

使用Atlantis™ BEH™ C₁₈ AX混合模式色谱柱 将超短链PFAS纳入单次进样的PFAS检测范 围

Kari L. Organtini, Kenneth J. Rosnack, Peter Hancock

Waters Corporation

摘要

由于传统的长链PFAS已由制造商自发停产，取而代之的是具有类似化学性质的短链和超短链PFAS。使用常见反相色谱柱的色谱方法无法保留超短链PFAS，因此通常不作为定量方法使用。鉴于PFAS分子的混合模式化学性质，同时具有疏水性和离子性，因此Atlantis Premier BEH C₁₈ AX色谱柱等混合模式反向和阴离子交换色谱柱填料可用于保留此类分子。使用Atlantis Premier BEH C₁₈ AX色谱柱时，TFA、PFPrA和PFPrS得到了充分保留，并且可以使用与传统长链PFAS化合物相同的方法进行分析和定量。研究人员利用混合模式色谱柱对多种水样品进行了评估，并从垃圾渗滤液样品中检出了大量的TFA、PFPrA和PFPrS。Atlantis Premier BEH C₁₈ AX色谱柱的使用拓宽了通过单次进样进行常规检测和定量的PFAS范围，将超短链PFAS纳入其中，最短可分析C2碳链长度的分子。

优势

- 一种利用化合物的混合模式（疏水和离子）特性，将可分析的PFAS化合物范围扩展至C2至C14链长PFAS的单一方法
 - 使用Atlantis Premier BEH C₁₈ AX色谱柱改善超短链和短链PFAS的色谱保留性和峰形，减少手动峰积分
 - 针对真实基质样品中的46种PFAS得到了准确的定量结果，并使用ERA废水基质认证参比物质进行验证，以评估报告的可靠性
-

简介

随着人们意识到传统长链（C8及以上）PFAS对环境的影响和对健康的危害，制造商调整了生产方式，改为使用短链(C4~C7)和超短链(C3及以下) PFAS¹。最初，人们认为这些取代的短链和超短链PFAS对环境和健康的影响较小，但研究表明，此类分子在环境中的移动性很高，会降解为非常持久的最终产物，并且仍然会造成严重的健康问题²。为了更广泛、更准确地代表PFAS污染，监管方法的适用范围可能会有所扩展，对此，我们需要能够轻松准确地定量超短链化合物的方法。但是，许多现行的PFAS法规和标准方法均未将PFAS纳入超短链类别。表1汇总了目前全球通用的PFAS分析方法和法规，以及每种方法中包含的短链和超短链PFAS。如表中所示，除了ASTM（美国材料和试验协会）8421方法中包含全氟丙酸(PFPrA)之外，其他方法中很少包含链长小于C4的PFAS。尽管超短链PFAS通常不包括在常规PFAS方法中，但这并不意味着它们在常见样品中不存在。例如，在2019年的一项研究中，Bjornsdotter等人在瑞典水样品中鉴定出超短链PFAS，例如三氟乙酸(TFA)和全氟丙烷磺酸(PFPrS)，浓度分别为14,000 ng/L和15,000 ng/L³。此外，在2021年的一项研究中，Aro等人得出结论，样品中总氟含量的一部分未知物可能来自超短链PFAS。在该研究中，废水样品总氟含量的10%可被鉴定，而4%的总氟含量经鉴定为超短链PFAS⁴。常规定量方法对于超短链PFAS的遗漏可能导致严重低估样品中存在的PFAS。

方法/法规	TFA (C2)	PFPrA (C3)	PFBA (C4)	PFPeA (C5)	PFHxA (C6)	PFHpA (C7)	PFPrS (C3)	PFBS (C4)	PFPeS (C5)	PFHxS (C6)	PFHpS (C7)
EPA 537.1					X	X		X		X	
EPA 533			X	X	X	X		X	X	X	X
EPA 1633			X	X	X	X		X	X	X	X
EU 2020/2184			X	X	X	X		X	X	X	X
EU 2022/2388										X	
ISO 21675			X	X	X	X		X		X	X
ASTM 8421		X	X	X	X	X		X	X	X	X

表1.现行方法和法规中包含的超短链和短链PFAS概述。

随着PFAS使用和生产的发展，常规PFAS方法中可能未包括超短链PFAS的一个可能原因是这些小分子化合物难以通过色谱分离。PFAS分析通常使用反相色谱柱，最常用的是C₁₈填料。PFAS分子上的疏水性CF链使保留和分离机制能够在这些条件下发挥作用。但是，随着CF链长缩短，C₁₈色谱柱的疏水性保留能力也会降低。在典型的基于C₁₈的方法中，PFBA在非常接近色谱柱死体积的位置洗脱，表明其几乎无法保留。除CF链的疏水性色谱柱结构外，大多数PFAS还具有带负电荷的离子头部基团，这是一种可用的次级保留机制。Atlantis Premier BEH C₁₈ AX色谱柱将反相C₁₈保留填料和阴离子交换(AX)保留填料结合到一根色谱柱中。在这种情况下，混合模式色谱柱可以同

时利用PFAS化合物的两种特性。以弱阴离子交换(WAX)小柱形式进行固相萃取(SPE)时，反相和阴离子交换结合是PFAS样品前处理的常用方法。在这种混合模式填料的应用中，阴离子交换部分对于保留短链PFAS非常重要，因为短链PFAS的反相机制比长链PFAS弱。

本研究评估了混合模式填料色谱柱Atlantis Premier BEH C₁₈ AX色谱柱，以确定短链和超短链PFAS在该色谱柱上的保留方式，以及是否可以用于常规分析超短链PFAS到长链PFAS。

实验

样品前处理

分析的水样由美国国家环境保护局第5分局提供。水样采集地点如下：垃圾渗滤液、金属修整机、废水出水、废水进水、医院废弃物、公共汽车清洗站、发电厂、纸浆和纸厂、地下水和地表水。此外，还将一并分析来自ERA的废水认证参比物质（品目编号404 <<https://www.eraqc.com/pfas-in-wastewater-wp-era001663?returnurl=%2fsearch%3fq%3d404>>）和收集的水样，从而通过认证物质评价方法性能。

根据ASTM 8421方法制备水样⁵。将每个 5 mL水样全部用于分析，从而避免因二次抽样导致的任何化合物损失。每个样品中添加160 ng/L同位素标记的替代物。然后向每个水样中加入5 mL甲醇，涡旋混合。使用25 mm, 0.2 μm聚丙烯针式过滤器对全部10 mL样品进行注射式过滤。过滤后，向每个样品中加入10 μL乙酸。可根据需要向pH > 4的样品中额外加入乙酸。将每个样品的等分试样转移至聚丙烯自动进样器样品瓶中，使用Xevo™ TQ Absolute MS与经过PFAS方法包改良的ACQUITY™ I Class FTN BSM系统联用进行分析。

数据审查

根据ASTM 8421中的数据质量指南对使用Atlantis Premier BEH C₁₈ AX色谱柱生成的数据进行评价，指南内容包括：

1. 必须使用一条至少包含5个数据点的线性校准曲线。
2. 校准标准品与QC样品进样的偏差（%误差）必须在预期浓度的30%以内。
3. 空白响应值必须小于LLOQ进样响应值的50%。
4. 内标响应值必须在批次中位响应值的30%以内。
5. 内标和天然的保留时间必须在预期保留时间的5%以内(+/- 3 sec)。

6. 离子丰度比必须在平均参比峰的30%以内。

液相色谱条件

液相色谱系统:	配备FTN的ACQUITY I Class BSM
样品瓶:	700 μ L聚丙烯螺口带盖瓶(P/N: 186005219)
分析柱:	Atlantis Premier BEH C ₁₈ AX 2.1 x 100 mm, 1.7 μ m (P/N: 186009368)
隔离柱:	Atlantis Premier BEH C ₁₈ AX 2.1 x 50 mm, 2.5 μ m (P/N: 186009390)
柱温:	35 °C
样品温度:	10 °C
进样体积:	30 μ L
流速:	0.3 mL/min
流动相A:	2 mM乙酸铵水溶液
流动相B:	含0.1%(v/v)氢氧化铵的甲醇溶液

梯度表

时间 (min)	%A	%B	曲线
0	99	1	初始
2	99	1	6
3	75	25	6
8	50	50	6
15	15	85	6
16	0	100	6
20	0	100	6
20.1	100	0	6
23.5	100	0	6
24	99	1	6

MS条件

质谱系统: Xevo TQ Absolute

电离模式: ESI-

毛细管电压: 0.5 kV

离子源温度: 100 °C

脱溶剂气温度: 350 °C

脱溶剂气流速: 900 L/h

锥孔气流速: 150 L/h

MRM方法：

有关完整MRM方法的详细信息，请参见附录

数据管理

软件：

waters_connect™定量分析软件

结果与讨论

在混合模式色谱柱问世之前，PFAS分析主要采用反相机制(C₁₈)⁶。链长在C₄以下的羧酸系列PFAS在标准反相色谱柱上无法充分保留，如图1上方的色谱图所示。在本例中，TFA(C₂)和PFPrA(C₃)在色谱柱的死体积区域(T₀)内洗脱。除了这种峰形畸变（如PFPrA所示），同时也显著增加了由同样在该区域洗脱的未保留基质化合物造成的基质干扰机会。借助兼具反相和阴离子交换机制的混合模式Atlantis Premier BEH C₁₈ AX色谱柱，CF链的疏水性将不再是PFAS的唯一保留模式。官能基团（例如-CO₂或-SO₄）也会影响保留性，可增加超短链PFAS（如TFA和PFPrA）的保留性，这些分子的CF链的疏水性不及链长较长的PFAS。图1中的底部色谱图表明，采用本研究所述的梯度，超短链PFAS在Atlantis Premier BEH C₁₈ AX色谱柱上的保留性增加。尽管TFA在混合模式色谱柱上保留，但在实验室制备的样品中仍然存在大量TFA污染，该实验室还在其他应用中使用TFA作为流动相改性剂。这使得样品和标准品中的TFA污染难以控制。因此，本应用纪要所示的色谱图使用同位素标记的TFA类似物作为TFA的代表性峰。

。

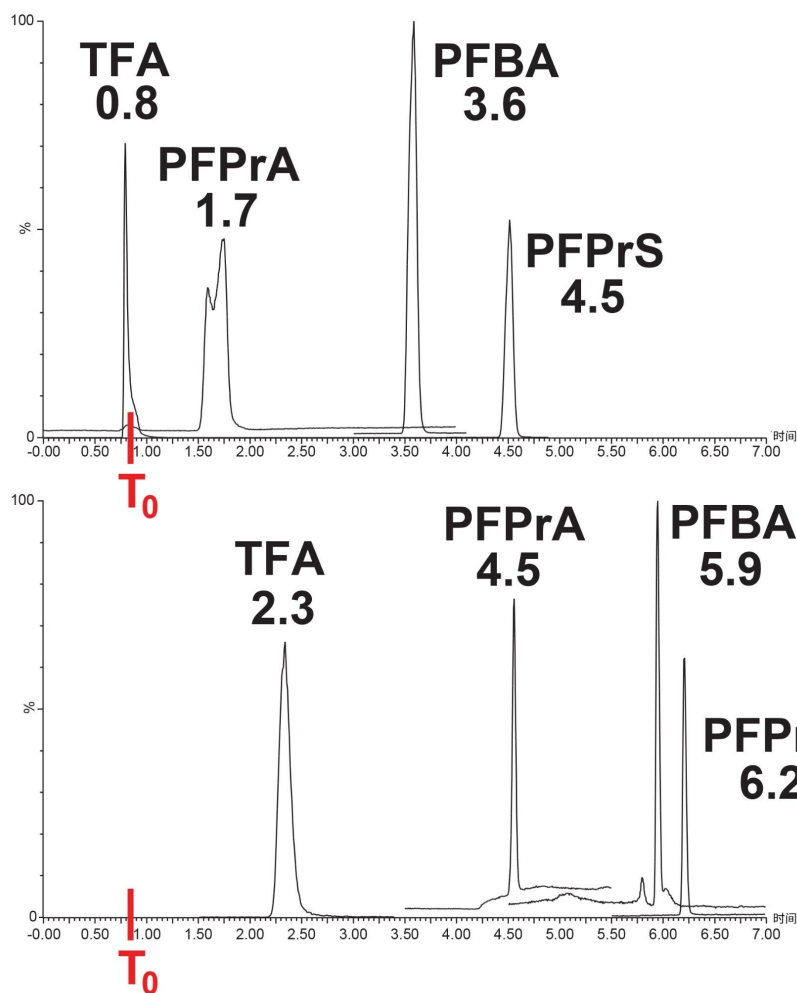


图1. TFA、PFPrA、PFBA和PFPrS在仅使用反相色谱柱（上图）和混合模式 *Atlantis Premier BEH C₁₈ AX* 色谱柱（下图）上的保留时间对比，标记有保留时间。由于天然TFA类似物的污染问题，因此使用同位素标记的TFA类似物表示TFA。

标准PFAS梯度方法使用含有添加剂（通常为乙酸铵）的水性流动相和有机流动相，使流动相在整个梯度中保持pH一致。这适用于仅根据化合物疏水性或极性保留化合物，并增加梯度中的有机溶剂浓度来分离化合物的反相色谱柱。对于混合模式色谱柱，例如 *Atlantis Premier BEH C₁₈ AX* 色谱柱，通过改变梯度内的pH来利用阴离子交换选择性，这基本上会激活（保留）和钝化（洗脱）色谱柱上的离子交换位点。因此，通过在梯度范围内同时调整有机相组成和pH，可获得理想的分离能力。如图2所示，该图以44种PFAS为对象，比较了使用 *Atlantis Premier*

BEH C₁₈ AX色谱柱，采用典型的水/甲醇和乙酸铵梯度，pH恒定（图2A）与使用氢氧化铵的水/甲醇梯度（图2B）的色谱分离度，后者的pH在梯度运行过程中增加。在乙酸铵梯度中，所有44种PFAS均在大约3 min的窗口内洗脱。利用氢氧化铵作为流动相添加剂创建pH梯度，可在大约13 min的洗脱窗口内提高分离度。色谱分离度提高带来的优势包括：通过为每个MRM功能通道提供更长的驻留时间，从而提高质谱数据质量，以及降低来自共洗脱基质化合物的基质干扰机会。

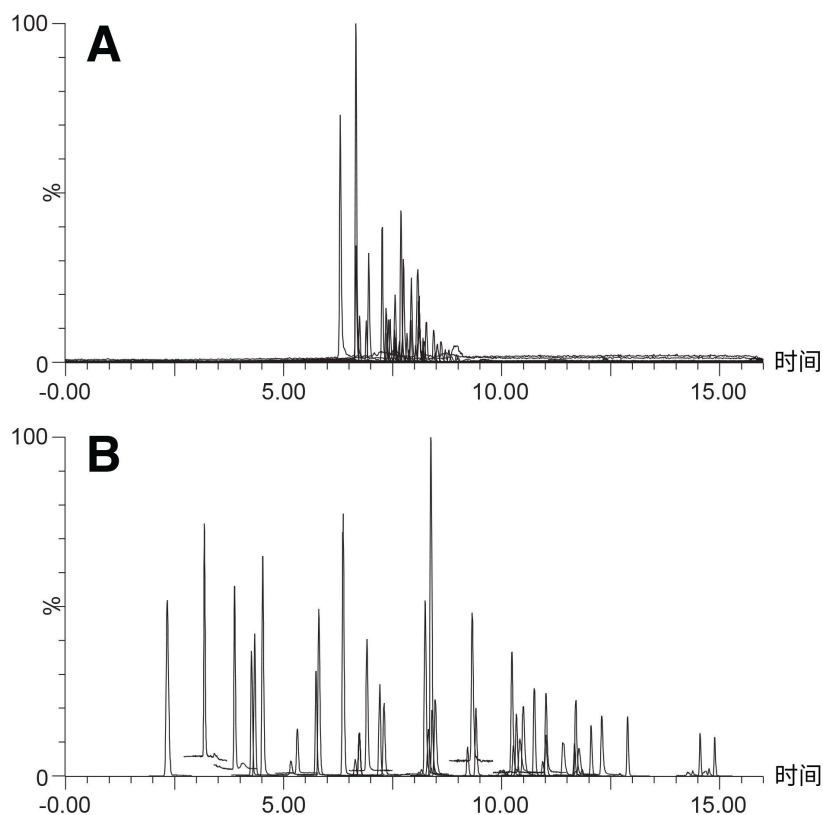


图2.使用Atlantis Premier BEH C₁₈ AX色谱柱分析46种PFAS的保留性比较：在恒定pH条件下使用标准乙酸铵梯度(A)，以及在不同pH条件下使用氢氧化铵梯度(B)。

使用混合模式色谱柱进行最终样品分析时，所有样品均符合ASTM 8421所要求的数据质量指南要求，空白样品中少数由溶剂污染导致的TFA、PFPrA和PFBA检出结果除外。图3中的概述表明，在对各种样品类型进行样品分析期间，结果均满足数据质量指南要求。

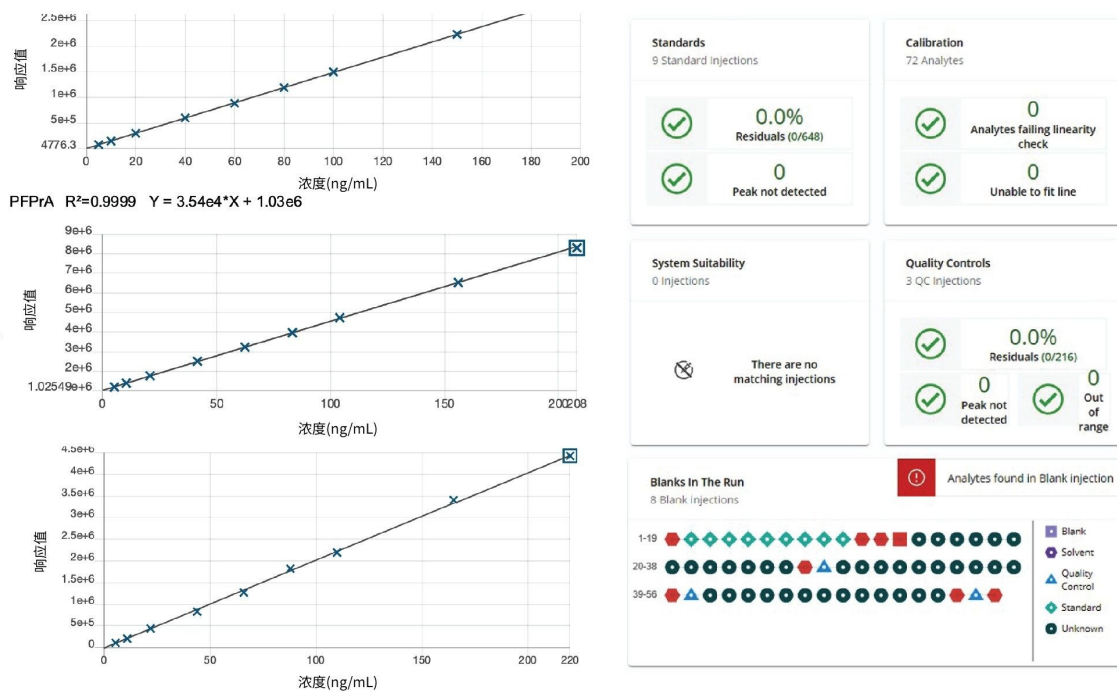


图3. (左图) $^{13}C_2$ -TFA、PFPrA和PFPrS在5~200 ng/L范围内的校准曲线。由于天然TFA类似物的污染问题，因此使用同位素标记的TFA类似物表示TFA。(右图) waters_connect定量分析软件概览页面，突出显示了重要的ASTM数据质量指南，例如残差、校准、质量控制和空白样。

在样品的初始进样过程中，最早洗脱的化合物确实经历了一些严重的保留时间偏移，未在5%的预期保留时间容差范围内，如图4顶部的色谱图所示。在先洗脱的化合物中观察到保留时间漂移后，立即测试样品的pH。尽管按照ASTM 8421方法的要求，在稀释和过滤后向每个样品中添加了10 μ L乙酸，但仍有少数样品的pH值升高。用于创建校准曲线样品的溶液pH约为4。大多数分析的样品在添加10 μ L乙酸后的pH均落在4左右。但是，测试金属修整机样品的pH为5.5，测试浸出液的pH接近5，测试纸浆和纸张样品的pH为4.5。从图4可以看出，这三个样品的保留性随pH的升高而降低。pH最高的样品（来自金属修整机的水）的保留时间最短（或保留时间最早），其次是垃圾渗滤液水，然后是纸浆和纸厂水。考虑到这一点，向每个样品中额外加入乙酸将pH调节至4，然后重新分析样品。如图4底部色谱图所示，通过将所有样品的pH值调节至相同的标示值，可以观察到先洗脱化合物的保留时间更加稳定，处于5%的保留时间容差范围内。此外，其余梯度中的化合物均保持稳定，完全在5%的保留时间容差内（图5）。由此凸显了在将最终样品进样到混合模式色谱柱之前监测其pH的重要性。使用SPE制备样品时，样品pH的变化可能较小，因为这种样品前处理技术可以去除大部分可能导致pH变化的基质，并且最终样品应该更均匀。

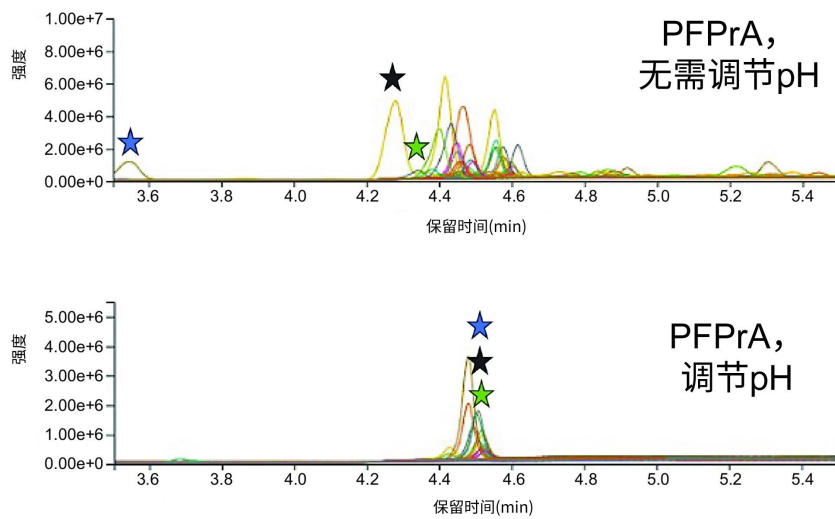


图4.不同类型样品中PFPrA的保留结果重叠，分别是未进行（上图）和进行（下图）额外pH调节的样品。星号分别表示金属修整机（蓝色）、浸出液（黑色）以及纸浆和纸张样品（绿色）的峰。

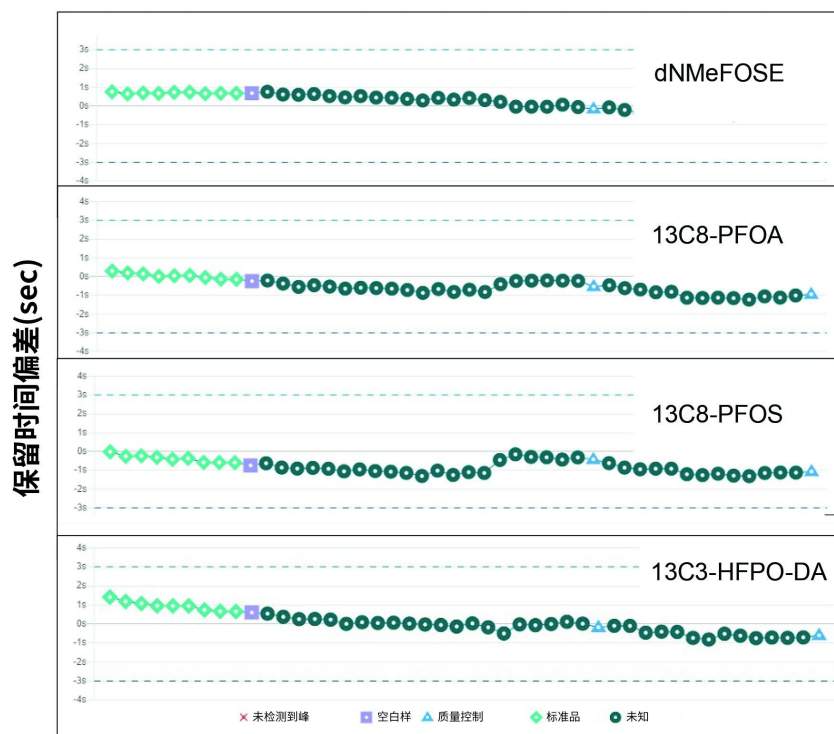


图5.不同类别PFAS在Atlantis Premier BEH C₁₈ AX色谱柱上的保留时间稳定性

除确保数据符合ASTM 8421方法质量控制指南的要求外，还在同一批次中将认证参比物质作为水样进行了分析和定量。分析结果如图6所示，该图还比较了反相色谱柱的定量结果。混合模式和反相模式的数据非常相似，表明使用C₁₈ AX色谱柱时，没有主要基质组分因共洗脱而导致离子抑制或离子增强。大多数化合物的定量结果都在标准品的认证范围内，少数化合物在两种色谱柱上的定量结果都略高。这可能是由于认证值基于500 mL的样品量，而在本研究中将样品量调整为5 mL以复制所采集水样的样品量。因此，对于较小的样品量，认证范围可能不够准确。总体而言，废水认证参比物质的分析表明混合模式色谱柱分析方法具有较高的准确度。此外，混合模式色谱柱分析的准确度与仅使用C₁₈反相色谱柱相同。

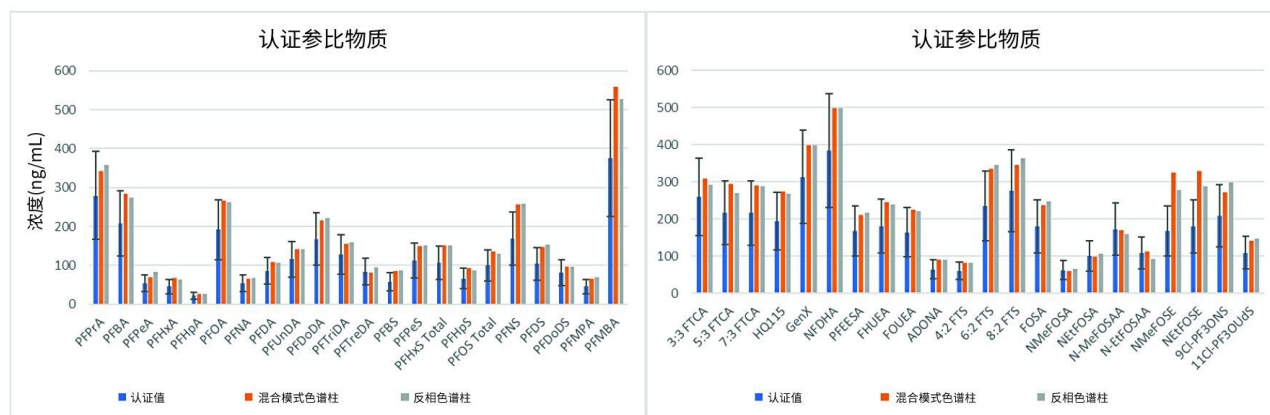


图6.使用ERA认证参比物质分析该方法的性能，比较在混合模式色谱柱和反相色谱柱上运行的结果。

使用Atlantis Premier BEH C₁₈ AX色谱柱分析不同类型的样品后，在垃圾渗滤液样品中鉴定出显著水平的TFA、PFPrA和PFPrS。之前使用反相色谱柱（ACQUITY BEH C₁₈色谱柱）分析样品时，只能检测在色谱柱上保留很差的PFPrA。如果不通过Atlantis Premier BEH C₁₈ AX色谱柱的混合模式填料将超短链PFAS加入分析范围，在分析该样品时可能会遗漏大量PFAS。使用混合模式色谱柱时，不仅可以分析超短链PFAS，而且还可以在同一色谱柱上通过单次进样分析常规检测方法中通常分析的其他PFAS。表2列出了使用反相和混合模式色谱柱鉴定出的垃圾渗滤液样品中各种PFAS的定量含量以及计算的百分比差异。对于鉴定出的所有PFAS，两组定量结果之间的百分比差异在15%以内，PFBA除外，其百分比差异为33%。对于PFBA百分比差异较大这一结果，根据估计可能是因为使用C₁₈ AX色谱柱被分离的峰出现共洗脱，导致在C₁₈色谱柱上高估垃圾渗滤液样品中的PFBA，如图7所示。C₁₈ AX色谱图中圈出的峰似乎导致反相色谱图中PFBA的峰展宽/轻微峰拖尾。

化合物	C ₁₈ AX (ng/L)	反相 (ng/L)	%差异	化合物	C ₁₈ AX (ng/L)	反相 (ng/L)	%差异
TFA	7790	-	NA	PFMPA	10.6	9.8	8.2
PFPrA	1063.6	1204	11.7	PFMBA	3	2.8	7.1
PFBA	1904.8	2853.2	33.2	3:3 FTCA	183.8	210	12.5
PFPeA	3150.8	3351.4	6.0	5:3 FTCA	6343.8	6176.2	2.7
PFHxA	5004.4	5002.4	0.0	7:3 FTCA	151.4	147.4	2.7
PFHpA	743.2	682	9.0	GenX	4.2	4	5.0
PFOA	1431	1379	3.8	NFDHA	ND	ND	ND
PFNA	133	129.2	2.9	PFEESA	ND	ND	ND
PFDA	153.4	147.4	4.1	FHUEA	48.8	48.4	0.8
PFUnDA	ND	ND	ND	FOUEA	ND	ND	ND
PFDoDA	ND	ND	ND	ADONA	ND	ND	ND
PFTriDA	ND	ND	ND	4:2 FTS	42.2	40.4	4.5
PFTreDA	ND	ND	ND	6:2 FTS	6829.2	7012.2	2.6
PFPrS	552	-	NA	8:2 FTS	69.2	69.4	0.3
PFBS	4055.8	4293.4	5.5	FOSA	11	10	10.0
PFPeS	348	361	3.6	NMeFOSA	ND	ND	ND
PFHxS	1133.8	1158.4	2.1	NEtFOSA	ND	ND	ND
PFHpS	29.4	32.2	8.7	N-MeFOSAA	254.6	222.4	14.5
PFOS	452.8	454	0.3	N-EtFOSAA	76.4	71.4	7.0
PFNS	ND	ND	ND	NMeFOSE	ND	ND	ND
PFDS	ND	ND	ND	NEtFOSE	ND	ND	ND
PFDoDS	ND	ND	ND	9Cl-PF3ONS	ND	ND	ND
HQ115	689.6	639	7.9	11Cl-PF3OUdS	ND	ND	ND

表2.使用Atlantis Premier BEH C₁₈ AX混合模式色谱柱和ACQUITY BEH C₁₈反相色谱柱定量分析垃圾渗滤液样品中的46种PFAS化合物时，定量结果和两组之间的百分比差异数据。(ND)未检出，(NA)不适用。

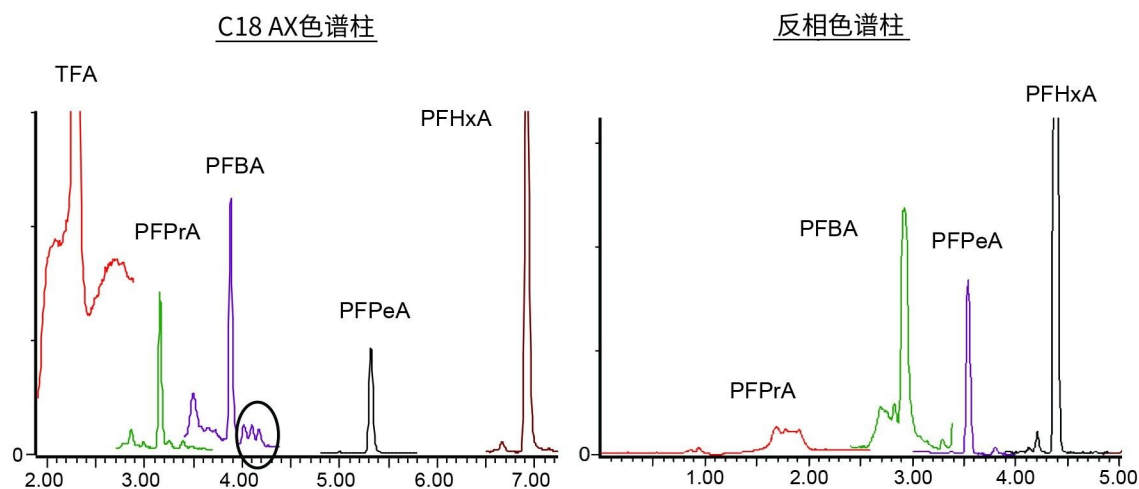


图7.垃圾渗滤液样品的放大色谱图，展示了C2~C6羧酸盐在C₁₈ AX色谱柱和反相色谱柱上的洗脱。圈出的共洗脱峰在反相色谱柱上导致较高的PFBA定量，但在C₁₈ AX色谱柱上得到分离。TFA和PFHxA峰因放大而被剪切。

结论

Atlantis Premier BEH C₁₈ AX色谱柱利用PFAS的疏水性和离子特性，成功保留了超短链PFAS（例如TFA和PFPrA），同时仍然可以通过单次进样定量所有其他传统长链PFAS。根据ASTM 8421数据质量指南，对成分差异极大的各种水样进行定量分析。我们还使用经ERA认证的废水参比物质验证了结果，证明了使用Atlantis Premier BEH C₁₈ AX色谱柱分析各种PFAS的可信度。借助Atlantis Premier BEH C₁₈ AX色谱柱，实验室能够在现有LC-MS/MS系统上扩展单次进样可分析的PFAS范围，以涵盖超短链PFAS至长链PFAS。

参考资料

1. M Ateia, A Maroli, N Tharayil, T Karanfil. The Overlooked Short- and Ultrashort-chain Poly- and Perfluorinated Substances: A review. *Chemosphere*. 2019, 220, 866–882.

2. S Brendel, E Fetter, C Staude, L Vierke, A Biegel-Engler. Short-chain perfluoroalkyl acids: environmental concerns and a regulatory strategy under REACH. *Environ Sci Eur*. 2018;30(1):9.
3. MK Bjornsdotter, LWY Yeung, A Karrman, IE Jogsten. Ultra-Short Chain Perfluoroalkyl Acids Including Trifluoromethane Sulfonic Acid in Water Connected to Known and Suspected Point Sources in Sweden. *Environ. Sci. Technol.* 2019, 53, 19, 11093–11101.
4. R Aro, U Eriksson, A Karrman, F Chen, T Wang, LWY Yeung. Fluorine Mass Balance Analysis of Effluent and Sludge from Nordic Countries. *ACS EST Water*. 2021, 1, 2087–2096.
5. ASTM D8421-22, Standard Test Method for Determination of Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS) in Aqueous Matrices by Co-solvation followed by Liquid Chromatography Tandem Mass Spectrometry (LC/MS/MS), ASTM International, West Conshohocken, PA, 2022, www.astm.org <
<http://www.astm.org/>> .
6. K Organtini, K Rosnack, D Stevens, E Ross. 使用固相萃取(SPE)和LC-MS/MS分析环境水样品中的传统和新型全氟烷基化合物(PFAS). 沃特世应用纪要, [720006471ZH](#), 2019年1月.

附录

化合物	母离子	碎片离子	CV	CE
TFA	112.9	68.9	8	10
PFPrA	162.9	118.9	10	10
PFBA	213.0	169	10	10
PFPeA	262.9	219	10	5
PFHxA	312.9	269	5	10
		119	5	20
PFHpA	362.9	319	15	10
		169	15	15
PFOA	412.9	369	10	10
		169	10	15
PFNA	462.9	419	10	10
		219	10	15
PFDA	512.9	468.9	15	9
		219	15	15
PFUnDA	562.9	518.9	25	10
		269	25	20
PFDoDA	612.9	568.9	30	10
		169	30	25
PFTrIDA	662.9	618.9	5	10
		169	5	30
PFTreDA	712.9	668.9	10	25
		169	10	15
PFPrS	248.9	80.1	15	30
		99.1	15	30
PFBS	298.9	80.1	15	30
		99.1	15	30
PFPeS	348.9	79.9	10	30
		98.9	10	30
PFHxS	398.9	80.1	10	35
		99.1	10	30
PFHpS	448.9	80.1	15	35
		99.1	15	35
PFOS	498.9	80.1	15	40
		99.1	15	40
PFNS	548.9	80.1	20	40
		99.1	20	40
PFDS	598.9	80.1	46	46
		99.1	46	46
PFUnDS	649.1	80	40	55
		99	40	55
PFDoDS	699.1	80	40	55
		99	40	55
PFTrDS	749.1	80	40	55
		99	40	55
GenX (HFPO-DA)	285.0	169	5	7
		GenX	5	35
ADONA	376.9	251	10	10
		377.3	10	25
9Cl-PF3ONS	530.9	350.9	15	25
		82.9	15	25
11Cl-PF3OUdS	630.9	450.9	30	30
		631.2	30	30
HQ-115	279.9	146.9	5	25
		210.9	5	20
4:2 FTS	326.9	306.9	15	15
		327.3	15	35
6:2 FTS	426.9	407	10	20
		427.3	12	32
8:2 FTS	526.9	506.8	15	25
		527.3	15	37
3:3 FTCA	241.0	116.9	5	40
		176.9	5	10
5:3 FTCA	340.9	216.9	5	25
		237	5	10

化合物	母离子	碎片离子	CV	CE
7:3 FTCA	440.9	316.9	10	22
		337	10	17
PFEESA	314.9	82.9	15	20
		134.9	15	20
NFDHA	295.0	84.9	5	10
		200.9	5	10
FOUEA	456.9	393	20	11
FHUEA	356.9	292.9	20	12
FOSA	497.9	78	40	30
N-MeFOSA	511.9	168.9	40	30
		218.9	40	25
N-EtFOSA	525.9	168.9	5	25
		218.9	5	25
N-MeFOSE	616.0	59	15	15
N-EtFOSE	630.0	59	15	15
N-MeFOSAA	569.9	418.9	35	25
		219.1	35	20
N-EtFOSAA	584.0	418.9	15	20
		525.9	15	20
¹³ C ₂ -TFA	114.9	69.9	8	10
¹³ C ₃ -PFPrA	165.9	120.9	10	10
¹³ C ₄ -PFBA	216.9	172	10	10
¹³ C ₅ -PFPeA	267.9	223	10	5
¹³ C ₅ -PFHxA	317.9	272.9	10	5
		119.9	10	20
¹³ C ₄ -PFHpA	366.9	321.9	15	10
		169	15	15
¹³ C ₅ -PFOA	420.9	375.9	5	15
		172	5	10
¹³ C ₅ -PFNA	471.9	426.9	10	10
		223	10	15
¹³ C ₅ -PFDA	519	473.9	5	10
		219	5	15
¹³ C ₇ -PFUnDA	569.9	524.9	5	10
		274	5	15
¹³ C-PFDoDA	614.9	569.9	10	10
		169	10	25
¹³ C ₂ -PFTreDA	714.9	169	25	35
		669.9	25	10
¹³ C ₃ -PFBS	301.9	80.1	10	30
		99.1	10	25
¹³ C ₃ -PFHxS	401.9	80.1	10	40
		99.1	10	35
¹³ C ₅ -PFOS	506.9	80.1	15	40
		99.1	15	40
¹³ C ₅ -FOSA	505.9	78.1	35	25
d NMeFOSA	514.9	168.9	40	30
d NEtFOSA	531	168.9	5	25
d7-NMeFOSE	623	58.9	15	15
d9-NEtFOSE	639	58.9	15	15
D ₅ -N-EtFOSAA	589	418.9	30	20
		506.9	30	15
D ₃ -N-MeFOSAA	572.9	418.9	35	20
		482.7	35	15
¹³ C ₂ -4:2 FTS	328.9	308.9	40	15
		81	40	25
¹³ C ₅ -6:2 FTS	428.9	409	10	20
		80.9	10	27
¹³ C ₂ -8:2 FTS	528.9	508.9	10	20
		81	10	35
¹³ C ₃ -GenX	287	169	5	12
		119	5	12

附表1.分析中所含PFAS的质谱方法条件。

特色产品

ACQUITY UPLC I-Class PLUS系统 <<https://www.waters.com/134613317>>

waters_connect定量分析软件 <https://www.waters.com/nextgen/global/products/informatics-and-software/waters_connect-for-quantitation.html>

Xevo TQ Absolute三重四极杆质谱仪 <<https://www.waters.com/nextgen/global/products/mass-spectrometry-systems/xevo-tq-absolute.html>>

720008034ZH, 2023年8月



© 2024 Waters Corporation. All Rights Reserved.

[使用条款](#) [隐私](#) [商标](#) [招聘](#) [危险化学品生产经营许可证](#) [Cookie](#) [Cookie设置](#)

沪ICP备06003546号-2 京公网安备 31011502007476号