heptadecafluorooctyl)sulfonyl]- (ACI)	N-EtFOSAA	C12H8F17N2O4S	584.99026	14.091	583.98294	—	4
22	31506-32-8	1-Octanesulfonamide, 1,1,2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,8-heptadecafluoro-N-methyl- (8CI, 9CI, ACI)	I-N-MeFOSA	C9H4F17N2O2S	512.96889	14.012	511.96168	—	4
23	—	—	br-N-MeFOSA	C9H4F17N2O2S	512.96889	13.887	511.96182	—	4
24	213181-78-3	1-Octanesulfonamide, 1,1,2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,8-heptadecafluoro-N,N-dimethyl- (9CI, ACI)	N,N-Me2FOSA	C10H6F17N2O2S	526.98447	14.291	525.9773	—	4
25	335-67-1	Octanoic acid, 2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,8-pentadecafluoro- (ACI)	I-PFOA	C8HF15O2	413.9741	11.217	412.96684	168.98951, 218.98646, 368.97637,	1
26	—	—	br-PFOA	C8HF15O2	413.9741	11.004	412.96638	168.98955, 218.98638, 368.97631,	3
27	375-85-9	Heptanoic acid, 2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,7-tridecafluoro- (ACI)	I-PFHpA	C7HF13O2	363.9769	10.415	362.96945	168.98951, 318.97921,	1
28	—	—	br-PFHpA	C7HF13O2	363.9769	10.198	362.96929	168.98945, 318.97927,	3

编号	CAS号	化合物	缩写	化学式	理论质量 (Da)	保留时间 (min)	[M-H] 预期 m/z	碎片离子	置信度水平
29	307-24-4	Hexanoic acid, 2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,6-undecafluoro- (ACI)	I-PFHxA	C6HF11O2	313.98009	9.395	312.97288	268.98275,	1
30	——	——	br-PFHxA	C6HF11O2	313.98009	9.215	312.97279	268.98262,	3
31	2706-90-3	Pentanoic acid, 2,2,3,3,4,4,5,5,5-nonafluoro- (ACI)	I-PFPeA	C5HF9O2	263.98328	8.079	262.97594	218.98623	1
32	375-22-4	Butanoic acid, 2,2,3,3,4,4,4-heptafluoro- (ACI)	I-PFBA	C4HF7O2	213.98648	6.01	212.9792	168.9831	1
33	422-64-0	Propanoic acid, 2,2,3,3,3-pentafluoro- (ACI)	I-PFPaA	C3HF5O2	163.98967	2.834	162.98234	118.99265	1
34	76-5-1	Acetic acid, 2,2,2-trifluoro- (ACI)	TFA	C2HF3O2	113.99286	1.37	112.9856	68.99574	1
35	68259-12-1	1-Nonanesulfonic acid, 1,1,2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,9,9,9-nonadecafluoro- (9CI, ACI)	I-PFNS	C9HF19O3S	549.9343	12.431	548.92694	79.95727	1
36	——	——	br-PFNS	C9HF19O3S	549.9343	12.197	548.92702	79.95713	3
37	1763-23-1	1-Octanesulfonic acid, 1,1,2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,8-heptadecafluoro- (8CI, 9CI, ACI)	I-PFOS	C8HF17O3S	499.93792	11.867	498.93071	79.95724. 129.95407. 179.95095. 229.94724. 268.98237. 279.94509. 329.94133.	1
38	——	——	br-PFOS	C8HF17O3S	499.93792	11.671	498.93022	79.95714. 129.95422. 179.95099. 229.94721. 268.98212. 279.94541. 329.94113.	3
39	375-92-8	1-Heptanesulfonic acid, 1,1,2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,7-pentadecafluoro- (9CI, ACI)	I-PFHpS	C7HF15O3S	449.94073	11.237	448.93353	79.95723, 98.95578,	1
40	——	——	br-PFHpS	C7HF15O3S	449.94073	11.012	448.93341	79.95728	3
41	355-46-4	1-Hexanesulfonic acid, 1,1,2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,6-tridecafluoro- (9CI, ACI)	I-PFHxS	C6HF13O3S	399.94416	10.453	398.93675	79.9574, 98.95573, 118.99248,	1
42	——	——	br-PFHxS	C6HF13O3S	399.94416	10.253	398.9366	79.95731	3
43	2706-91-4	1-Pentanesulfonic acid, 1,1,2,2,3,3,4,4,5,5,5-undecafluoro- (9CI, ACI)	I-PFPeS	C5HF11O3S	349.94707	9.527	348.93956	79.95742	1
44	——	——	br-PFPeS	C5HF11O3S	349.94707	9.322	348.9398	79.95733	3
45	375-73-5	1-Butanesulfonic acid, 1,1,2,2,3,3,4,4,4-nonafluoro- (9CI, ACI)	I-PFBS	C4HF9O3S	299.95027	8.382	298.94299	79.95744	1
46	62880-95-9	1-Propanesulfonic acid, 2-methyl-2-[[1-oxo-3-[(3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,8-tridecafluorooctyl)thio]propyl]amino]- (9CI, ACI)	6:2 FtTAoS	C15H18F13NO4S2	587.04822	12.329	586.04119	79.95736, 135.01214, 152.03869, 206.04925,	2
47	1513864-10-2	1-Propanesulfonic acid, 2-methyl-2-[[1-oxo-3-[(3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,8-tridecafluorooctyl)sulfinyl]propyl]amino]- (ACI)	6:2 FtSOAoS	C15H18F13NO5S2	603.04202	11.159	602.03488	206.04954, 256.03204	2

编号	CAS号	化合物	缩写	化学式	理论质量 (Da)	保留时间 (min)	[M-H] 预期 m/z	碎片离子	置信度水平
48	1911606-13-7	1-Propanesulfonic acid, 2-methyl-2-[[1-oxo-3-[(3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,8-tridecafluorooctyl)sulfonyl]propyl]amino]- (ACI)	6:2 FtSO2AoS	C15H18F13NO6S2	619.03637	11.489	618.02952	—	4
49	80475-32-7	1-Octanesulfonamide, N-[3-(dimethyloxidoamino)propyl]-3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,8-tridecafluoro- (9CI, ACI)	6:2 FTNO	C13H17F13N2O3S	528.07616	12.211	527.06903	82.96081, 120.01249, 181.06516, 446.00965, 447.04208, 507.06186,	2
50	34455-22-6	1-Octanesulfonamide, N-[3-(dimethylamino)propyl]-3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,8-tridecafluoro- (9CI, ACI)	6:2 FTsAm	C13H17F13N2O2S	512.0807	12.397	511.07352	64.97027, 82.96085, 165.07032, 283.02329, 327.07377, 347.07955, 367.08623, 383.08228, 431.04813, 451.05435, 491.06681,	2
51	76201-56-4	1-Propanaminium, 2-hydroxy-N, N-dimethyl-3-sulfo-N-[3-[(3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,8-tridecafluorooctyl)sulfonyl]amino]propyl]-, inner salt (9CI, ACI)	EtOH-AmPr-PFHxSAPrS	C16H23F13N2O6S2	650.07952	11.784	649.07238	182.04925, 303.06944, 629.06549	2
52	27619-97-2	1-Octanesulfonic acid, 3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,8-tridecafluoro- (8CI, 9CI, ACI)	6:2 FTS	C8H5F13O3S	427.97596	11.096	426.96816	80.9652, 406.96135,	1
53	39108-34-4	1-Decanesulfonic acid, 3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,9,9,10,10,10-heptadecafluoro- (9CI, ACI)	8:2 FTS	C10H5F17O3S	527.96808	12.36	526.9609	80.96524, 506.95484,	2
54	120226-60-0	1-Dodecanesulfonic acid, 3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,9,9,10,10,11,11,12,12,12-heneicosaflluoro- (9CI, ACI)	10:2 FTS	C12H5F21O3S	627.9625	13.247	626.9547	80.96521, 606.94836,	2
55	149339-57-1	Propanoic acid, 3-[(3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,8-tridecafluorooctyl)thio]- (9CI, ACI)	6:2 FtTP	C11H9F13O2S	452.01263	12.25	451.00552	105.00157, 298.95825, 318.96448, 338.9707, 378.98316,	2
56	2089110-04-1	Propanoic acid, 3-[(3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,8-tridecafluorooctyl)sulfonyl]- (ACI)	6:2 FtTP-SO2	C11H9F13O4S	484.0006	11.022	482.9938	—	4
57	34455-29-3	1-Propanaminium, N-(carboxymethyl)-N,N-dimethyl-3-[[[(3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,8-tridecafluorooctyl)sulfonyl]amino]-, inner salt (9CI, ACI)	6:2 FTAB	C15H19F13N2O4S	570.08696	11.917	569.07982	120.01263, 223.07573, 410.97231, 446.00829,	2
58	34455-21-5	1-Propanaminium, N-(carboxymethyl)-3-[[[(3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,9,9,10,10,10-heptadecafluorodecyl)sulfonyl]amino]-N,N-dimethyl-, inner salt (9CI, ACI)	8:2 FTAB	C17H19F17N2O4S	670.08042	13.208	669.07331	120.01267, 223.07591, 546.00299,	2

编号	CAS号	化合物	缩写	化学式	理论质量 (Da)	保留时间 (min)	[M-H] 预期 m/z	碎片离子	置信度水平
59	34455-35-1	1-Propanaminium, N-(carboxymethyl)-3-[[[(3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,9,9,10,10,11,11,12,12,12-heneicosafuorododecyl) sulfonyl]amino]-N,N-dimethyl-, inner salt (9Cl, ACI)	10:2 FTAB	C19H19F21N2O4S	770.07329	14.098	769.06612	120.01247, 223.07565, 645.99671	2
60	271794-15-1	Benzenesulfonic acid, 4-[[[3,4,4,4-tetrafluoro-2-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluoromethyl) ethyl]-1,3-bis(trifluoromethyl)-1-buten-1-yl]oxy]- (ACI)	OBS	C15H5F17O4S	603.96472	12.394	602.9576	171.98358, 464.96601,	2
61	29765-95-5	1-Octanesulfonamide, 3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,8-tridecafluoro- (8Cl, 9Cl, ACI)	6:2 FTSAm	C8H6F13NO2S	426.99031	12.279	425.9831	79.981213, 405.97672, 385.97071, 365.96473, 345.96916	2
62	123708-11-2	Acetic acid, 2-[[[(3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,8-tridecafluorooctyl)thio]- (ACI)	6:2 FTSEA	C10H7F13O2S	437.99592	11.755	436.989	90.98561, 272.96113	2
63	34451-26-8	1-Octanethiol, 3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,8-tridecafluoro- (9Cl, ACI)	6:2 FTSH	C8H5F13S	379.99044	12.776	378.98312	358.97662, 338.97019	2
64	88992-45-4	1-Propanaminium, 2-hydroxy-N,N,N-trimethyl-3-[[[(3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,8-tridecafluorooctyl)thio]-, chloride (1:1) (ACI)	6:2 FTSHA	C14H18F13NOS	495.09015	11.232	496.0973	437.0240, 392.9978	2
65	64972-10-7	Propanamide, 3-[[[(3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,8-tridecafluorooctyl)thio]- (9Cl, ACI)	6:2 FTTh-PrAm	C11H10F13NOS	451.02755	13.289	452.0346	435.0080, 407.0130, 392.9971	2
66	—	—	—	C16H19F13N2O4S	582.08579	12.766	581.07916	441.03238, 378.98362, 275.97249, 255.96673, 141.06707	4
67	—	—	—	C13H14F13NO3S	511.04868	13.017	570.06259	357.97687, 132.01258, 61.98833	4
68	—	—	—	C11H6F9NOS	371.00264	13.217	369.9947	349.9883, 329.9821, 309.9759, 289.9701, 241.9687	4
69	—	—	—	C9H6F13NO3S	454.9859	11.156	453.9786	—	4
70	—	—	—	C9H6F13NO4S	470.9806	12.288	469.9733	—	4
71	—	—	—	C11H6F17NO4S	570.9742	13.167	569.9669	—	4
72	—	—	—	C13H14F13NO5S2	575.0101	11.242	634.024	—	4
73	—	—	—	C11H10F13NO4S	499.0119	11.162	498.0049	—	4

查找当地的安捷伦客户中心:

www.agilent.com/chem/contactus-cn

免费专线:

800-820-3278, 400-820-3278 (手机用户)

联系我们:

LSCA-China_800@agilent.com

在线询价:

www.agilent.com/chem/erfq-cn



微信搜一搜

安捷伦视界

www.agilent.com

DE00124527

安捷伦对本资料可能存在的错误或由于提供、展示或使用本资料所造成的间接损失不承担任何责任。

本文中的信息、说明和指标如有变更,恕不另行通知。

© 安捷伦科技(中国)有限公司, 2023
2023年12月21日, 中国出版
5994-6954ZHCN

