

非饮用水中全氟/多氟烷基化合物的 简单快速分析

使用超高效液相色谱与串联质谱法

作者

Jerry Zweigenbaum 和
Hui Zhao
安捷伦科技有限公司

摘要

本应用简报介绍了一种分离并检测水样中 28 种全氟/多氟烷基化合物 (PFAS) 的方法。该方法将 Agilent 1290 Infinity II 液相色谱仪与 Agilent 6470A 三重四极杆液质联用系统联用，并采用 Agilent MassHunter 工作站软件。对 ASTM 7979 方法中包含的所有 PFAS 进行了分析，并采用相同的样品前处理方案。将 5 mL 水样用等体积甲醇稀释，然后直接进样分析，大多数化合物的报告限为 10 ppt (ng/L) 或更低。

前言

由于在所有环境介质（包括空气、水和土壤）中均检测到 PFAS，因此人们越来越关注这类化合物的使用。持久性化学物质可能在环境中累积，进而影响食物链，对鱼类、鸟类、牲畜和人类造成威胁。通常需要对 ppt (ng/L) 级的 PFAS 进行检测。

本研究对一种利用超高效液相色谱与串联质谱联用系统 (UHPLC/MS/MS) 筛查、鉴定并定量分析水样中 28 种痕量 PFAS 化合物的方法进行了评估。

采用水样对该方法进行评估，并用外标法进行定量分析。结果表明，在特异性、线性、报告限、准确度和精密度方面均获得

了令人满意的结果。该方法可用于同时检测并定量分析试剂、自来水、地表水、地下水和废水基质中的 PFAS 残留物。表 1 列出了本研究中分析的 PFAS 化合物（包括代用品）。

表 1. PFAS 化合物及其缩写

化合物	缩写
11-氯二十氟-3-氧杂十一烷-1-磺酸钾	11Cl-PF30Uds
氟调聚物磺酸盐 4:2	4-2 FTS
氟调聚物磺酸盐 8:2	8-2 FTS
9-氯十六氟-3-氧杂环己酮-1-磺酸钾	9Cl-PF30NS
十二氟-3H-4,8-二氧杂壬酸钠	ADONA
N-甲基-d3-全氟-1-辛烷磺酰氨基乙酸	d3-N-MeFOSAA
N-乙基-d5-全氟-1-辛烷磺酰氨基乙酸	d5-N-EtFOSAA
1H,1H,2H,2H-全氟-1-[1,2- ¹³ C ₂]己烷磺酸钠 (4:2)	M2 4-2 FTS
1H,1H,2H,2H-全氟-1-[1,2- ¹³ C ₂]癸烷磺酸钠 (8:2)	M2 8-2 FTS
全氟-正-[1,2- ¹³ C ₂]十二烷酸	M2PFDoA
全氟-正-[1,2- ¹³ C ₂]十四烷酸	M2PFTreA
全氟-1-[2,3,4- ¹³ C ₃]丁烷磺酸钠	M3PFBS
全氟-1-[1,2,3- ¹³ C ₃]己烷磺酸钠	M3PFHxS
全氟-正-[1,2,3,4- ¹³ C ₄]丁酸	M4PFBA
全氟-正-[1,2,3,4- ¹³ C ₄]庚酸	M4PFHpA
全氟-正-[1,2,3,4,6- ¹³ C ₅]己酸	M5PFHxA
全氟-正-[1,2,3,4,5- ¹³ C ₅]戊酸	M5PFPeA
全氟-正-[1,2,3,4,5,6- ¹³ C ₆]癸酸	M6PFDA
全氟-正-[1,2,3,4,5,6,7- ¹³ C ₇]十一烷酸	M7PFUnA
全氟-1-[¹³ C ₈]辛烷磺酰胺	M8FOSA
全氟-正-[¹³ C ₈]辛酸	M8PFOA
全氟-[¹³ C ₈]辛烷磺酸钠	M8PFOS
全氟-正-[¹³ C ₉]壬酸	M9PFNA

化合物	缩写
N-乙基-N-((十七氟辛基)磺酰基)甘氨酸	N-EtFOSAA
N-(十七氟辛基磺酰基)-N-甲基甘氨酸	N-MeFOSAA
全氟丁酸	PFBA
全氟丁烷磺酸盐	PFBS
全氟癸酸	PFDA
全氟十二烷酸	PFDoA
全氟癸烷磺酸盐	PFDS
全氟(2-乙氧基乙烷)磺酸	PFEESA
全氟庚酸	PFHpA
全氟庚烷磺酸盐	PFHpS
全氟己酸	PFHxA
全氟己烷磺酸盐	PFHxS
全氟-4-甲氧基丁酸	PFMBA
全氟壬酸	PFNA
全氟壬烷磺酸盐	PFNS
全氟辛酸	PFOA
全氟辛烷磺酸盐	PFOS
全氟辛烷磺酰胺	PFOSA
全氟戊酸	PFPeA
全氟戊烷磺酸盐	PFPeS
全氟十四烷酸	PFTreA
全氟十三烷酸	PFTriA
全氟十一烷酸	PFUnA

实验部分

设备

本研究的所有实验均使用 Agilent 1290 Infinity II 液相色谱仪与 Agilent 6470A 三重四极杆液质联用系统，其中 Agilent 1290 Infinity II 液相色谱仪配备 G7167B Multisampler、G7120A 二元泵和 G7116B 大容量柱温箱。采用 Agilent MassHunter 工作站软件进行仪器控制、数据采集、定性和定量数据分析以及报告。

样品和标准品

研究基质为试剂水和水样。PFAS 原生化合物和代用品混标购自 Wellington Laboratories (Guelph, Ontario, Canada)。样品和标准品均于 5 °C 冷藏。

方法

描述

所用方法包括：将水样分散于甲醇中 (1:1 v:v)，然后过滤 (Captiva NY/GF 0.2 µm，部件号 5190-5132)，用乙酸将 pH 调节至酸性。利用 LC/MS 在负离子电喷雾电离模式下进行分析测定。表 2 列出了针对特定分析物的 LC/MS 条件。支持性方法参考为 ASTM 7979。

色谱条件

参数	设置
分析柱	Agilent ZORBAX RRHD Stable Bond C18, 100 × 2.1 mm, 1.8 µm (部件号 858700-902)
分离柱	Agilent ZORBAX RRHD Eclipse Plus C18, 50 × 3.0 mm, 1.8 µm (部件号 959757-302)
柱温箱	50 ± 2 °C
进样量	30 µL
运行时间	18 分钟
自动进样器	5 ± 2 °C
流动相 A	0.1% 乙酸水溶液
流动相 B	0.1% 乙酸的甲醇溶液

梯度设置

时间 (min)	流速 (mL/min)	%A	%B
0	0.4	95	5
14.0	0.4	5	95
15.0	0.4	0	100
18.0	0.4	0	100
18.1	0.4	95	5
25.0	0.4	95	5

质谱参数

参数	设置
MS 采集	动态 MRM
分析周期	500 ms
停止时间	18 分钟
离子源类型	安捷伦喷射流电喷雾离子源 (AJS ESI 负离子模式)
干燥气温度	250 °C
干燥气流速	8 L/min
雾化器	25 psi
鞘气温度	375 °C
鞘气流速	12 L/min
毛细管电压	3500 V
喷嘴电压	2000 V
母离子和子离子分辨率	Unit
针对特定化合物的条件	见表 2

表 2. 针对特定分析物的 LC/MS 条件：母离子/子离子离子对、碎裂电压、碰撞能量 (CE)、碰撞池加速器电压 (CAV) 和保留时间 (RT)

化合物组	化合物	类型	母离子	子离子	RT (min)	Δ RT (min)	碎裂电压 (V)	CE (V)
磺酸盐	11Cl-PF3OUdS	目标物	630.9	450.9	14.35	1.5	152	32
磺酸盐	11Cl-PF3OUdS	目标物	630.9	83	14.35	1.5	152	32
FTS	4-2 FTS	目标物	327	306.9	10.25	1.02	125	24
FTS	4-2 FTS	目标物	327	80.9	10.25	1.02	125	44
FTS	8-2 FTS	目标物	527	506.8	13.76	1.36	170	28
FTS	8-2 FTS	目标物	527	80.9	13.76	1.36	170	40
磺酸盐	9Cl-PF3ONS	目标物	530.9	350.9	13.32	1.2	152	28
磺酸盐	9Cl-PF3ONS	目标物	530.9	83	13.32	1.2	152	32
酸	ADONA	目标物	377	250.9	11.76	1.2	54	8
酸	ADONA	目标物	377	85.1	11.76	1.2	54	32
FOSAA	d3-N-MeFOSAA	代用品	573	418.9	14.28	1.42	115	16
FOSAA	d5-N-EtFOSAA	代用品	589	418.9	14.5	1.44	115	24
FTS	M2 4-2 FTS	代用品	329	309	10.25	1.06	125	20
FTS	M2 8-2 FTS	代用品	529	509	13.76	1.36	170	28
酸	M2PFDa	代用品	614.9	570	14.96	1.49	79	8
酸	M2PFTreA	代用品	715	670	15.78	2.00	100	13
磺酸盐	M3PFBS	代用品	302	80	9.09	1.06	100	37
磺酸盐	M3PFHxS	代用品	402	80	11.48	1.13	100	53
酸	M4PFBA	代用品	217	172	6.12	1.31	60	8
酸	M4PFHpA	代用品	367	322	11.71	1.27	72	1
酸	M5PFHxA	代用品	318	273	10.59	1.12	70	4
酸	M5PFPeA	代用品	268	223	8.96	1.24	60	4
酸	M6PFDA	代用品	519	474	13.93	1.38	81	8
酸	M7PFUnA	代用品	570	525	14.48	1.44	100	12
FOSA	M8FOSA	代用品	506	77.9	13.44	1.34	125	40
酸	M8PFOA	代用品	421	376	12.58	1.27	69	8
磺酸盐	M8PFOS	代用品	507	80	12.99	1.28	100	54
酸	M9PFNA	代用品	472	427	13.30	1.32	66	8
FOSAA	N-EtFOSAA	目标物	584	483	14.50	1.45	115	16
FOSAA	N-EtFOSAA	目标物	584	418.9	14.50	1.45	115	20
FOSAA	N-MeFOSAA	目标物	570	482.9	14.28	1.42	115	12
FOSAA	N-MeFOSAA	目标物	570	419	14.28	1.42	115	20
酸	PFBA	目标物	213	169	6.12	1.48	60	8
磺酸盐	PFBS	目标物	298.9	98.9	9.09	1.09	100	33
磺酸盐	PFBS	目标物	298.9	80	9.09	1.09	100	45
酸	PFDA	目标物	513	469	13.93	1.38	81	8
酸	PFDA	目标物	513	218.7	13.93	1.38	100	16
酸	PFDa	目标物	613	569	14.96	1.49	79	8
酸	PFDa	目标物	613	268.7	14.96	1.49	100	20
磺酸盐	PFDS	目标物	598.9	99	14.11	1.4	100	56
磺酸盐	PFDS	目标物	598.9	80	14.11	1.4	100	72

化合物组	化合物	类型	母离子	子离子	RT (min)	Δ RT (min)	碎裂电压 (V)	CE (V)
酸	PFEESA	目标物	314.9	135	9.73	1.00	103	24
酸	PFEESA	目标物	314.9	69.1	9.73	1.00	103	60
酸	PFHpA	目标物	362.9	319	11.71	1.16	72	1
酸	PFHpA	目标物	362.9	169	11.71	1.16	72	16
磺酸盐	PFHpS	目标物	448.9	98.7	12.3	1.22	100	44
磺酸盐	PFHpS	目标物	448.9	79.7	12.3	1.22	100	60
酸	PFHxA	目标物	313	268.9	10.59	1.05	70	8
酸	PFHxA	目标物	313	119	10.59	1.05	70	18
磺酸盐	PFHxS	目标物	398.9	99	11.48	1.13	100	49
磺酸盐	PFHxS	目标物	398.9	80	11.48	1.13	100	41
酸	PFMBA	目标物	279	85.1	9.53	1.00	54	8
酸	PFMBA	目标物	279	234.9	9.53	1.00	54	0
酸	PFNA	目标物	463	419	13.3	1.32	66	8
酸	PFNA	目标物	463	169	13.3	1.32	66	13
磺酸盐	PFNS	目标物	548.9	98.9	13.58	1.34	165	48
磺酸盐	PFNS	目标物	548.9	79.9	13.58	1.34	165	48
酸	PFOA	目标物	413	369	12.58	1.25	69	8
酸	PFOA	目标物	413	169	12.58	1.25	69	16
磺酸盐	PFOS	目标物	498.9	99	12.99	1.27	100	46
磺酸盐	PFOS	目标物	498.9	80	12.99	1.27	100	54
FOSA	PFOSA	目标物	497.9	77.9	13.44	1.34	125	40
FOSA	PFOSA	目标物	497.9	47.9	13.44	1.34	100	96
酸	PFPeA	目标物	263	218.9	8.97	0.96	60	4
磺酸盐	PFPeS	目标物	348.9	98.9	10.47	1.03	135	36
磺酸盐	PFPeS	目标物	348.9	79.9	10.47	1.03	135	44
酸	PFTreA	目标物	713	669	15.78	2.00	100	9
酸	PFTreA	目标物	713	169	15.78	2.00	100	30
酸	PFTriA	目标物	663	619	15.39	1.53	91	9
酸	PFTriA	目标物	663	169	15.39	1.53	100	30
酸	PFUnA	目标物	563	519	14.48	1.44	73	5
酸	PFUnA	目标物	563	269	14.48	1.44	100	19

评估程序

通过分析代表性试剂水样（作为基质空白），并对浓度为 160 ng/L 的 QC 加标样品重复测定六次，对加标浓度为 10 ng/L 和 20 ng/L 的 QC 样品重复测定三次，对方法性能进行评估。采用 1/x 加权的外部校准曲线进行定量分析。

评估标准

系统适用性

- 浓度为 80 ng/L 的校验标样 (CS) 的计算值与预期值之差在 $\pm 30\%$ 范围内
- 每种 CS 的 RT 与标准品峰的平均值的相对误差 (RE%) 小于 2%

特异性

- 每个分析物峰的 RT 与标准品峰的平均值的 RE% 小于 2%
- 离子比处于 30% 的允差范围内

线性和范围

- 校准曲线的 R^2 高于 0.99
- 每种工作标样的残差在 $\pm 30\%$ 范围内
- 校准标样应涵盖分析物的浓度范围

精密度

重复测定（至少三次）的 $RSD \leq 30\%$ 。

准确度

加标浓度为 160 ng/L 时平均回收率在 70%–130% 范围内，加标浓度为 10 ng/L 和 20 ng/L 时平均回收率在 50%–150% 范围内。

结果与讨论

系统适用性

如果 CS 中所有化合物（包括代用品）的 RT 的 %RE 不超过 2%，则适用性评估结果为可接受。CS 中所有化合物的准确度均符合 70%–130% 的标准，如图 1 所示。

特异性

利用多反应监测 (MRM) 检测 PFAS。在定量分析中，通过评估 MS/MS 离子对的相对强度比率和分析物峰的 RT 对 MS/MS 离子对进行监测，能够将目标分析物与潜在的干扰物质区分开。图 2 为 80 ng/L 复合工作标样 (WS) 的提取离子色谱图示例，该复合工作标样涵盖了所有分析物，且溶于含有 0.1% 乙酸的 1:1 (v:v) 超纯水:甲醇溶液。图 3 为含有 0.1% 乙酸的 1:1 (v:v) 超纯水:甲醇溶液（试剂空白）的提取离子色谱图。

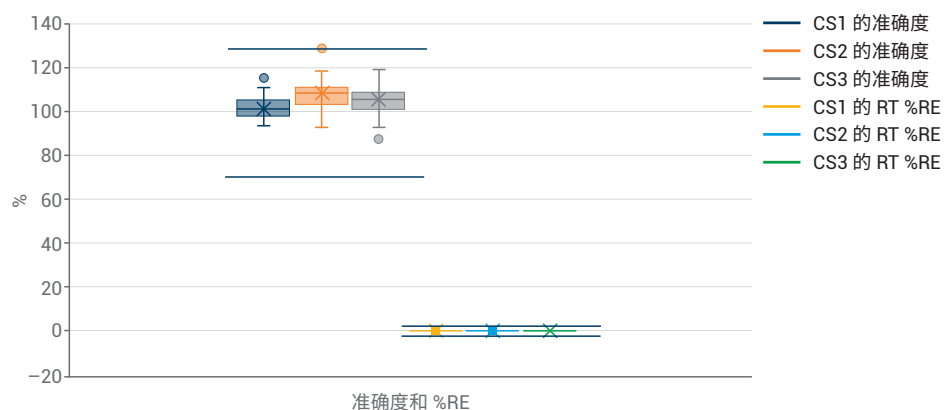


图 1. 准确度和 CS 的 RT %RE

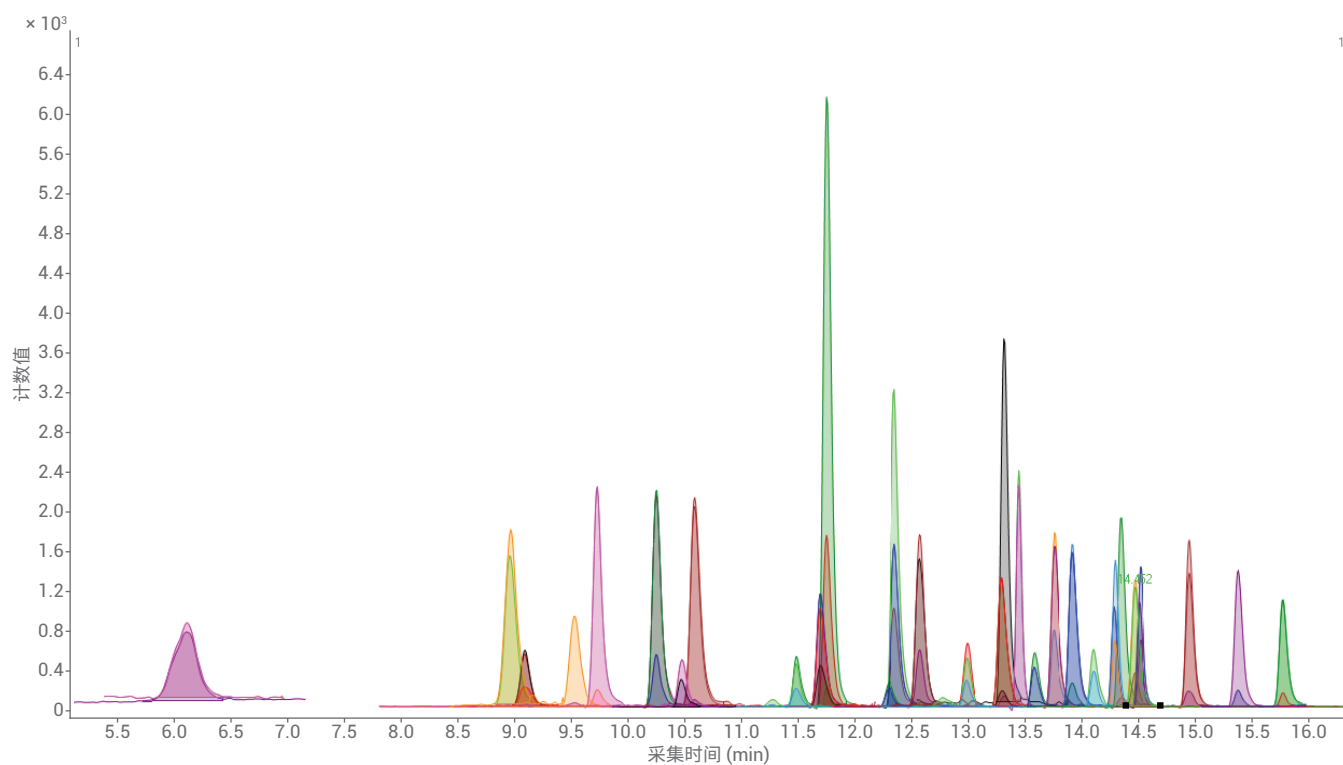


图 2. 复合工作标样的提取离子色谱图，前者涵盖所有分析物，其浓度为 80 ng/L 且溶于含有 0.1% 乙酸的 1:1 (v:v) 超纯水:甲醇溶液

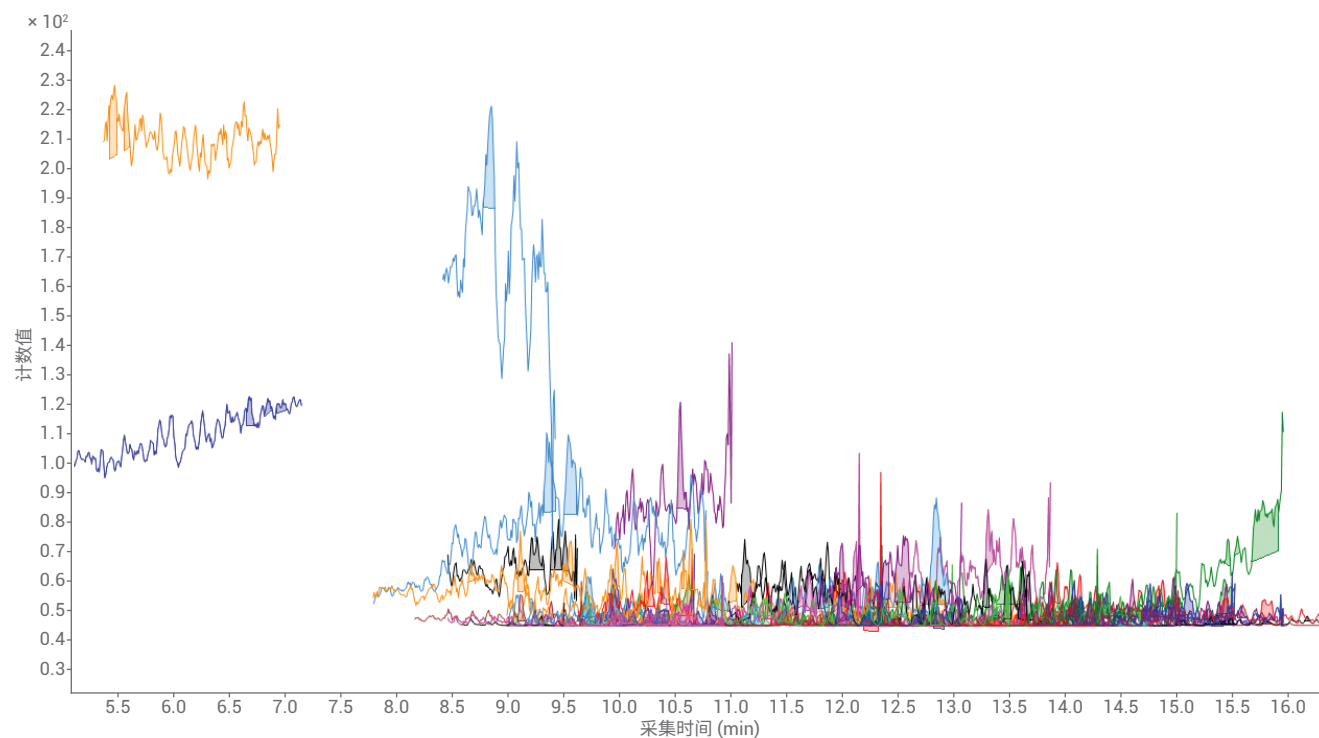


图 3. 含有 0.1% 乙酸的 1:1 (v:v) 超纯水:甲醇溶液（试剂空白）的提取离子色谱图

范围和线性

在 5–200 ng/L 的浓度范围内，对该方法进行评估。

为评估方法线性，配制浓度为 5、10、20、40、60、80、100、150 和 200 ng/L 的各种 PFAS（包括代用品）的 WS 溶液。对于 WS1 至 WS9，除某次 WS1 进样得到的 PFHpS 结果以外，所有化合物的校准曲线残差均 ≤ 30%。图 4 显示了校准曲线残差的统计数据。使用线性校准和加权因子 1/x 来测定线性。对于所有分析物，R² 值均高于 0.99。

准确度和精密度

在萃取之前向样品中加入分析物标准溶液得到 10、20 和 160 ng/L 的加标样品，用于测定准确度。未使用内标对结果进行归一化处理。利用 18 种代表不同 PFAS 组的同位素标记标准品作为代用品，对方法和仪器性能进行监测，但是不像 ASTM 7979 那样将其用于响应归一化。所有样品的内标加标浓度为 160 ng/L。

对浓度为 160 ng/L 的加标样品重复测定六次，对 10 ng/L 和 20 ng/L 的加标样品重复测定三次，对精密度进行评估。

对于所检测的所有 28 种 PFAS，用于衡量准确度的加标回收率和用于衡量精密度的 %RSD 均满足合格标准。图 5 显示了浓度为 160 ng/L 的加标样品的准确度和精密度结果。表 3 列出了浓度为 10 ng/L 和 20 ng/L 的加标样品的准确度和精密度详细结果。

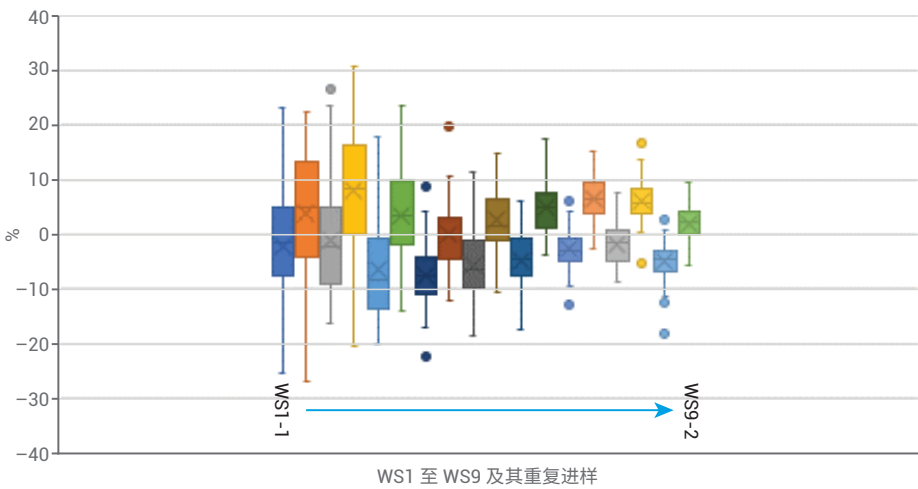


图 4. 工作标样的校准曲线残差



图 5. 浓度为 160 ng/L 的加标样品的测量准确度（加标回收率，%）和精密度 (%RSD)，n = 6

方法报告限

该方法确定报告限 (RL) 而不是定量限 (LOQ)。在浓度为 10 ng/L 和 20 ng/L 的加标样品满足回收率和精密度 (RSD) 评估标

准的情况下，确定每种分析物的 RL，见表 3。结果表明，除 PFDS 和 PFHpS 的 RL 为 20 ng/L 以外，其余各种 PFAS 分析物的 RL 为 10 ng/L。在实际分析中，许

多化合物的 RL 可以达到 10 ng/L 以下，并且为了获得极限灵敏度，用户可以使用 Agilent 6495 三重四极杆液质联用系统。

表 3. 浓度为 10 ng/L 和 20 ng/L 的加标样品（代用品加标浓度为 160 ng/L）的测量准确度（加标回收率）和精密度 (%RSD)，n = 3（下页续）

化合物	加标回收率 (%), 基质中加标浓度为 10 ng/L						加标回收率 (%), 基质中加标浓度为 20 ng/L					
	LOQ-10-1	LOQ-10-2	LOQ-10-3	均值	STD	RSD%	LOQ-20-1	LOQ-20-2	LOQ-20-3	均值	STD	RSD%
11Cl-PF3OUdS	121	117	120	119	2.2	1.8	112	120	118	116	4.2	3.6
4-2 FTS	122	111	111	115	6.6	5.8	87	103	97	96	8.2	8.6
8-2 FTS	95	121	93	103	15.6	15.2	113	115	114	114	0.9	0.8
9Cl-PF3ONS	106	124	102	110	11.6	10.5	116	104	103	108	7.4	6.8
ADONA	94	111	117	107	11.9	11.1	97	103	107	102	4.7	4.6
d3 N-MeFOSAA	89	100	105	98	8.4	8.5	90	97	104	97	7.3	7.5
d5-N-EtFOSAA	100	99	108	102	5.0	4.9	100	97	99	99	1.4	1.4
M2 4-2 FTS	96	108	89	98	9.6	9.9	96	101	100	99	2.6	2.7
M2 8-2 FTS	91	95	96	94	2.9	3.1	89	103	97	97	6.8	7.1
M2PFDoA	96	105	90	97	7.8	8.0	93	100	107	100	7.3	7.3
M2PFTreA	99	100	97	99	1.5	1.6	99	98	95	97	1.7	1.8
M3PFBS	99	114	99	104	9.0	8.7	95	101	105	100	5.1	5.1
M3PFHxS	99	112	101	104	6.9	6.6	94	107	98	100	6.7	6.7
M4PFBA	89	94	92	92	2.6	2.8	91	95	90	92	2.7	3.0
M4PFHpA	98	94	94	95	2.0	2.1	96	93	91	93	2.7	2.9
M5PFHxA	95	104	93	97	6.2	6.4	98	99	97	98	1.1	1.1
M5PFPeA	92	97	91	94	3.3	3.5	91	95	93	93	2.3	2.4
M6PFDA	97	110	92	100	9.6	9.6	95	95	96	96	0.6	0.7
M7PFUnA	96	101	98	98	2.4	2.5	96	99	102	99	2.8	2.9
M8 FOSA	98	103	96	99	3.6	3.7	91	100	98	96	4.8	5.0
M8PFOA	93	102	99	98	4.8	4.9	90	92	98	94	4.2	4.5
M8PFOS	96	103	105	101	4.5	4.5	92	99	98	97	3.9	4.0
M9PFNA	84	95	89	89	5.6	6.3	91	98	94	94	3.6	3.9
N-EtFOSAA	122	137	107	122	15.0	12.3	113	107	112	111	3.0	2.7
N-MeFOSAA	104	139	110	118	19.2	16.4	106	141	106	117	20.1	17.1
PFBA	105	88	108	101	10.8	10.7	95	116	101	104	11.1	10.6
PFBS	105	118	100	108	9.0	8.4	118	113	121	117	3.8	3.2
PFDA	115	89	126	110	18.8	17.1	107	114	100	107	7.0	6.6
PFDoA	114	102	87	101	13.4	13.3	117	90	109	106	14.0	13.3
PFDS	38	81	76	65	23.4	36.0	90	106	75	90	15.1	16.7
PFEESA	55	53	56	55	1.3	2.3	130	130	116	125	7.7	6.1
PFHpA	107	146	123	125	19.3	15.4	101	131	108	114	15.5	13.6
PFHpS	56	115	77	83	29.4	35.5	117	139	131	129	11.2	8.7
PFHxA	99	106	109	104	5.2	5.0	103	120	131	118	13.8	11.7
PFHxS	98	126	117	114	14.3	12.6	104	88	110	100	11.3	11.3

化合物	加标回收率 (%), 基质中加标浓度为 10 ng/L						加标回收率 (%), 基质中加标浓度为 20 ng/L					
	LOQ-10-1	LOQ-10-2	LOQ-10-3	均值	STD	RSD%	LOQ-20-1	LOQ-20-2	LOQ-20-3	均值	STD	RSD%
PFMBA	135	147	140	141	5.9	4.2	123	132	121	125	5.8	4.6
PFNA	83	121	101	102	19.1	18.8	101	99	117	106	10.0	9.4
PFNS	87	122	90	100	19.3	19.4	96	128	93	106	19.3	18.2
PFOA	118	136	109	121	13.4	11.1	99	119	106	108	9.9	9.1
PFOS	92	108	90	97	9.6	9.9	136	98	115	116	18.9	16.3
PFOSA	82	99	102	94	10.5	11.1	86	104	91	94	9.4	10.0
PFPeA	103	102	109	105	4.1	3.9	113	113	107	111	3.2	2.9
PFPeS	101	99	117	106	9.8	9.3	103	82	111	99	15.4	15.6
PFTreA	91	106	103	100	8.0	8.0	112	98	97	102	8.6	8.4
PFTriA	102	116	95	105	10.6	10.1	114	102	101	106	6.9	6.6
PFUnA	120	128	100	116	14.4	12.4	107	107	105	106	1.2	1.1

样品测试

利用经过评估的方法分析几种未知水样。
 样品分析结果和代用品加标回收率如表 4 所示。代用品加标回收率在 70%–130% 范围内，并且所有检测的 PFAS 均满足合格标准。

表 4. 样品分析结果和水样中的代用品加标回收率（下页续）

化合物	样品分析结果, ng/L						代用品加标回收率 (%), 基质中加标浓度为 160 ng/L					
	未知水样 1	未知水样 2	未知水样 3	未知水样 4	未知水样 5	未知水样 6	未知水样 1	未知水样 2	未知水样 3	未知水样 4	未知水样 5	未知水样 6
11Cl-PF3OUdS	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL						
4-2 FTS	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL						
M2 4-2 FTS	165.5	178.6	163.4	159.7	160.8	148.2	111	119	109	107	108	99
8-2 FTS	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL						
M2 8-2 FTS	178.1	196.0	187.1	160.8	184.8	164.1	116	128	122	105	120	107
9Cl-PF3ONS	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL						
ADONA	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL						
N-EtFOSAA	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL						
d5-N-EtFOSAA	205.8	191.1	195.7	181.2	190.6	177.1	129	119	122	113	119	111
N-MeFOSAA	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL						
d3 N-MeFOSAA	192.2	200.2	192.8	174.5	189.9	162.2	120	125	120	109	119	101
PFBA	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL						
M4PFBA	164.6	175.0	167.0	165.7	143.3	150.8	103	109	104	104	90	94
PFBS	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL						
M3PFBS	183.9	178.0	179.5	176.8	165.1	164.3	124	120	121	119	111	110
PFDA	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL						
M6PFDA	167.1	204.2	189.1	147.7	198.4	171.4	104	128	118	92	124	107

	样品分析结果, ng/L						代用品加标回收率 (%), 基质中加标浓度为 160 ng/L					
化合物	未知水样 1	未知水样 2	未知水样 3	未知水样 4	未知水样 5	未知水样 6	未知水样 1	未知水样 2	未知水样 3	未知水样 4	未知水样 5	未知水样 6
PFD _o A	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL						
M2PFD _o A	180.6	187.8	195.2	156.9	193.9	193.7	113	117	122	98	121	121
PFDS	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL						
PFEESA	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL						
PFHpA	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL						
M4PFHpA	172.7	186.5	173.7	157.5	160.6	165.5	108	117	109	98	100	103
PFHpS	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL						
PFHxA	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL						
M5PFHxA	182.0	192.1	180.9	171.9	177.5	170.6	114	120	113	107	111	107
PFHxS	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL						
M3PFHxS	179.1	187.9	171.5	171.0	170.4	144.9	118	124	113	113	113	96
PFMBA	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL						
PFNA	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL						
M9PFNA	187.5	198.3	200.4	180.2	180.7	161.5	117	124	125	113	113	101
PFNS	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL						
PFOA	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL						
M8PFOA	169.2	182.1	203.8	170.2	175.2	167.9	106	114	127	106	109	105
PFOS	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL						
M8PFOS	191.8	189.1	164.7	175.3	170.2	168.2	125	123	108	114	111	110
PFOSA	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL						
M8PFOSA	199.7	206.4	193.1	174.3	196.1	184.4	125	129	121	109	123	115
PFPeA	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL						
M5PFPeA	175.7	172.9	170.5	165.5	160.7	164.7	110	108	107	103	100	103
PFPeS	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL						
PFTreA	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL						
M2PFTreA	137.7	114.4	166.0	134.2	174.1	138.5	86	72	104	84	109	87
PFTriA	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL						
PFUnA	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL	< RL						
M7PFUnA	204.3	192.9	197.0	156.9	190.1	197.5	128	121	123	98	119	123

注：代用品回收率中的空单元格表示本研究中的原生化合物无可用的稳定同位素标准品或未包括在内

结论

本应用简报介绍了一种用于定量分析水样中 28 种 PFAS 的 UHPLC/MS/MS 方法，该方法将 1290 Infinity II 液相色谱仪与 6470A 三重四极杆液质联用系统联用，并采用 MassHunter 工作站软件。评估结果表明，对于所列出的 PFAS，利用该方法分析水样时能够获得足够高的特异性、线性、准确度和精密度。为获得比 ASTM 7979 或 EPA 草案方法 8327 中规定水平更高的灵敏度，可以采用 Agilent 6495 三重四极杆液质联用系统。

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

www.agilent.com

本文中的信息、说明和指标如有变更，恕不另行通知。