

# 使用 Agilent Bond Elut Carbon S PFAS 固相萃取小柱分析土壤中的全氟和多氟烷基化合物

## 作者

Matthew Giardina 博士  
安捷伦科技有限公司

## 摘要

本应用简报介绍了一种使用 Agilent Bond Elut Carbon S PFAS 固相萃取 (SPE) 小柱分析土壤中全氟/多氟烷基化合物 (PFAS) 的多组分分析方法的开发和评估。这些小柱采用 PFAS 残留极低的吸附剂和柱体组件制成，专为 PFAS 分析而开发。Carbon S 能有效降低基质干扰，同时确保目标物获得高回收率，从而实现低浓度检测。该方法包含溶剂萃取、SPE 净化，以及 LC/MS/MS 分析步骤。针对所检测的 59 种 PFAS，低加标浓度下的平均回收率为 99.9%，相对标准偏差为 13.5%，在低浓度 (ng/g) 下实现了出色的回收率，且未检出超过定量限的 PFAS 残留。结果还表明，使用 Bond Elut Carbon S 分析 PFAS 可以减少基质干扰，从而改善色谱峰形和保留时间一致性。

## 前言

土壤中的有机和无机成分可形成各种各样的色素<sup>[1]</sup>。在萃取过程中，部分色素可能与目标分析物一同被萃取到有机溶剂中。若不去除这些色素，直接进样色素含量较高的样品提取物进行分析会导致多种基质效应，包括 LC/MS/MS 分析中的离子抑制或增强效应，以及样品流路和质谱离子源中基质沉积物积聚。因此，在进样分析之前通过净化步骤去除共萃取物，同时不影响目标化合物的回收率至关重要。

石墨化炭黑 (GCB) 一直以来被广泛应用于样品前处理，以有效去除色素。与 GCB 相比，Carbon S 可提供相当或更出色的基质色素去除效果，同时还能显著提高一些 GCB 选择性分析物（在 GCB 上具有强保留性）的回收率。与传统的 GCB 吸附剂相比，Carbon S 吸附剂在分析物回收率和色素去除效率之间实现了更好的平衡<sup>[2]</sup>。此外，用于 PFAS 分析的 Bond Elut Carbon S 专为 PFAS 应用而打造，可确保常见 PFAS 污染物的含量低于常规报告限值。

本研究使用 PFAS 分析专用 Bond Elut Carbon S 小柱对砂质壤土、芦苇泥炭和表土中的 59 种 PFAS 进行萃取后净化，以考察小柱的性能。萃取步骤与文献中报道的已验证方法类似，例如 ASTM D7968-17a<sup>[3]</sup>、ASTM D8535-23<sup>[4]</sup> 和 CMA/3/D<sup>[5]</sup>，这些方法均采用有机溶剂（如甲醇或碱性甲醇）进行基质萃取，然后进行提取物过滤或吸附剂纯化。本研究开发的方法使用 10 mL 氨化甲醇对 2 g 样

品进行萃取，然后使用 Carbon S 进行通式净化，再进行 LC/MS/MS 定量分析。

## 实验部分

### 化学品与试剂

天然 PFAS 标准品和同位素标记的类似物以单标形式购自 Wellington Laboratories, Inc. (Guelph, ON, Canada)。HPLC 级甲醇 (MeOH) 购自 Honeywell (Muskegon, MI, USA)。试剂级乙酸、乙酸铵和氢氧化铵购自 Sigma-Aldrich (St Louis, MO, USA)。

### 溶液与标准品

本研究中考察的 59 种目标化合物列于附录 A。使用甲醇配制所有化合物的目标物加标溶液，除 N-MeFOSA、N-EtFOSA、6:2/8:2 diPAP、8:8 PFPi 和 8:2 diPAP 的浓度为 500 ng/mL，MeFOSE、EtFOSE、PFHxDA、PFODA 和 diSAMPAP 的浓度为 1000 ng/mL，以及 6:2 FTCA、8:2 FTCA 和 10:2 FTCA 的浓度为 2500 ng/mL 外，其余化合物的浓度均为 250 ng/mL。

使用甲醇配制附录 A 中所列化合物的同位素标记类似物的内标加标溶液。除 d<sub>7</sub>-MeFOSE 和 d<sub>9</sub>-EtFOSE 的浓度为 1000 ng/mL，<sup>13</sup>C<sub>2</sub>-6:2 FTCA、<sup>13</sup>C<sub>2</sub>-8:2 FTCA 和 <sup>13</sup>C<sub>2</sub>-10:2 FTCA 的浓度为 2000 ng/mL 外，其余同位素的浓度均为 250 ng/mL。

使用甲醇配制同位素性能评估标样，其中包含浓度分别为 500、500 和 1500 ng/mL 的 <sup>13</sup>C<sub>3</sub>-PFBA、<sup>13</sup>C<sub>2</sub>-PFOA 和 <sup>13</sup>C<sub>4</sub>-PFOS。

使用甲醇和水的 80/20 (v/v) 混合溶液配制校准标样。除氟调羧酸和磺酰胺乙醇外，附录 A 中所有目标化合物均在 0.025–2.5 ng/mL 范围内使用六个标样浓度进行校准。6:2 FTCA、8:2 FTCA 和 10:2 FTCA 的浓度范围为 0.25–25 ng/mL。EtFOSE 和 MeFOSE 的浓度范围为 0.1–10 ng/mL。除标记的氟调羧酸和磺酰胺乙醇外，附录 A 中所有类似物在标样中的同位素类似物浓度均为 0.5 ng/mL。<sup>13</sup>C<sub>2</sub>-6:2 FTCA、<sup>13</sup>C<sub>2</sub>-8:2 FTCA 和 <sup>13</sup>C<sub>2</sub>-10:2 FTCA 的浓度为 4 ng/mL。d<sub>9</sub>-EtFOSE 和 d<sub>7</sub>-MeFOSE 的浓度为 2 ng/mL。同位素性能评估标样 <sup>13</sup>C<sub>3</sub>-PFBA、<sup>13</sup>C<sub>2</sub>-PFOA 和 <sup>13</sup>C<sub>4</sub>-PFOS 的浓度分别为 5、5 和 15 ng/mL。

在萃取当天制备含 1% 氨的甲醇溶液 (v/v)。

### 设备与材料

使用包括 Agilent 1290 Infinity II 高速泵 (G7120A)、Agilent 1290 Infinity II Multisampler (G7167B) 和 Agilent 1290 Infinity II 大容量柱温箱 (G7167B) 的 Agilent 1290 Infinity II 液相色谱系统进行样品分析。使用 Agilent InfinityLab 无 PFC HPLC 转换工具包 (部件号 5004-0006) 对液相色谱系统进行了改进，以用于 PFAS 分析。该液相色谱系统与配备安捷伦喷射流电喷雾离子源的 Agilent 6470B 三重四极杆 LC/MS 联用。采用 Agilent MassHunter 工作站软件进行数据采集和分析。使用安捷伦 PFAS MRM 数据库 (G1736AA) 优化 MRM 设置。

用于 PFAS 萃取和分析的消耗品列于表 1<sup>[6,7]</sup>。使用三种样品基质进行评估: 干净的砂质壤土 (Supelco 部件号 CLNSOIL3)、深色芦苇泥炭和有机表土。在萃取过程中, 使用 150 型多功能旋转器 (Scientific Industries, Springfield, MA) 对样品管进行完全倒置混匀。

### 仪器条件

HPLC 条件列于表 2, 质谱条件列于表 3。目标化合物和同位素的 MRM 离子对列于附录 A。图 1 为 2 ng/mL 标样的提取目标物产物离子色谱图。

表 1. 适用于 PFAS 分析的消耗品和备件

安捷伦消耗品和备件	部件号
用于 PFAS 分析的 Carbon S 小柱, 250 mg, 6 mL	5610-2247
聚丙烯自动进样器螺口样品瓶, 2 mL, 以及螺口盖	5191-8151 和 5191-8121
离心管和管盖, 15 mL	5610-2039
InfinityLab PFC 延迟柱, 4.6 × 30 mm	5062-8100
ZORBAX RRHD Eclipse Plus C18 色谱柱, 2.1 × 100 mm, 1.8 μm	959758-902
Vac Elut SPS 24 真空萃取装置, 带收集架, 可容纳 10 × 75 mm 试管	12234003
12 或 15 mL 锥形试管的收集架和漏斗套件, 用于 Vac Elut SPS 24 真空萃取装置	12234027

表 2. HPLC 条件

参数	设定值
流动相	A) 5 mM 乙酸铵水溶液 B) 甲醇
进样量	5 μL
柱温	30 °C
流速	0.400 mL/min
梯度	时间 (min) % A % B
	0 85 15
	1.00 85 15
	1.50 45 55
	5.50 30 70
	7.00 20 80
	12.00 0 100
	14.40 0 100
14.50 85 15	

表 3. 质谱条件

参数	设定值
MS/MS	6470B 三重四极杆 LC/MS
极性	负
干燥气	230 °C, 4 L/min
鞘气	250 °C, 12 L/min
雾化器气体	15 psi
毛细管电压	2500 V
喷嘴电压	0 V

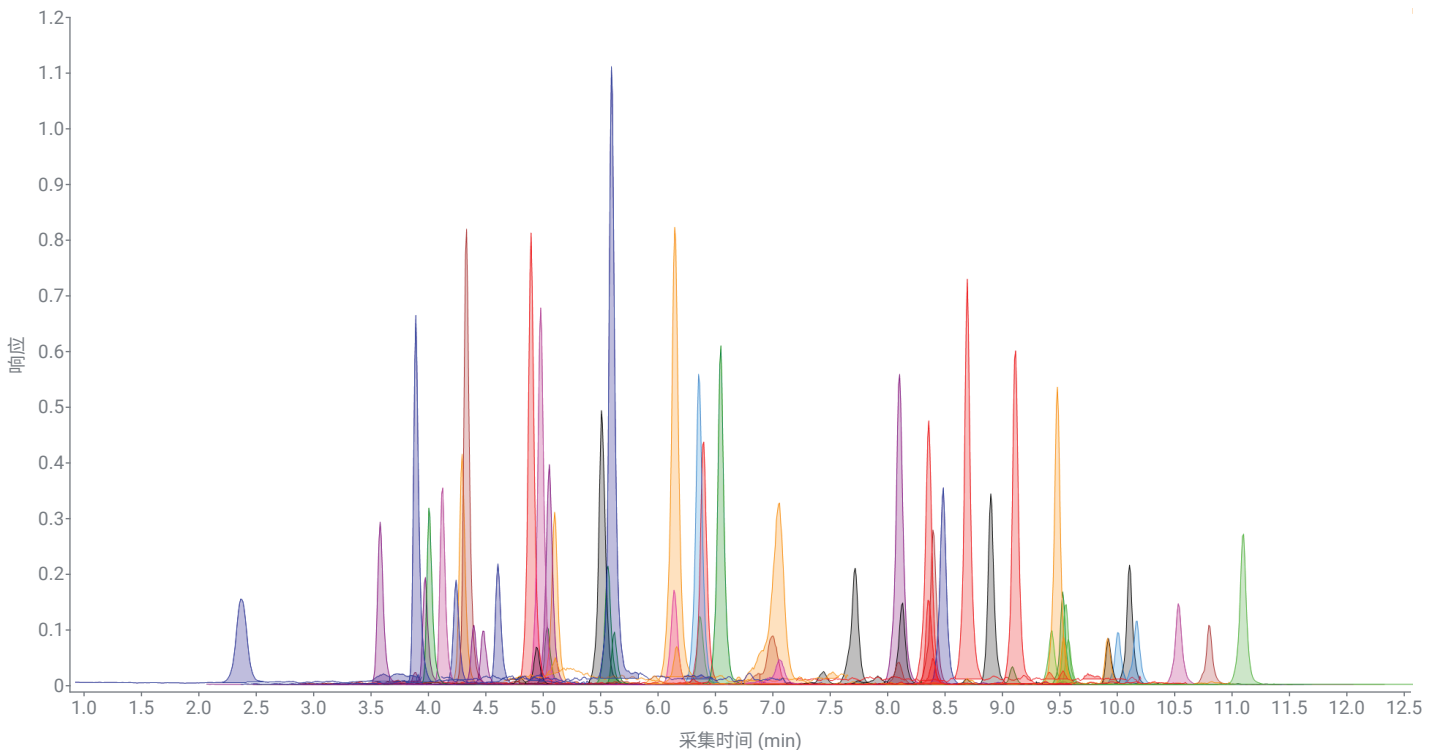


图 1. 大多数化合物 (附录 A 中所列的化合物) 的 2 ng/mL 校准标样的目标定量离子色谱图

## 校准和定量

使用稳定同位素稀释法进行定量，该方法根据同位素类似物的响应和浓度实现目标化合物的响应和浓度测量<sup>[6]</sup>。每种目标化合物相应的同位素类似物列于附录 A。使用  $1/x$  加权线性最小二乘回归模型对响应曲线进行拟合，并且包括原点 (0,0)。对以盐形式提供的 PFAS 标准品的浓度进行了校正，以获得溶液中的酸浓度。

## 样品前处理

除了将针头过滤步骤替换为使用 PFAS 分析专用 Carbon S 小柱进行通过式净化外，样品前处理严格遵循 ASTM D7968-17a 中的萃取流程。萃取流程步骤参见图 2。

## 方法性能评估

首先通过测量两种加标浓度下砂质壤土基质五次重复萃取的回收率准确度和精密度来评估方法性能。然后检测泥炭和表土样品的残留 PFAS。通过比较使用和不使用 Carbon S 净化的样品提取物的结果来评估方法性能的改进。

用 5  $\mu\text{L}$ （低浓度加标）或 50  $\mu\text{L}$ （高浓度加标）目标物加标溶液和 20  $\mu\text{L}$  同位素类似物加标溶液对砂质壤土样品进行加标。对于低浓度加标，2 g 土壤中除 N-MeFOSA、N-EtFOSA、6:2/8:2 diPAP、8:8 PFPi 和 8:2 diPAP 的浓度为 1.25 ng/g，

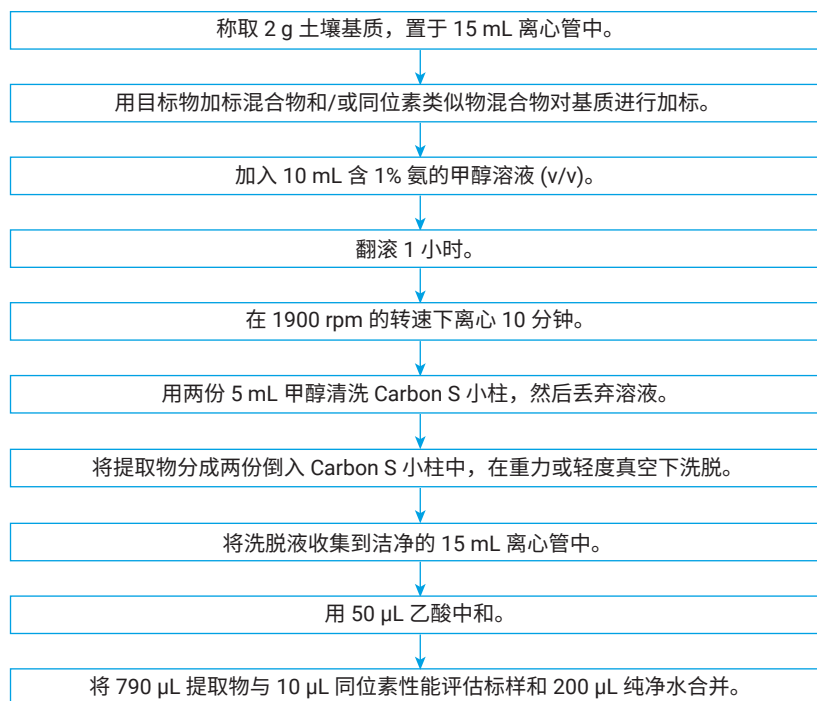


图 2. 本研究遵循的土壤萃取方案

EtFOSE、N-MeFOSE、PFHxDA、PFODA 和 diSAmPAP 的浓度为 2.5 ng/g，以及 6:2 FTCA、8:2 FTCA 和 10:2 FTCA 的浓度为 6.25 ng/g 外，其余大多数 PFAS 目标化合物的浓度为 0.625 ng/g。高浓度加标土壤中目标化合物的浓度为低浓度加标情况下相应浓度的 10 倍。

样品组中还包括方法空白。此外，还分析了小柱空白（从甲醇冲洗步骤中收集的冲洗溶液）和基质空白，确保在样品分析之前系统和小柱不受 PFAS 污染。

## 结果与讨论

### 校准

为了评估方法校准质量，根据响应曲线计算每种目标化合物在各校准浓度下的计算浓度（图 3）。对于校准浓度 2-6，准确

度范围为 75.1%–100.0%，平均准确度为 95.4%。对于校准浓度 1，准确度范围为 66.3%–99.9%，平均准确度为 89.5%。使用独立于校准溶液的目标物加标溶液制备质控标样<sup>[5]</sup>，大多数化合物的浓度为 2 ng/mL。质控标样的准确度范围为

74.7%–99.7%，平均准确度为 94.1%。这些结果如图 4 所示，表明在研究所采用的浓度范围内具有良好的校准准确度。

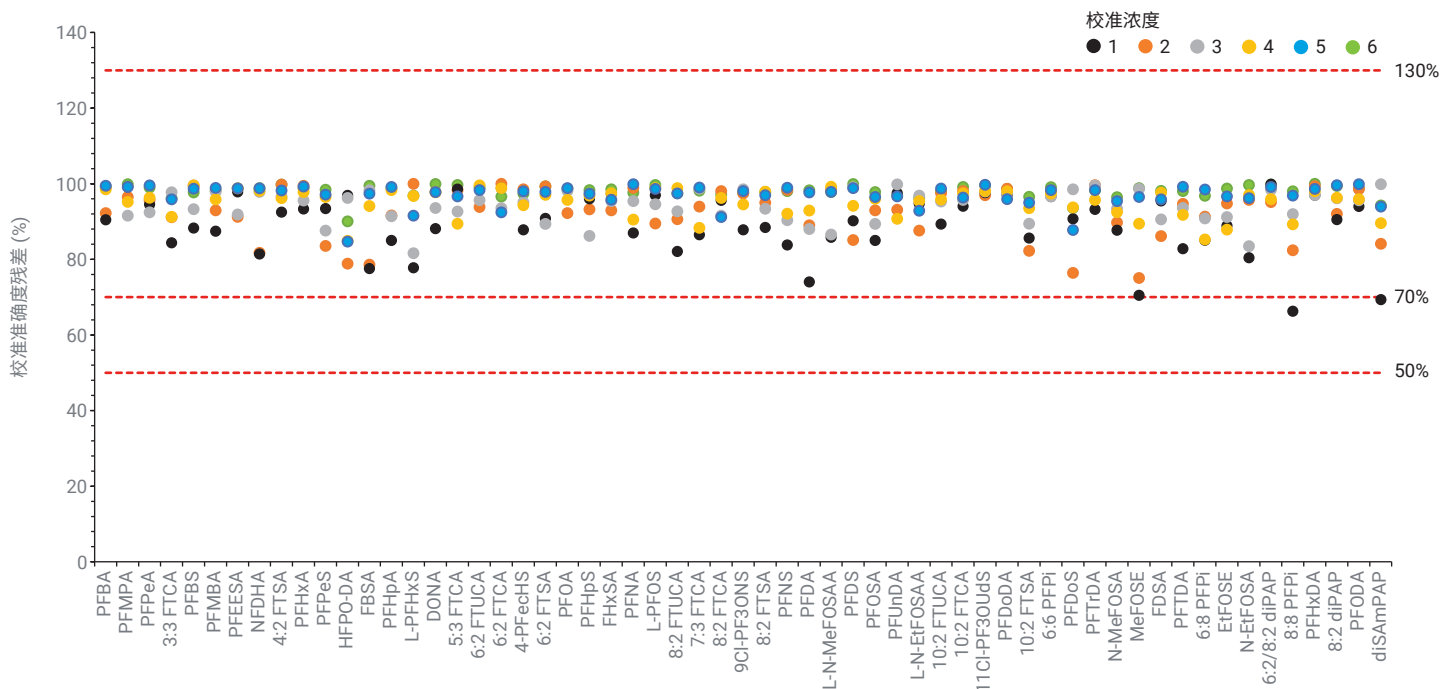


图 3. 校准浓度 1-6 的计算浓度准确度

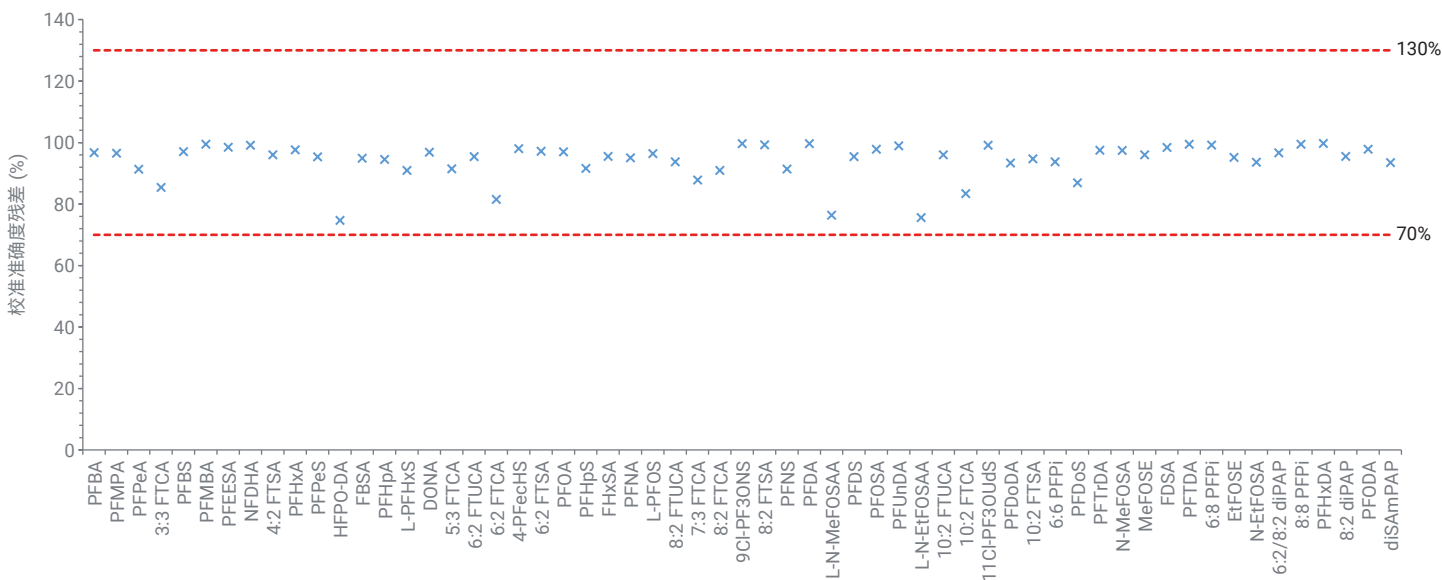


图 4. 大多数化合物的浓度为 2 ng/mL 的质控标样的计算浓度准确度

## 空白分析

为了确保萃取和分析消耗品、萃取流程以及 LC/MS/MS 系统未受 PFAS 污染，每个萃取组都分析了萃取空白。此外，还收集并分析了来自两根小柱（图 2）的甲醇冲洗溶液，确保 Carbon S 吸附剂和小柱不含 PFAS 残留物。通过确认萃取空白和小柱空白的实验结果，将低浓度加标的浓度确定为最低报告限值 (MRL)，将

背景限值设置为最低报告限值的  $1/3^{[6]}$ 。图 5 显示了空白分析的定量结果。橙色柱状图是在小柱冲洗溶液中测得的平均残留 PFAS，蓝色柱状图是在砂质壤土的两个萃取空白中测得的平均残留 PFAS。绿色虚线是 2 g 土壤中低浓度加标的浓度，其中大多数目标化合物的加标浓度为 0.625 ng/g，除了：N-MeFOSA、N-EtFOSA、6:2/8:2 diPAP、8:8 PFPi

和 8:2 diPAP 的浓度为 1.25 ng/g，EtFOSE、N-MeFOSE、PFHxDA、PFODA 和 diSAmPAP 的浓度为 2.5 ng/g，6:2 FTCA、8:2 FTCA 和 10:2 FTCA 的浓度为 6.25 ng/g。图 5 中的红色虚线表示背景限值。空白中 PFAS 的背景浓度远低于所有目标 PFAS MRL 阈值的  $1/3$ ，证明了低浓度加标的浓度可作为 MRL。

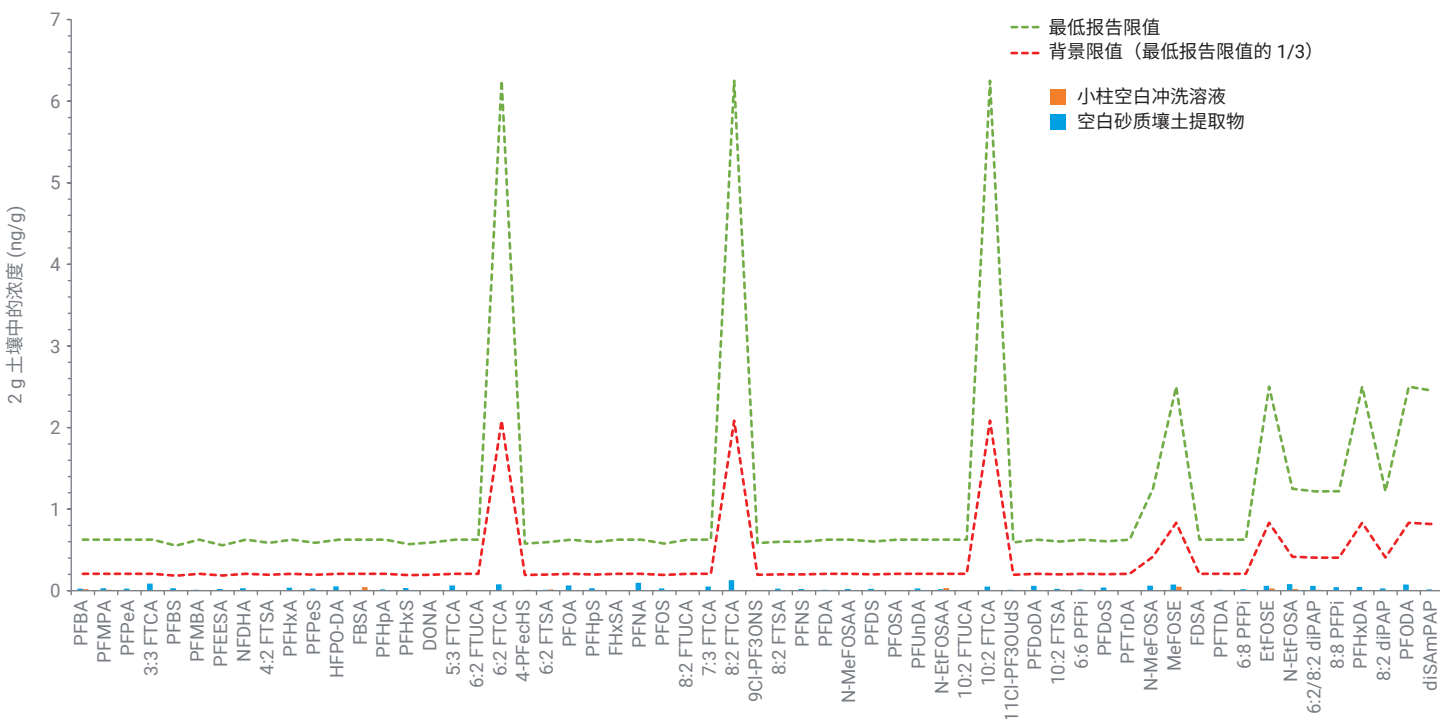


图 5. 两份重复的小柱空白冲洗溶液和两份重复的空白砂质壤土提取物的平均值。绿色虚线表示低浓度加标的浓度和最低报告限值。红色虚线表示背景限值

图 6 显示了空白小柱冲洗溶液中目标化合物的总 MRM 色谱图。这些结果表明，没有高于低浓度加标浓度的可报告 PFAS，从而证明了在样品前处理过程中没有引入 PFAS 污染。

### 砂质壤土加标

分别对五份低浓度加标和高浓度加标的砂质壤土重复试样进行了萃取。在图 7 中，蓝色柱状图表示平均回收率，黄线表示低浓度加标的相对标准偏差 (RSD) 百分比。所有化合物的回收率均在 50%–150% 之间，除 3:3 FTCA 和 PFDoS 外，所有化合物的 RSDs 均小于 30%。所有化合物的平均回收率为 99.3%，RSD 为 13.5%。图 8 显示了高浓度加标的平均回收率和 RSDs。除 3:3 FTCA、5:3 FTCA、

6:2 FTUCA 和 8:2 FTUCA 外，所有化合物的回收率均在 70%–130% 之间。所有高浓度加标的 RSD 均低于 30%。所有

化合物的平均回收率为 99.2%，RSD 为 8.5%。这些结果表明，两种加标浓度下都获得了良好的加标回收率。

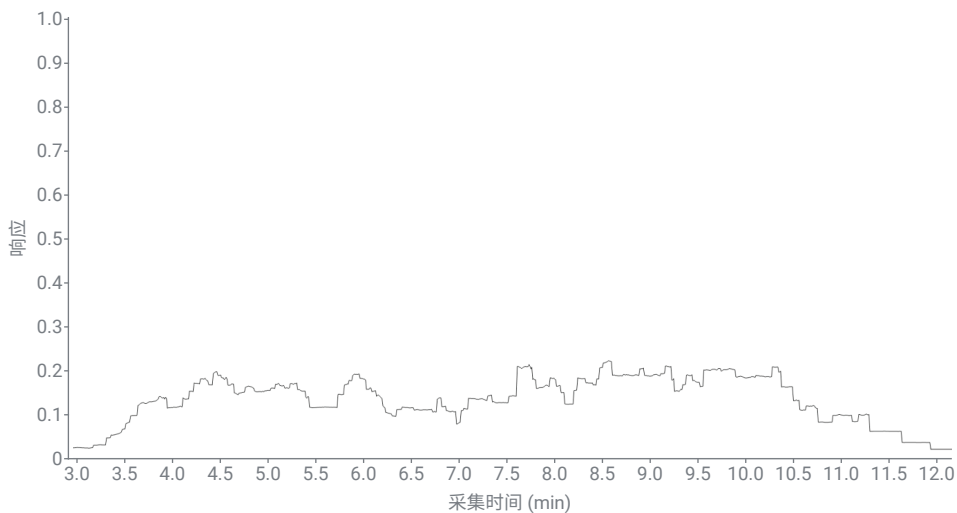


图 6. 小柱空白冲洗溶液的总 MRM 色谱图

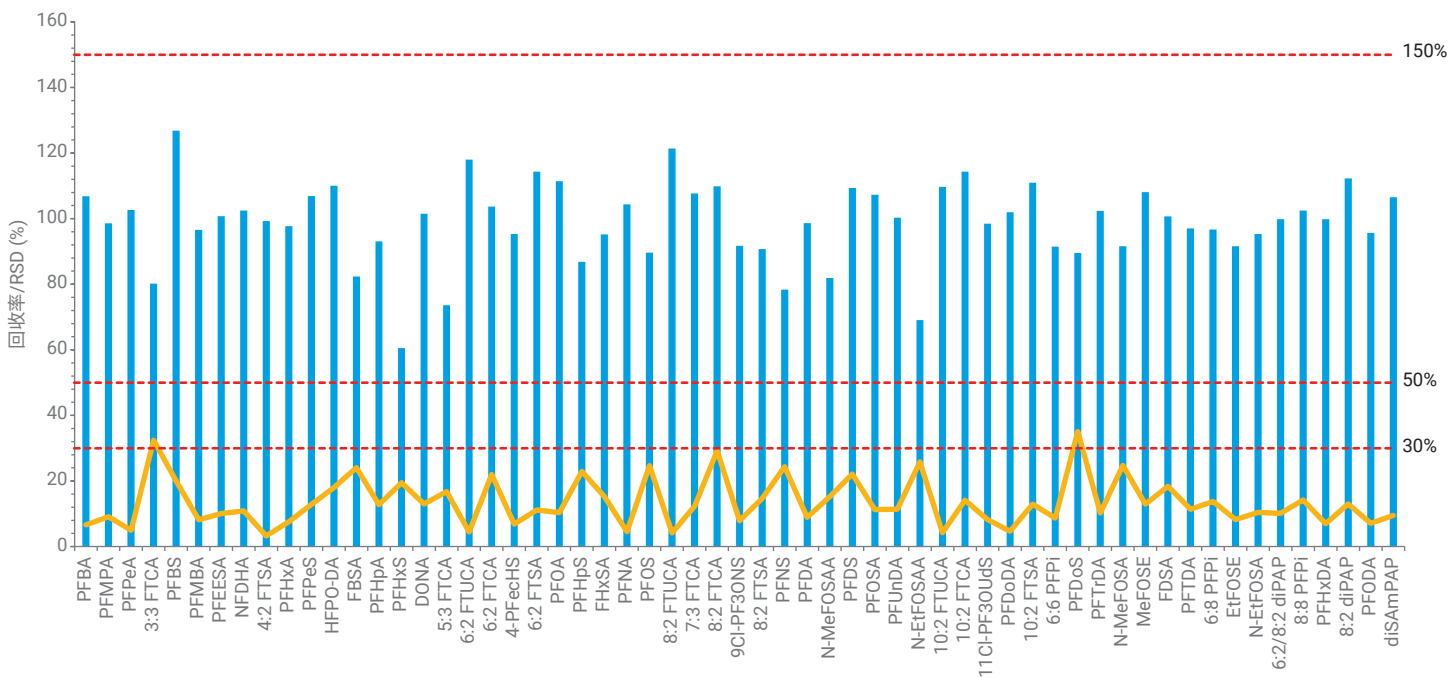


图 7. 低浓度加标砂质壤土 5 次重复萃取的平均回收率 (蓝色柱状图) 和 RSDs (黄线)

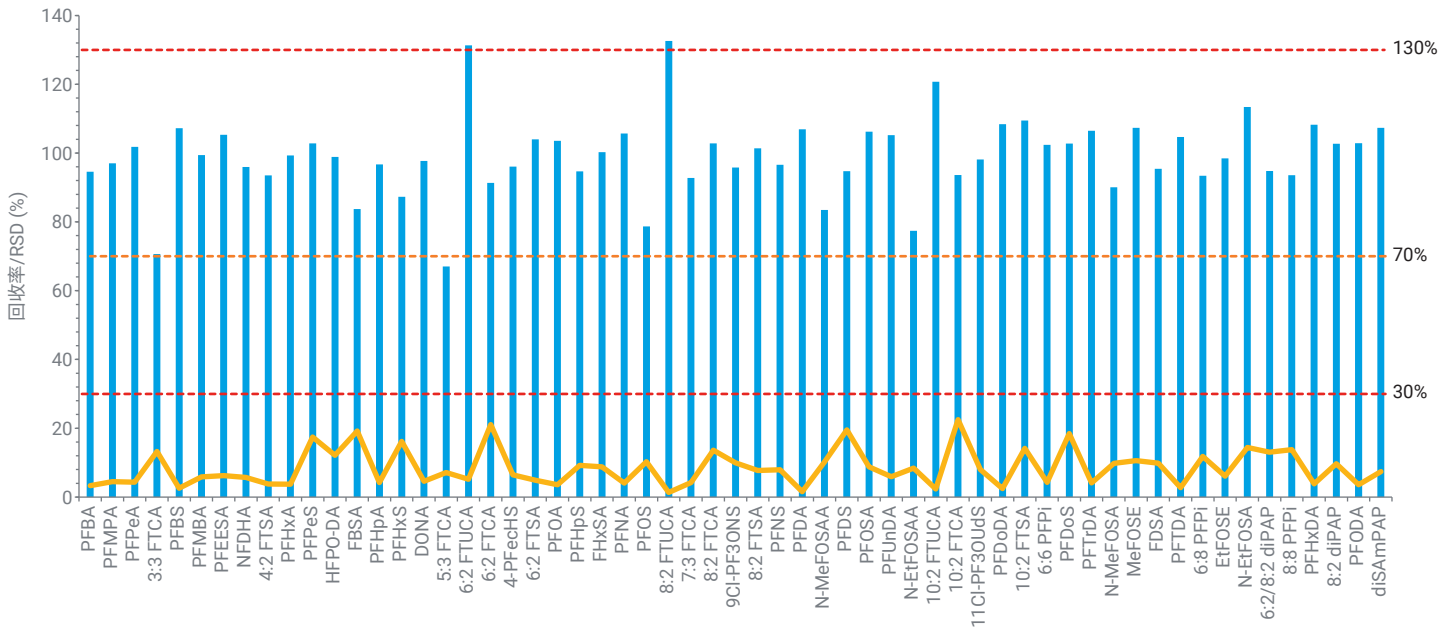


图 8. 高浓度加标砂质壤土 5 次重复萃取的平均回收率 (蓝条) 和 RSDs (黄线)

### 芦苇泥炭和表土分析

选择两种土壤进行 PFAS 残留分析：来自两家供应商的芦苇泥炭和表土。选择泥炭

是因为它主要由有机酸含量高、矿物质含量低的有机物组成。选择表土是因为它的体积密度和无机矿物质含量高于泥炭。

对每种土壤类型分别进行了 3 次萃取。分析结果如表 4 所示。仅在泥炭样品中检测到浓度超过 MRL 的 PFAS。在泥炭

表 4. 土壤样品中测得的 PFAS 平均浓度

缩写	芦苇泥炭	表土	缩写	芦苇泥炭	表土	缩写	芦苇泥炭	表土
10:2 FTCA	< MRL	< MRL	9CI-PF3ONS	< MRL	< MRL	PFEESA	< MRL	< MRL
10:2 FTSA	< MRL	< MRL	diSAmPAP	< MRL	< MRL	PFHpA	0.83 ng/g	< MRL
10:2 FTUCA	< MRL	< MRL	DONA	< MRL	< MRL	PFHpS	< MRL	< MRL
11Cl-PF3OUdS	< MRL	< MRL	EtFOSE	< MRL	< MRL	PFHxA	< MRL	< MRL
3:3 FTCA	< MRL	< MRL	FBSA	< MRL	< MRL	PFHxDA	< MRL	< MRL
4:2 FTSA	< MRL	< MRL	FDSA	< MRL	< MRL	PFHxS	< MRL	< MRL
4-PFecHS	< MRL	< MRL	FHxSA	< MRL	< MRL	PFMBA	< MRL	< MRL
5:3 FTCA	< MRL	< MRL	HFPO-DA	< MRL	< MRL	PFMPA	< MRL	< MRL
6:2 FTCA	< MRL	< MRL	MeFOSE	< MRL	< MRL	PFNA	< MRL	< MRL
6:2 FTSA	< MRL	< MRL	N-EtFOSA	< MRL	< MRL	PFNS	< MRL	< MRL
6:2 FTUCA	< MRL	< MRL	N-EtFOSAA	< MRL	< MRL	PFOA	< MRL	< MRL
6:2/8:2 diPAP	< MRL	< MRL	NFDHA	< MRL	< MRL	PFODA	< MRL	< MRL
6:6 PFPI	< MRL	< MRL	N-MeFOSA	< MRL	< MRL	PFOS	< MRL	< MRL
6:8 PFPI	< MRL	< MRL	N-MeFOSAA	< MRL	< MRL	PFOSA	< MRL	< MRL
7:3 FTCA	< MRL	< MRL	PFBA	4.5 ng/g	< MRL	PFPeA	2.98 ng/g	< MRL
8:2 diPAP	< MRL	< MRL	PFBS	< MRL	< MRL	PFPeS	< MRL	< MRL
8:2 FTCA	< MRL	< MRL	PFDA	< MRL	< MRL	PFTDA	< MRL	< MRL
8:2 FTSA	< MRL	< MRL	PFDoDA	< MRL	< MRL	PFTTrDA	< MRL	< MRL
8:2 FTUCA	< MRL	< MRL	PFDoS	< MRL	< MRL	PFUnDA	< MRL	< MRL
8:8 PFPI	< MRL	< MRL	PFDS	< MRL	< MRL			

样品中测得的 PFBA、PFPeA 和 PFHpA 的浓度分别为 4.51、2.98 和 0.83 ng/g。在表土中测得的 PFAS 残留物的浓度均低于 MRL。

### 基质去除效率

在通过式 Carbon S 净化前后对泥炭和表土样品提取物的颜色进行目视检查，对基质去除效率进行定性评估 (图 9)。两种基质提取物中的色素均得到了明显的去除。对于泥炭 (图 9A)，在 Carbon S 净化之前提取物的颜色为橙色/棕色，在通过吸附剂净化后变为几乎看不到的黄色。对于表土 (图 9B)，在净化之前提取物的颜色为浅黄色，在净化后则变得完全透明。

比较了经过和未经 Carbon S 净化的基质提取物的总离子流色谱图。结果表明，与经过 Carbon S 净化的泥炭提取物相比，未经 Carbon S 净化的提取物中最早洗脱的峰 (PFBA) 发生了变形和保留时间偏移。图 10 为经过和未经 Carbon S 净化的  $^{13}\text{C}_3$ -PFBA 的提取 MRM 定量离子色谱图示例。与经过 Carbon S 净化的泥炭提取物中的  $^{13}\text{C}_3$ -PFBA 峰 (图 10B) 相比，未经 Carbon S 净化的提取物中  $^{13}\text{C}_3$ -PFBA 的色谱峰更宽且部分分裂 (图 10A)。此外，泥炭提取物的保留时间提前了半分钟。这些结果表明，Carbon S 通过式净化提供的有效基质净化可以降低某些目标物的基质效应并提高数据质量和一致性。

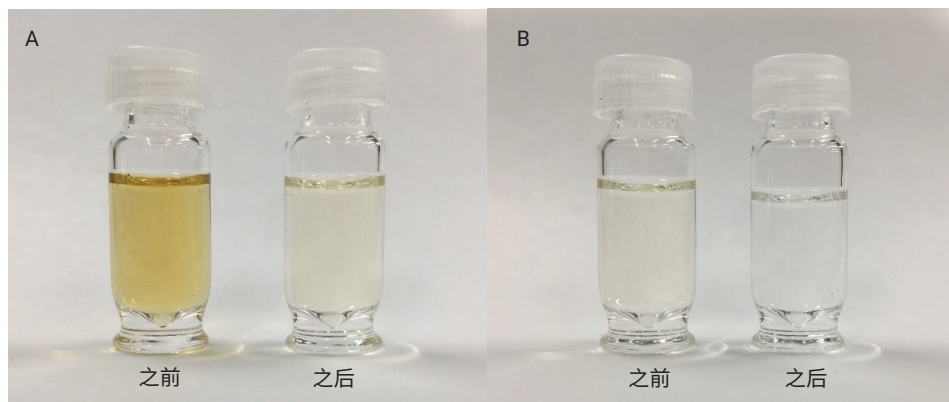


图 9. (A) 泥炭和 (B) 表土经 Carbon S 通过式净化前后的定性色素去除效果对比

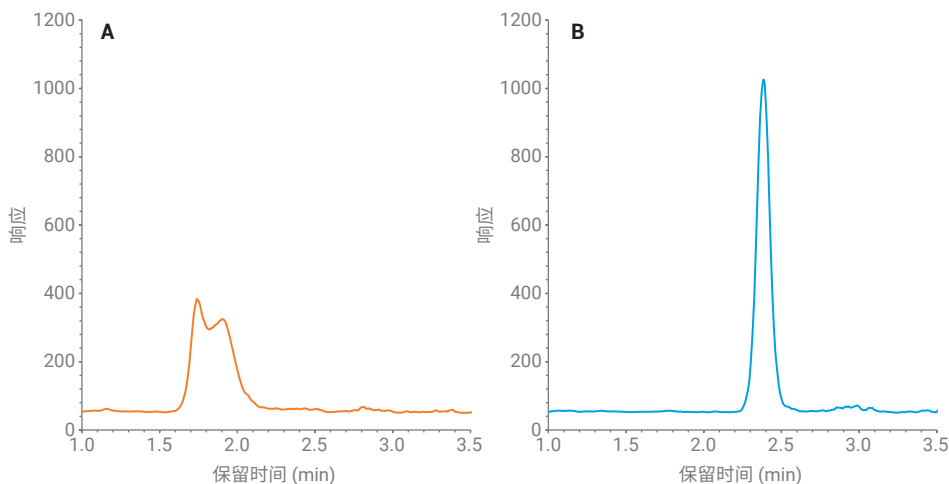


图 10. 未经 Carbon S 净化 (A) 和经过 Carbon S 净化 (B) 的泥炭基质之间的  $^{13}\text{C}_3$ -PFBA 定量离子色谱峰形和保留时间差异的比较

## 结论

结果表明，PFAS 分析专用 Agilent Bond Elut Carbon S SPE 小柱为土壤样品 PFAS 分析提供了有效的通过式基质净化，且不存在任何干扰性 PFAS 残留。所研究的 59 种 PFAS 的平均回收率在 99% 左右，大多数化合物的 RSDs 小于 30%。对于芦苇泥炭提取物，与未使用 Carbon S 净化的提取物相比，使用 Carbon S 改善了 PFBA 的峰形完整性和保留时间一致性。

## 附录 A

表 A1. 目标物加标溶液和基质中的目标物浓度

目标化合物	CAS	保留时间 (min)	目标定量离子 MRM 离子对	同位素类似物	同位素 MRM 离子对
PFBA	375-22-4	2.43	213 → 169	<sup>13</sup> C <sub>4</sub> -PFBA	217 → 172
PFMPA	377-73-1	3.57	229 → 85	<sup>13</sup> C <sub>5</sub> -PFPeA	268 → 223
3:3 FTCA	356-02-5	3.88	241 → 177	<sup>13</sup> C <sub>5</sub> -PFPeA	268 → 223
PFPeA	2706-90-3	3.89	263 → 219	<sup>13</sup> C <sub>5</sub> -PFPeA	268 → 223
PFBS	375-73-5	3.97	299 → 80	<sup>13</sup> C <sub>3</sub> -PFBS	302 → 80
PFMBA	863090-89-5	4.01	279 → 85	<sup>13</sup> C <sub>5</sub> -PFPeA	268 → 223
PFEESA	113507-82-7	4.12	315 → 135	<sup>13</sup> C <sub>3</sub> -PFBS	302 → 80
NFDHA	151772-58-6	4.25	295 → 85	<sup>13</sup> C <sub>5</sub> -PFHxA	318 → 273
4:2 FTSA	757124-72-4	4.29	327 → 307	<sup>13</sup> C <sub>2</sub> -4:2 FTSA	329 → 309
PFHxA	307-24-4	4.33	313 → 269	<sup>13</sup> C <sub>5</sub> -PFHxA	318 → 273
PFPeS	2706-91-4	4.39	349 → 80	<sup>13</sup> C <sub>3</sub> -PFHxS	402 → 80
HFPO-DA	13252-13-6	4.48	285 → 169	<sup>13</sup> C <sub>5</sub> -HFPO-DA	287 → 169
FBSA	30334-69-1	4.58	298 → 78	<sup>13</sup> C <sub>3</sub> -PFHxS	402 → 80
PFHpA	375-85-9	4.90	363 → 319	<sup>13</sup> C <sub>4</sub> -PFHpA	367 → 322
PFHxS	355-46-4	4.95	399 → 80	<sup>13</sup> C <sub>3</sub> -PFHxS	402 → 80
DONA	919005-14-4	4.98	377 → 251	<sup>13</sup> C <sub>4</sub> -PFHpA	367 → 322
5:3 FTCA	914637-49-3	5.04	341 → 237	<sup>13</sup> C <sub>5</sub> -PFHxA	318 → 273
6:2 FTUCA	70887-88-6	5.06	357 → 293	<sup>13</sup> C <sub>2</sub> -6:2 FTUCA	359 → 294
6:2 FTCA	53826-12-3	5.11	377 → 293	<sup>13</sup> C <sub>2</sub> -6:2 FTCA	379 → 294
4-PFecHS	646-83-3	5.52	461 → 381	<sup>13</sup> C <sub>8</sub> -PFOS	507 → 80
6:2 FTSA	27619-97-2	5.57	427 → 407	<sup>13</sup> C <sub>2</sub> -6:2 FTSA	429 → 409
PFOA	335-67-1	5.60	413 → 369	<sup>13</sup> C <sub>8</sub> -PFOA	421 → 376
PFHpS	375-92-8	5.63	449 → 80	<sup>13</sup> C <sub>8</sub> -PFOS	507 → 80
FHxSA	41997-13-1	6.10	398 → 78	<sup>13</sup> C <sub>8</sub> -PFOS	507 → 80
PFNA	375-95-1	6.15	463 → 419	<sup>13</sup> C <sub>9</sub> -PFNA	472 → 427
PFOS	1763-23-1	6.17	499 → 80	<sup>13</sup> C <sub>8</sub> -PFOS	507 → 80
8:2 FTUCA	70887-84-2	6.36	457 → 393	<sup>13</sup> C <sub>2</sub> -8:2 FTUCA	459 → 394
7:3 FTCA	812-70-4	6.37	441 → 337	<sup>13</sup> C <sub>5</sub> -PFHxA	318 → 273
8:2 FTCA	27854-31-5	6.40	477 → 393	<sup>13</sup> C <sub>2</sub> -8:2 FTCA	479 → 394
9Cl-PF3ONS	756426-58-1	6.55	531 → 351	<sup>13</sup> C <sub>8</sub> -PFOS	507 → 80
8:2 FTSA	39108-34-4	7.02	527 → 507	<sup>13</sup> C <sub>2</sub> -8:2 FTSA	529 → 509
PFDA	335-76-2	7.07	513 → 469	<sup>13</sup> C <sub>6</sub> -PFDA	519 → 474
PFNS	68259-12-1	7.09	549 → 80	<sup>13</sup> C <sub>8</sub> -PFOS	507 → 80
N-MeFOSAA	2355-31-9	7.73	570 → 419	d <sub>3</sub> -N-MeFOSAA	573 → 419
PFDS	335-77-3	8.10	599 → 80	<sup>13</sup> C <sub>8</sub> -PFOS	507 → 80
PFUnDA	2058-94-8	8.11	563 → 519	<sup>13</sup> C <sub>7</sub> -PFUnDA	570 → 525
N-EtFOSAA	2991-50-6	8.13	584 → 419	d <sub>5</sub> -N-EtFOSAA	589 → 419
PFOSA	754-91-6	8.32	498 → 78	<sup>13</sup> C <sub>8</sub> -PFOSA	506 → 78
10:2 FTUCA	70887-94-4	8.36	557 → 493	<sup>13</sup> C <sub>2</sub> -10:2 FTUCA	559 → 494
10:2 FTCA	53826-13-4	8.40	577 → 493	<sup>13</sup> C <sub>2</sub> -10:2 FTCA	579 → 494
11Cl-PF3OUdS	763051-92-9	8.48	631 → 451	<sup>13</sup> C <sub>8</sub> -PFOS	507 → 80
PFDoDA	307-55-1	8.70	613 → 569	<sup>13</sup> C <sub>2</sub> -PFDoDA	615 → 570

目标化合物	CAS	保留时间 (min)	目标定量离子 MRM 离子对	同位素类似物	同位素 MRM 离子对
10:2 FTSA	120226-60-0	8.71	627 → 607	<sup>13</sup> C <sub>2</sub> -8:2 FTSA	529 → 509
6:6 PFPI	40143-77-9	8.90	701 → 401	<sup>13</sup> C <sub>2</sub> -PFDoDA	615 → 570
PFDoS	79780-39-5	9.09	699 → 80	<sup>13</sup> C <sub>6</sub> -PFOS	507 → 80
PFTDA	72629-94-8	9.12	663 → 619	<sup>13</sup> C <sub>2</sub> -PFDoDA	615 → 570
PFTDA	376-06-7	9.49	713 → 669	<sup>13</sup> C <sub>2</sub> -PFTDA	715 → 670
N-MeFOSA	31506-32-8	9.50	512 → 219	d <sub>3</sub> -N-MeFOSA	515 → 169
FDSA	N/A	9.52	598 → 78	<sup>13</sup> C <sub>6</sub> -PFOSA	506 → 78
6:8 PFPI	610800-34-5	9.54	801 → 401	( <sup>13</sup> C <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -6:2 diPAP	993 → 97
MeFOSE	24448-09-7	9.54	616 → 59	d <sub>7</sub> -MeFOSE	623.1 → 59
N-EtFOSA	4151-50-2	9.88	526 → 219	d <sub>5</sub> -N-EtFOSA	531 → 169
EtFOSE	1691-99-2	9.89	630 → 59	d <sub>9</sub> -EtFOSE	639.1 → 59
6:2/8:2 diPAP	943913-15-3	10.02	889 → 443	( <sup>13</sup> C <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -6:2 diPAP	793 → 97
8:8 PFPI	40143-79-1	10.11	901 → 501	( <sup>13</sup> C <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -6:2 diPAP	793 → 445
PFHxDA	67905-19-5	10.18	813 → 269	<sup>13</sup> C <sub>2</sub> -PFHxDA	815 → 770
8:2 diPAP	678-41-1	10.55	989 → 543	( <sup>13</sup> C <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -8:2 diPAP	993 → 97
PFODA	16517-11-6	10.81	913 → 369	<sup>13</sup> C <sub>2</sub> -PFHxDA	815 → 770
diSAmPAP	2965-52-8	11.10	1,203 → 526	( <sup>13</sup> C <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -8:2 diPAP	993 → 97

## 参考文献

- Weil, R. R.; Brady, N. C. Soil Architecture and Physical Properties. The Nature and Properties of Soils, 15th Ed. Pearson: Harlow, 2017, p. 122. Elements of the Nature and Properties of Soils, Prentice Hall **2017**
- Zhao, L.; Wei, T. 使用 Captiva EMR-HCF 净化和 LC/MS/MS 测定春季沙拉菜中的多类别多残留农药, 安捷伦科技公司应用简报, 出版号 5994-4765ZHCN, **2022**
- ASTM International, *Standard Test Method for Determination of Polyfluorinated Compounds in Soil by Liquid Chromatography Tandem Mass Spectrometry (LC/MS/MS)*; ASTM D7968-17a; West Conshohocken, PA, **2019**
- ASTM International, *Standard Test Method for Determination of Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS) in Soil/Biosolid Matrices by Solvent Extraction, Filtering, and Followed by Liquid Chromatography Tandem Mass Spectrometry (LC/MS/MS)*; ASTM D8535-23; West Conshohocken, PA, **2019**
- VITO. Compendium voor monsterneming en analyse in uitvoering van het Materialendecreet en het Bodemdecreet; Vlaamse Instelling voor Technologisch Onderzoek: Mol, Belgium, **2021**
- Giardina, M. 土壤提取物中全氟/多氟烷基化合物的分析, 安捷伦科技公司应用简报, 出版号 5994-2999ZHCN, **2021**
- Giardina, M.; Sun, N. L. Analysis of Per- and Polyfluoroalkyl Substances in Drinking Water using SampliQ Weak Anion Exchange Solid Phase Extraction 150 mg Cartridge (使用 SampliQ 弱阴离子交换固相萃取 150 mg 小柱分析饮用水中的全氟/多氟烷基化合物), 安捷伦科技公司应用简报, 出版号 5994-3616EN, **2021**
- Method 533: Determination of Perand Polyfluoroalkyl Substances in Drinking Water by Isotope Dilution Anion Exchange Solid Phase Extraction and Liquid Chromatography/Tandem Mass Spectrometry. United States Environmental Protection Agency, **2019**

查找当地的安捷伦客户中心:

[www.agilent.com/chem/contactus-cn](http://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](mailto:LSCA-China_800@agilent.com)

在线询价:

[www.agilent.com/chem/erfq-cn](http://www.agilent.com/chem/erfq-cn)

[www.agilent.com](http://www.agilent.com)

DE25278998

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, 2022, 2025

2025 年 4 月 29 日, 中国出版

5994-4770ZHCN

