

## Agilent InfinityLab Pro iQ Plus 질량 검출기를 이용한 PFAS 화합물 분석



### 저자

Olivier Chevallier  
Agilent Technologies, Inc.

### 개요

이 응용 자료에서는 Agilent InfinityLab Pro iQ Plus LC/MS 시스템과 Agilent OpenLab CDS 2.8 소프트웨어를 사용하여 26종 과불화화합물(PFAS) 표준물질을 분석하는 방법을 설명합니다. 이 연구에서는 모든 분석 물질에 대해  $R^2 \geq 0.99$ 의 우수한 직선성을 보였고, 정량 한계(LOQ)에서 상대 표준 편차(RSD) < 10%로 0.1ng/mL까지 우수한 감도를 보였습니다.

## 소개

과불화화합물(PFAS)은 전 세계적으로 환경에서 흔히 발견되는 지속적이고 유해한 화학물질 그룹입니다.<sup>1</sup> 새로운 처리 기술을 통한 PFAS 제거 평가, 복원 작업 추적 및 새로운 오염물질 식별 등의 응용에는 고급 분석 도구가 필요한 경우가 많습니다. 삼중 사중극자 질량 분석기는 대부분의 PFAS 응용 분야에 필요한 감도와 특이성을 제공하지만, 유지보수 비용이 높고 종종 많은 실험실 공간을 차지합니다.

작고 비용 효율적인 Agilent InfinityLab Pro iQ Plus SQ LC/MS 시스템은 규제 분석법을 준수가 필요하지 않거나 예상 농도가 sub-ppb 수준을 초과하는 응용 분야에서 더 효율적인 대안이 됩니다. 이는 복원 전략 조사를 위한 신기술을 연구하는 연구 시설이나 PFAS 배출을 모니터링하는 전자 및 반도체 제조 시설과 같은 생산 시설의 경우에 해당될 수 있습니다. 또한 이 시스템은 질량 분석을 위한 인프라가 제한적인 실험실에서도 구현할 수 있으며, Agilent OpenLab CDS와 통합된 데이터 수집 및 분석 솔루션을 제공합니다.

이 응용 자료에서는 용액 내 표준물질을 반복 주입하여 PFAS 분석하는 것을 통해 InfinityLab Pro iQ Plus의 성능을 설명합니다.

## 실험

### 기기 구성

이 실험은 다음의 기기 구성을 사용하여 수행했습니다.

- Agilent Pro iQ Plus LC/MS 시스템(G6170A)
- Agilent 1290 Infinity II Bio Binary 펌프(G7120A)
- Agilent 1290 Infinity II Bio 멀티샘플러(G7167B)
- Agilent 1290 Infinity II Bio 컬럼 장치(G7116B)

### 표준물질 및 용액

이 연구에서는 LC/MS 등급 용매와 분석 시약이 사용되었습니다. PFAS 표준물질은 Wellington Laboratories에서 구했습니다(표 1). 검량선은 메탄올:물 1:1 용액으로 작성했습니다. 9단계로 검량 농도 (0.1-100ng/mL)를 준비하기 위해 연속 희석을 수행했습니다.

표 1. 이 연구에서 분석한 PFAS 목록.

분석 물질	CAS 번호	분석 물질	CAS 번호
9Cl-PF3ONS	756426-58-1	11Cl-PF3OUdS	763051-92-9
PFDA	335-76-2	FBSA	30334-69-1
PFPeS	2706-91-4	PFHxA	307-24-4
PFHxS	355-46-4	PFBS	375-73-5
PFHpS	375-92-8	FOSA	754-91-6
PFOS	1763-23-1	NMeFOSAA	2355-31-9
PFNS	98789-57-2	NEtFOSAA	2991-50-6
PFDS	335-77-3	PFUdA	2058-94-8
HFPO-DA(Gen X)	62037-80-3	FHxSA	41997-13-1
ADONA	958445-44-8	PFDaA	307-55-1
PFTTrDA	72629-94-8	PFOA	335-67-1
PFHpA	375-85-9	PFNA	375-95-1
PFTeDA	376-06-7	PFPeA	2706-90-3

### LC/MS 분석

시료는 Agilent 1290 Infinity II LC시스템에서 UHPLC 가드 컬럼 (Agilent ZORBAX RRHD Eclipse Plus C18 guard column, 제품 번호 821725-901)과 C18 역상 크로마토그래피(Agilent ZORBAX RRHD Eclipse Plus C18 column, 제품 번호 959758-302)를 사용하여 분석했습니다. LC시스템에는 지연 컬럼(Agilent InfinityLab PFC delay column, 제품 번호 5062-8100)을 장착했고, Agilent InfinityLab Pro iQ Plus SQ 질량 분석기 및 Agilent Jet Stream(AJS) 소스를 사용했습니다. 정량성을 높이기 위해 각 분석 물질에 대해 선택 이온 모니터링(SIM)과 음이온 스캔 모드로 동시에 데이터를 수집했습니다. 데이터는 OpenLab CDS 2.8을 사용하여 수집하고 분석했습니다. 소스 파라미터, SIM 파라미터 및 HPLC 파라미터는 각각 표 2, 3 및 4에 나타내었습니다.

표 2. 이 연구에 사용된 Agilent Pro iQ Plus(G6170A)의 소스 파라미터.

파라미터	값
MS	6170A
소스	AJS ESI
건조 가스 유량	10.0L/분
가스 온도	120°C
네블라이저 압력	25psi
캐필러리 전압	2,500V
Sheath 가스 온도	290°C
Sheath 가스 유량	12mL/분
노즐 전압	0V
모드	Negative
스캔	m/z 100 - 800
스캔 시간	50ms
Fragmentor	125V
Gain Factor	5

AJS = Agilent Jet Stream, ESI = 전자 분무 이온화

표 3. 이 연구에 사용된 SIM 파라미터.

화합물명	질량(m/z)	머무름 시간(ms)
PFTeDA	713	5
PFTTrDA	663	5
11Cl-PF3OUdS	630.9	5
PFDoA	613	5
PFDS	598.9	5
N-EtFOSAA	584	5
N-MeFOSAA	570	5
PFUdA	563	5
PFNS	548.9	5
9Cl-PF3ONS	530.9	5
PFDA	513	5
PFOS	498.9	5
FOSA	498	5
PFNA	463	5
PFHpS	448.9	5
PFOA	412.9	5
PFHxS	398.9	5
FHxSA	398	5
ADONA	377	5
PFHpA	363	5
PFPeS	349	5
PFHxA	313	5
PFBS	299	5
FBSA	298	5
HFPO-DA	285	5
PFPeA	263	5

표 4. 이 연구에 사용된 HPLC 파라미터.

파라미터	값																
분석 컬럼	Agilent ZORBAX RRHD Eclipse Plus C18, 2.1 × 100mm, 1.8μm(제품 번호 959758-902)																
가드 컬럼	Agilent ZORBAX RRHD Eclipse Plus C18 column, 2.1 × 5mm, 1.8μm(제품 번호 821725-901)																
지연 컬럼	Agilent InfinityLab PFC delay column, 4.6 × 30mm(제품 번호 5062-8100)																
샘플러 온도	6°C																
이동상 A	5mM 암모늄 아세테이트 수용액																
이동상 B	메탄올																
유량	0.4mL/분																
주입량	5μL																
니들 세척	Standard wash, 6초, 물:이소프로판올(1:4)																
컬럼 온도	45°C																
Post Time	2.5분																
그라디언트 프로그램	<table> <tr> <td>시간(분)</td><td>%B</td></tr> <tr><td>0</td><td>15</td></tr> <tr><td>1.0</td><td>15</td></tr> <tr><td>5.5</td><td>70</td></tr> <tr><td>7.0</td><td>80</td></tr> <tr><td>12.0</td><td>100</td></tr> <tr><td>14.4</td><td>100</td></tr> <tr><td>14.5</td><td>15</td></tr> </table>	시간(분)	%B	0	15	1.0	15	5.5	70	7.0	80	12.0	100	14.4	100	14.5	15
시간(분)	%B																
0	15																
1.0	15																
5.5	70																
7.0	80																
12.0	100																
14.4	100																
14.5	15																

## 결과 및 토의

역상 C18 컬럼을 사용하여 14.5분의 그라디언트에서 우수한 크로마토그래피 분리 결과를 얻었습니다(그림 1).

검량선은 우수한 직선성을 보였으며, 정밀도는 82%-114%, 정량 한계(LOQ, 표 5)에서 면적 상대 표준 편차(RSD)는 10% 미만이었습니다. 모든 분석 물질에 대해 LOQ 범위는 0.1-0.5ng/mL이며, 대부분의 값은 0.2ng/mL 이하입니다. 데이터 프로세싱 방법의 개발은 OpenLab Data Analysis(DA) 모듈 내의 Integration Optimizer Wizard를 용이해졌습니다. 이 소프트웨어는 사용자에게 다양한 분석 물질에 대한 개별 검출 및 적분 설정을 최적화할 수 있도록 단계별 워크플로를 제공합니다(그림 2).

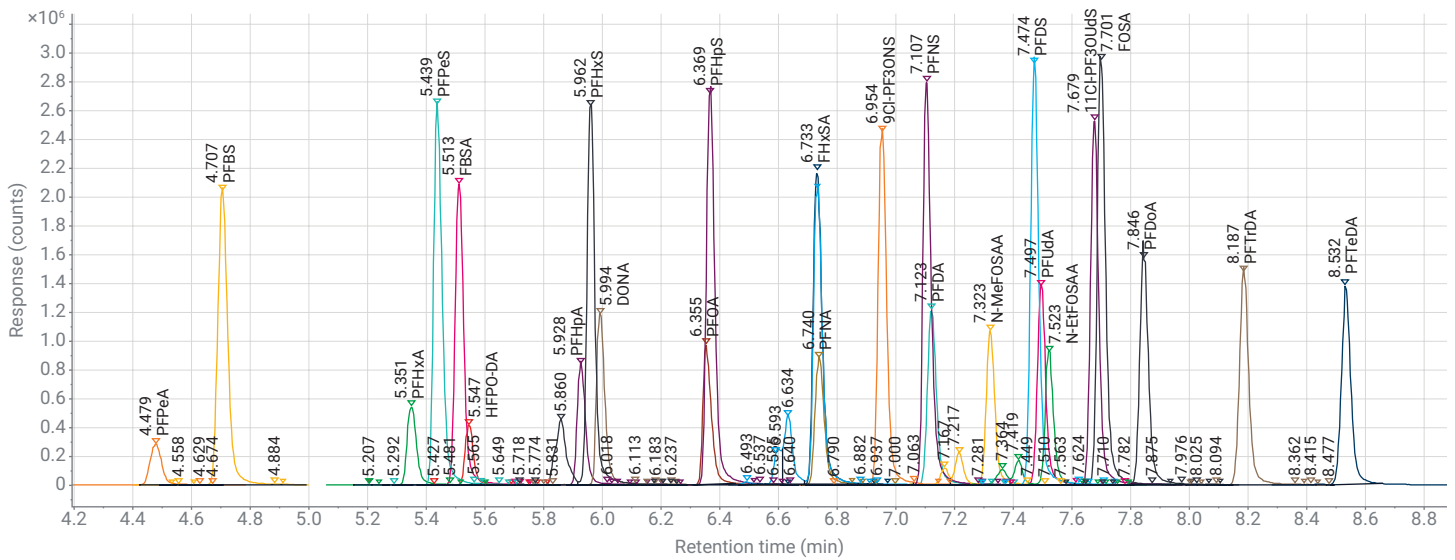


그림 1. SIM 수집을 통해 50ng/mL에서 얻은 26종 PFAS 분석 물질의 대표 크로마토그램.

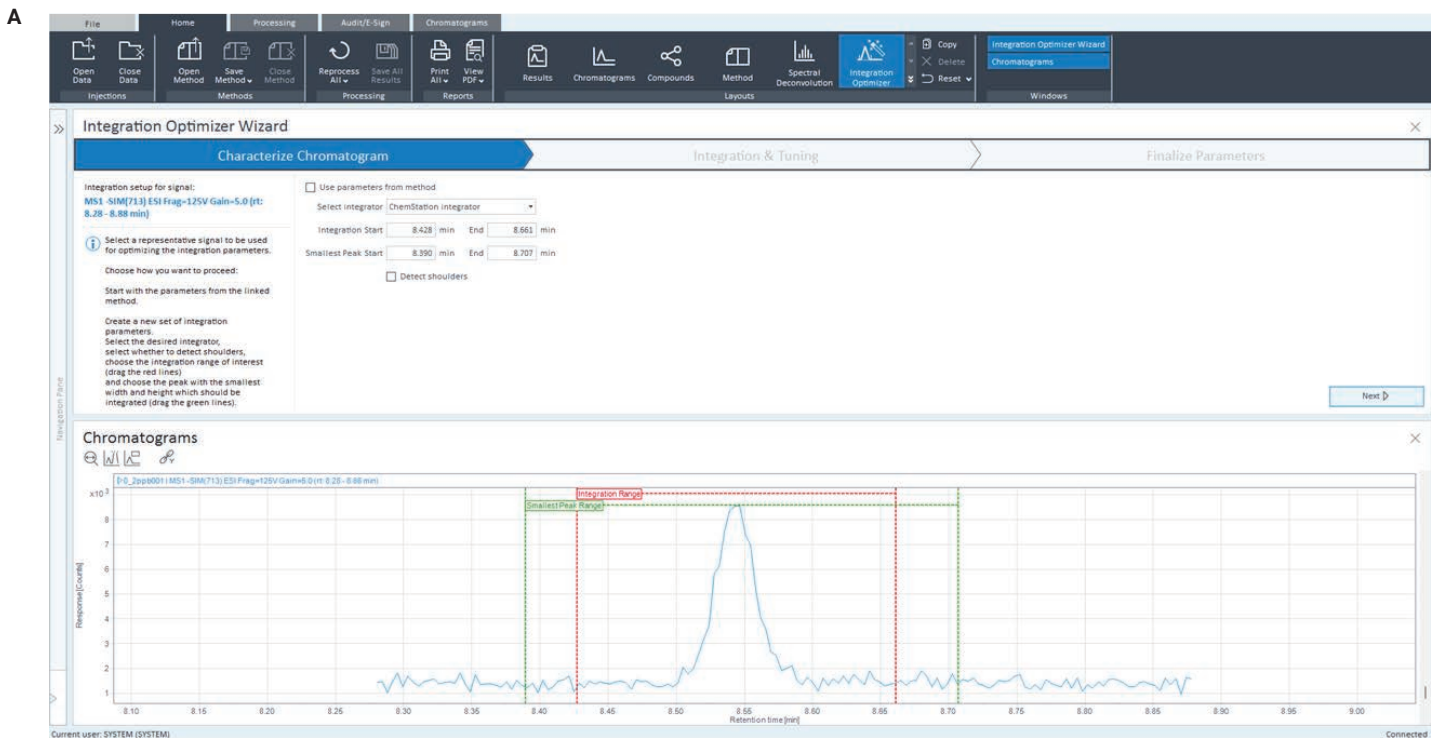


그림 2. PFTeDA에 대한 Integration Optimizer Wizard 워크플로의 예. 첫 번째 단계 (A)는 피크 적분과 최소 피크 범위의 설정을 보여줍니다. 두 번째 단계 (B)는 적분 설정의 조정을 보여줍니다. 설정 요약은 (C)와 같습니다. (다음 페이지에서 그림 계속).

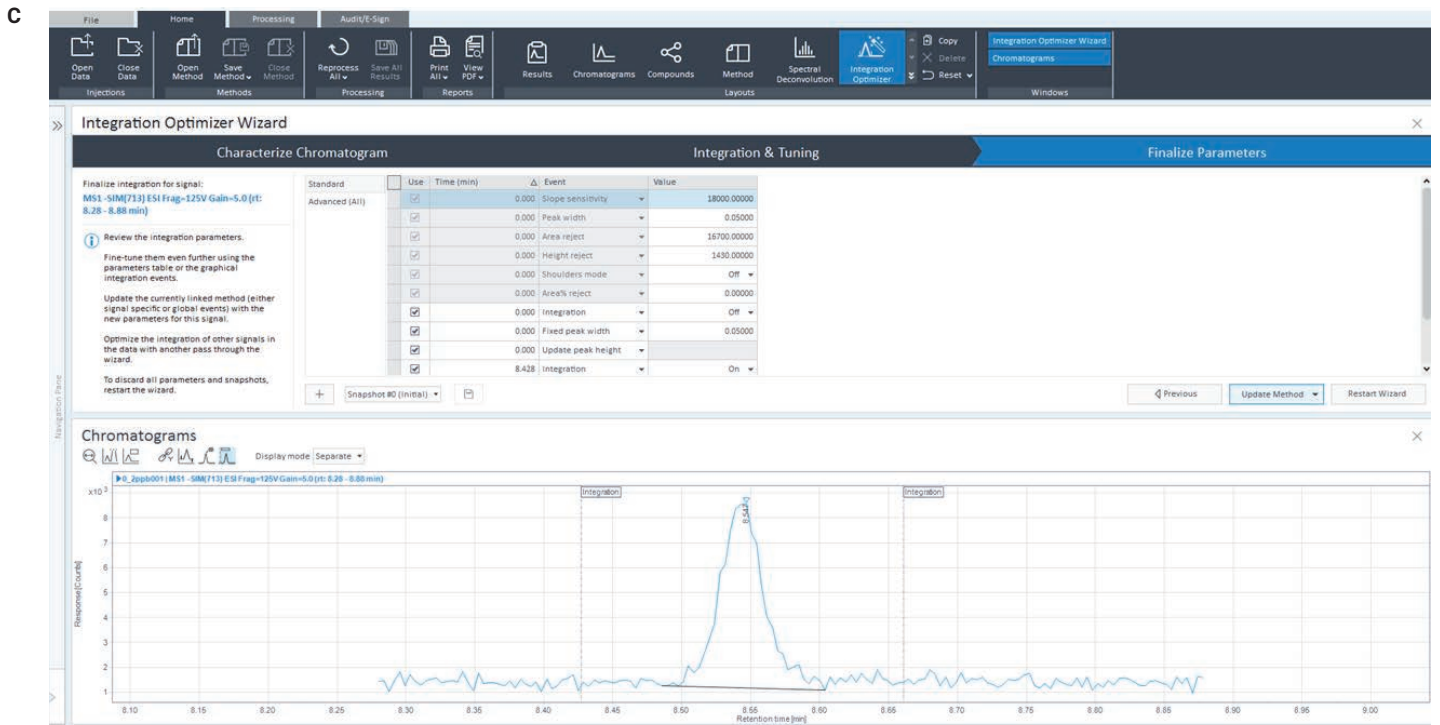
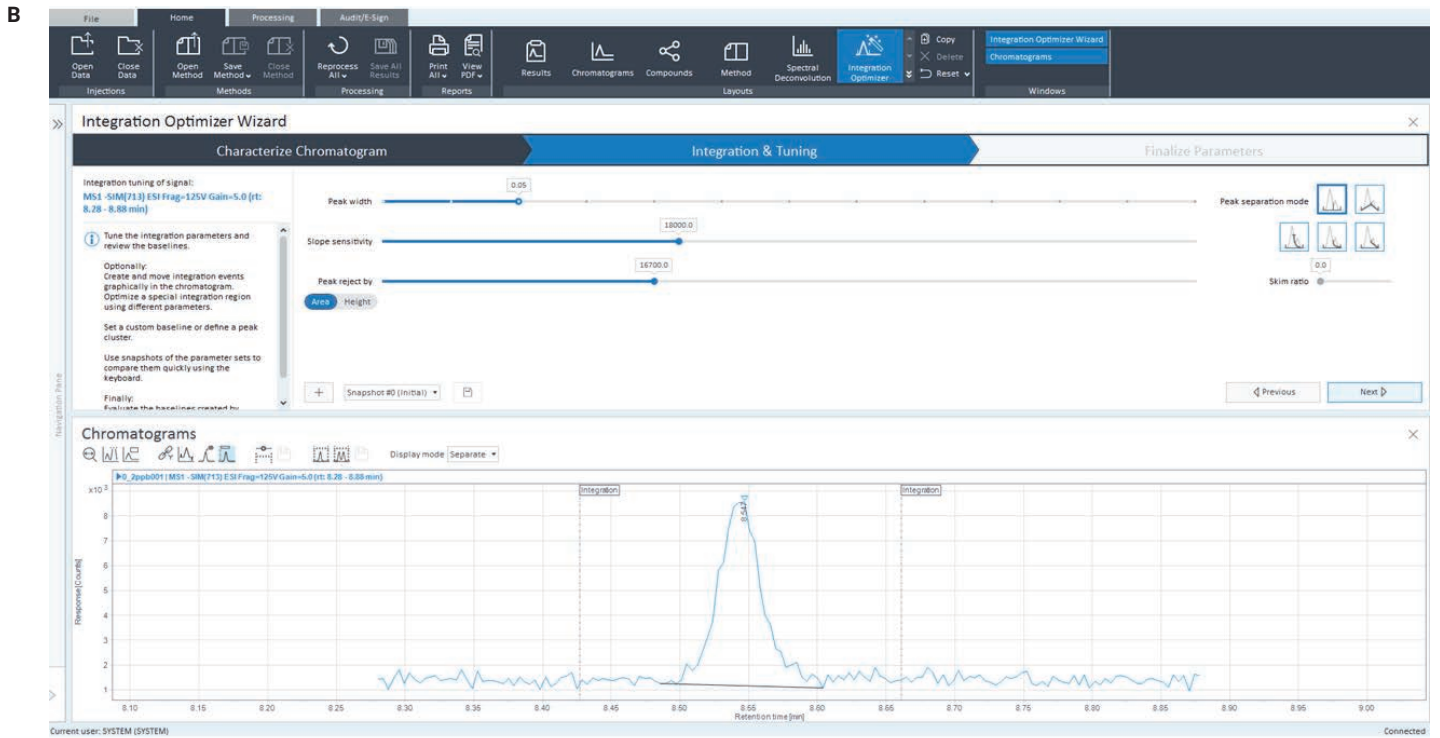


그림 2. (이전 페이지에서 계속) PFTeDA에 대한Integration Optimizer Wizard 워크플로의 예. 첫 번째 단계 (A)는 피크 적분과 최소 피크 범위의 설정을 보여줍니다. 두 번째 단계 (B)는 적분 설정의 조정을 보여줍니다. 설정 요약은 (C)와 같습니다.

표 5. 측정된 26종 PFAS의 검량선(n = 4).

화합물명	직선 범위 (ng/mL)	R <sup>2</sup>	정확도(%)	LOQ %RSD
PFTeDA	0.2 - 50	0.998	88 - 114	9.0
PFTrDA	0.2 - 50	0.999	86 - 115	4.0
11Cl-PF3OUdS	0.2 - 50	0.999	89 - 113	5.1
PFDaA	0.2 - 50	0.998	87 - 117	1.6
PFDS	0.1 - 20	0.995	89 - 111	7.4
N-EtFOSAA	0.1 - 20	0.996	92 - 107	0.9
N-MeFOSAA	0.1 - 50	0.999	84 - 108	2.9
PFUdA	0.1 - 20	0.993	86 - 112	5.0
PFNS	0.1 - 20	0.992	85 - 113	1.1
9Cl-PF3ONS	0.1 - 50	0.998	85 - 112	3.9
PFDA	0.1 - 20	0.992	81 - 114	5.9
PFOS	0.1 - 20	0.991	82 - 115	3.2
FOSA	0.2 - 20	0.995	90 - 109	2.9
PFNA	0.2 - 20	0.992	89 - 114	1.7
PFHpS	0.2 - 20	0.992	88 - 112	3.1
PFOA	0.2 - 20	0.992	83 - 113	7.3
PFHxS	0.2 - 50	0.996	81 - 115	2.9
FHxSA	0.2 - 50	0.991	85 - 115	2.5
ADONA	0.2 - 50	0.998	88 - 113	4.7
PFHpA	0.2 - 20	0.996	89 - 111	3.7
PFPeS	0.2 - 50	0.998	82 - 113	5.4
PFHxA	0.2 - 50	0.996	84 - 117	4.2
PFBS	0.2 - 50	0.998	90 - 112	2.8
FBSA	0.2 - 50	0.999	90 - 111	3.7
HFPO-DA	0.5 - 50	0.999	93 - 107	2.2
PFPeA	0.2 - 50	0.999	89 - 110	7.4

OpenLab CDS 2.8에서 수행한 데이터 분석을 통해 시기적절한 처리와 간편한 결과 시각화가 가능합니다. 제공되는 템플릿 라이브러리를 사용하여 보고서를 생성하거나 사용자 요구에 맞게 완전히 사용자 정의할 수 있습니다. 그런 다음 보고서를 다양한 일반 데이터 형식으로 내보낼 수 있습니다(그림 3).

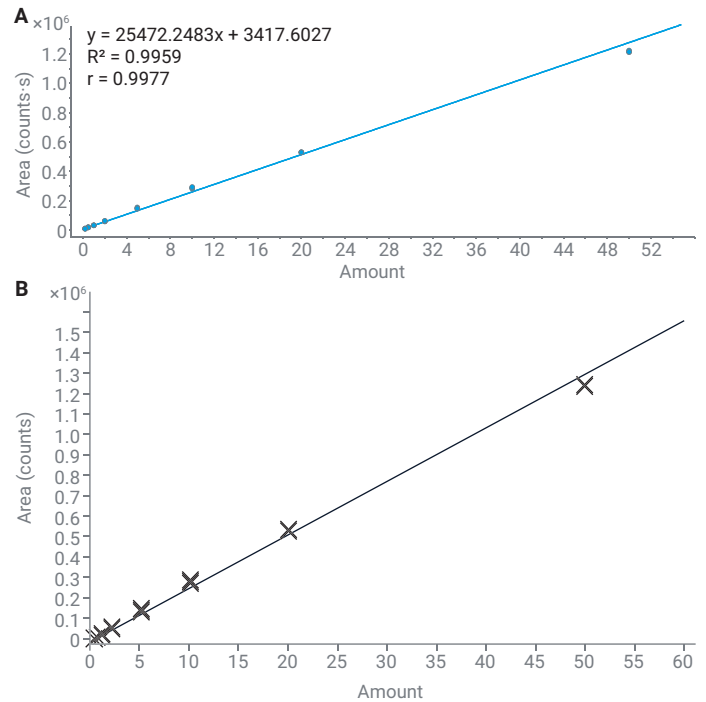


그림 3. (A) OpenLab CDS 수집 소프트웨어 및 (B) OpenLab 보고서에서의 대표 검량선.

SIM 수집에서 빠른 스캔 속도 덕분에 모든 분석 물질에 대해 LOQ에서도 충분한 데이터 포인트를 수집할 수 있으며(그림 4) MS 스캔을 동시에 수집할 수 있습니다. 이는 분해 연구와 같은 경우에 추가적인 질량 분석 정보를 제공할 수 있습니다.

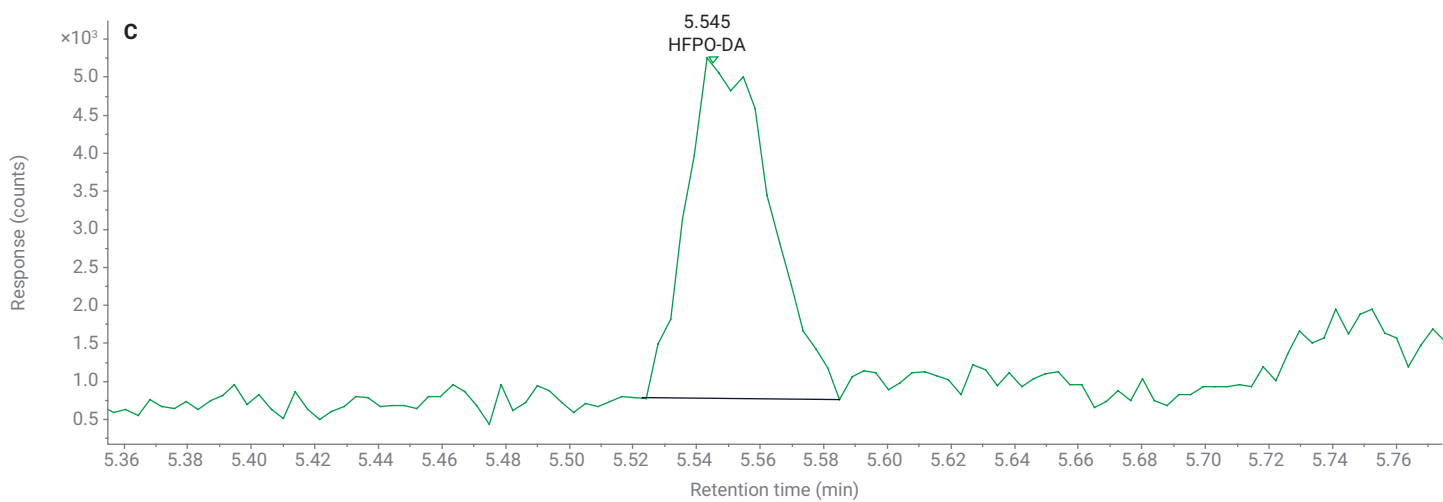
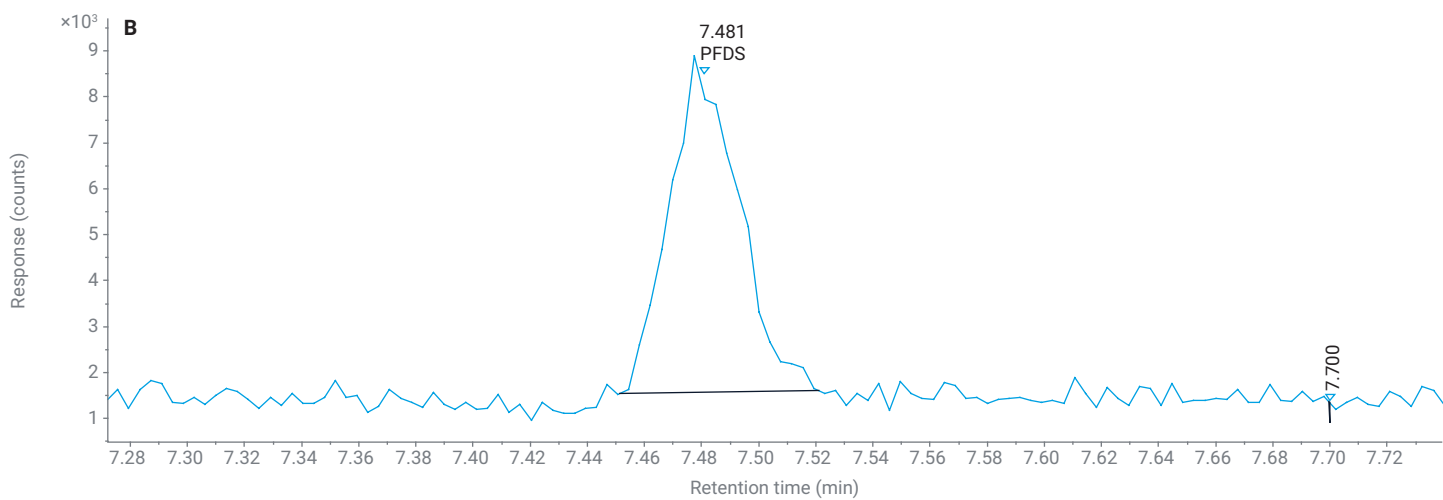
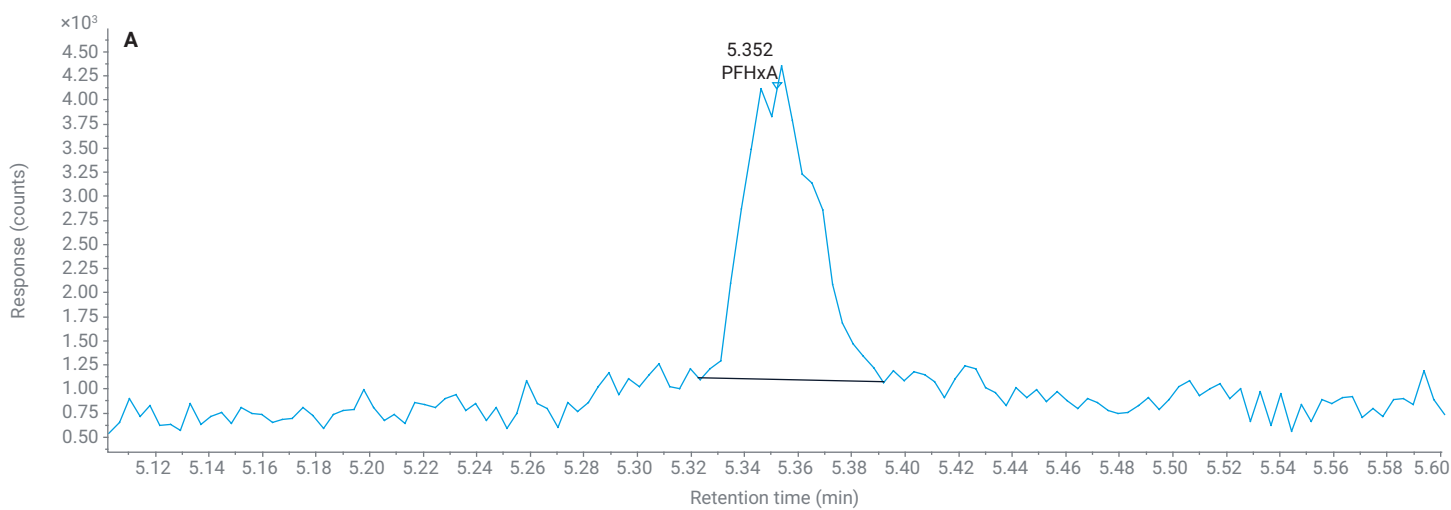


그림 4. (A) PFHxA(0.2ng/mL), (B) PFDS(0.1ng/mL) 및 (C) HFPO-DA(0.5ng/mL)에 대한 LOQ의 대표 크로마토그램.

## 결론

이 응용 자료에 설명된 분석법은 데이터 분석을 위한 통합 솔루션과 SIM 수집을 사용하여 sub-ppb 수준의 PFAS 정량 분석을 실현하는 실용적인 접근 방법을 제시합니다. Agilent InfinityLab Pro iQ Plus LC/MS 시스템은 단위 질량 검출기로서 뛰어난 감도와 직선성 및 재현성을 보여줍니다. Agilent OpenLab CDS 2.8은 데이터 수집부터 최종 보고까지 통합된 워크플로를 제공하여 사용자에게 분석 결과를 원활하게 전달합니다.

## 참고 문헌

1. Evich, M. G.; *et al.* Per- and Polyfluoroalkyl Substances in the Environment. *Science* **2022**, 375(6580). <https://doi.org/10.1126/science.abg9065>.

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

DE-006229

이 정보는 사전 고지 없이 변경될 수 있습니다.

© Agilent Technologies, Inc. 2025  
2025년 5월 19일 한국에서 인쇄  
5994-8355KO

한국에질런트테크놀로지스㈜  
대한민국 서울특별시 서초구 강남대로 369,  
DF타워 9층, 06621  
전화: 82-80-004-5090(고객지원센터)  
팩스: 82-2-3452-2451  
이메일: [korea-inquiry\\_lsca@agilent.com](mailto:korea-inquiry_lsca@agilent.com)