

Application News

No. LCMS-106

液相色谱质谱法

利用LCMS-8050三重四极杆质谱仪分析EPA M8327中规定的全氟和多氟烷基化合物 (PFAS)

Brahm Prakash, Gerard Byrne II, Ruth Marfil-Vega, Yuka Fujito, Christopher Gilles,
岛津科学仪器公司, 马里兰州哥伦比亚, 邮编: 21046

■ 摘要

美国环境保护署 (EPA) 最近公布了SW-846 8327方法草案, 用于分析地下水、地表水和废水中的PFAS。目前尚无其它可用于分析复杂基质中PFAS的EPA方法; 因此, 该方法的最终版本将提供一种用于监测非饮用水中限定PFAS的工具。本应用报告表明LCMS-8050符合并超过了本方法中规定的“质量保证和质量控制”标准。所有分析物的定量限为5 ppt及以下。最终, 这项工作为解决非饮用水中少量PFAS的定量问题提供了一个快速、耐受性好的解决方案。

■ 背景

全氟和多氟烷基化合物 (PFAS) 是一组广泛用于消费品 (如食品包装材料和非粘性涂料) 和工业应用 (泡沫灭火剂、聚合物或塑料生产) 的人工化学品。它们具有独特的性质, 如高度稳定性和抗降解性¹, 加上它们的广泛使用, 导致了PFAS在环境中积累。

PFAS系列物质包含4000多种化学物质, 它们的共同之处在于都有一个全氟或多氟化的碳骨架化合物。由于它们对人类和生态系统潜在的有害影响, 美国已不再生产PFOA和PFOS, 这就催生了替代化学品的引进。为了准确定量进入环境的低水平 (低至ng/L) 残留和替代PFAS, 同时考虑它们对人类和生态系统的影响以及它们的油、水不相溶性, 需要耐用和快速的分析方法。

目前正在针对PFAS对人体健康的不良影响²⁻⁶进行研究。许多研究已经将PFOA和PFOS与生殖损伤、肝和肾损伤以及免疫系统减弱联系起来。PFAS暴露也与胆固醇水平升高有关。

本应用报告提供了一种基于岛津LCMS-8050的快速、耐受性好的解决方案, 适用于EPA 8327方法中列出的所有分析物。结果表明: 该仪器的性能超过了EPA方法草案中概述的要求。最重要的是, 结果证明目前实验室以ASTM D7979方法⁷⁻⁸来分析样品, 使用超高速LC-MS/MS (UFMS™) 分析环境样品中的PFAS, 可以轻松更新其工作流程以实现EPA 8327方法。

关键词: 全氟和多氟化烷基化合物, PFAS, 全氟化合物, PFCs, PFOA, PFOS, 持久性有机污染物, POPs, 三重四极杆, 废水, 地下水, 地表水, EPA 8327方法, ASTM D7979

■ 化合物列表

EPA 8327方法可对溶剂、地下水、地表水和废水中的24种目标PFAS化合物和19种替代物进行分析。表1列出了目标化合物及其各自的首字母缩略词、替代化合物及其化学分类。有关本应用报告的其余部分, 请参阅表1中的首字母缩略词。

表 1: 本方法包括目标分析物、替代物、首字母缩略词和 CAS 号

分析物	首字母缩略词	CAS号	替代物
磺酸			
全氟丁基磺酸	PFBS	29420-49-3	13C3-PFBS
全氟己基磺酸	PFHxS	3871-99-6	13C3-PFHxS
全氟辛基磺酸	PFOS	1763-23-1	13C8-PFOS
1H, 1H, 2H, 2H-全氟己烷磺酸	4:2 FTS	757124-72-4	13C2-4:2 FTS
1H, 1H, 2H, 2H-全氟辛烷磺酸	6:2 FTS	27619-97-2	13C2-6:2 FTS
1H, 1H, 2H, 2H-全氟癸烷磺酸	8:2 FTS	39108-34-4	13C2-8:2 FTS
全氟-1-戊烷磺酸	L-PFPeS	706-91-4	-
全氟-1-庚烷磺酸	L-PFHpS	375-92-8	-
全氟-1-壬烷磺酸	L-PFNS	68259-12-1	-
全氟-1-癸烷磺酸	L-PFDS	2806-15-7	-
羧酸			
全氟丁酸	PFBA	375-22-4	13C4-PFBA
全氟戊酸	PFPeA	2706-90-3	13C5-PFPeA
全氟己酸	PFHxA	307-24-4	13C5-PFHxA
全氟庚酸	PFHpA	375-85-9	13C4-PFHpA
全氟辛酸	PFOA	335-67-1	13C8-PFOA
全氟壬酸	PFNA	375-95-1	13C9-PFNA
全氟癸酸	PFDA	335-76-2	13C6-PFDA
全氟十一酸	PFUnA	2058-94-8	13C7-PFUnA
全氟十二酸	PFDoA	307-55-1	13C2-PFDoA
全氟十三酸	PFTriA	72629-94-8	-
全氟十四酸	PFTreA	376-06-7	13C2-PFTreA
磺胺类和磺胺乙酸			
N-乙基全氟-1-辛基磺酰胺乙酸	N-EtFOSAA	2991-50-6	D3-N-EtFOSAA
N-甲基全氟-1-辛基磺酰胺乙酸	N-MeFOSAA	2355-31-9	D3-N-MeFOSAA
全氟-1-辛基磺酰胺	FOSA	754-91-6	13C8-PFOSA

■ 方法

本应用报告描述并展示了岛津 LCMS-8050 用于 EPA M8327 草案（截至 2019 年 9 月）所述的溶剂、地下水、地表水和废水基质中的 43 种 PFAS、24 种目标物和 19 种替代物进行分析的性能。EPA 提供了一系列的耗材，包括：15 mL 的聚丙烯（PP）管、分析柱、延迟柱、PFAS 精密度和回收率标准品（Wellington）、标记 PFAS 的提取标准品（Wellington）、2 mL 的认证琥珀玻璃瓶、2 mL 瓶的 PP 无隔片盖子、GXF/GHP 0.2 μm 注射器滤膜和 10 mL 的金属鲁尔锁紧头全玻璃注射器。

使用与岛津的 Shim-pack GIST Phenyl-Hexyl (2.1×100 mm, 粒径 3.0 μm) 类似的分析柱，以及用作延迟柱的岛津 Shim-pack XR-ODS (50mm x 3.0mm x 2.2 μm, 岛津件号：228-41606-92)，对所有的 PFAS 化合物（岛津件号：227-30713-03）进行分析。使用流动注射（FIA）法，对所有化合物进行了多反应监测条件（MRM）的优化。

流动相 A 由 20 mM 的醋酸铵与 95:5 的 H₂O:ACN 溶液组成。流动相 B 由 10 mM 的醋酸铵与 95:5 的 ACN:H₂O 溶液组成。各浓度水平标准品的进样量都是 30 μL。所用流速为 0.3 mL/min。调整色谱条件，在尽可能短的时间内获得最大的峰分离度，并且共流出的同分异构体最少。每次进样的总运行时间为 21 分钟，包括重新平衡延迟柱和分析柱。总运行时间为 21 分钟，包括最后一次用高浓度的乙腈清洗色谱柱，清除残留污染物，并在开始下一次运行前恢复色谱柱的性能。如果需要定量浓度，可以很轻松地改动该方法，采用同位素稀释或内部校准法。

采用岛津 Nexera UHPLC 系统和 LCMS-8050 三重四极杆质谱仪进行 LC/MS/MS 分析。本研究的进样量为 30 μL。表 2 详细介绍了 LC/MS/MS 参数。

表 2: 色谱和质谱仪条件

参数	值
LCMS	岛津 LCMS-8050
分析柱	Shim-pack GIST Phenyl-Hexyl (2.1 mm内径 x 100 mm长, 3 μ m) 件号: 227-30713-03
溶剂延迟柱	Shim-pack XR-ODS (3 mm内径 x 50 mm长, 2.2 μ m) 件号: 228-41606-92
柱温箱温度	40 °
进样量	30 μ L
流动相	A: 20 mmol的醋酸铵与5% (v/v) 的乙腈 B: 10 mmol的醋酸铵与95% (v/v) 的乙腈
流速梯度	0.3 mL/Min
梯度	时间 (分钟) % B
	0 0
	1 20
	6 50
	14 100
	17 100
	18 0
	21 0
运行时间	21分钟
雾化气流量	5 L/min
加热气流量	15 L/min
接口温度	300 °C
去溶剂化线温度	100 °C
加热模块温度	200 °C
干燥气流量	5 L/min
采集周期时间	21 min
总MRM	66

全氟调聚酸 (作为[M-H] 和[M-HF-H] 观察) 可以得到m/z 与不饱和全氟调聚酸相同的离子。即使在优化色谱条件下, 这些化合物的保留时间也几乎相同。ESI加热器温度降低, 减少了HF丢失, 并最大限度地减少了全氟调聚酸的误判。根据所应用的类型, 温度条件可能会有所不同⁹。

所有化合物参数, 包括前体离子、产物离子和碰撞能量都使用FIA进行优化, 使用LabSolutions软件自动优化。对于表3中列出的大多数化合物, 至少有两个MRM通道。

表 3: MRM 通道、保留时间和碰撞能量

成分	保留时间 (分钟)	通道 (m/z)	碰撞能量 (V)
PFBA	3.341	213 > 169	9
MPFBA	3.341	217 > 172	9
PFPeA	3.941	263 > 219	8
M5PFPeA	3.940	268 > 223	8
4-2 FTS	4.444	327 > 307 327 > 81	18 35
M4-2 FTS	4.442	329 > 309	20
PFHxA	4.683	313 > 269 313 > 119	9 21
M5PFHxA	4.680	318 > 273	11
PFBS	4.709	299 > 80 299 > 99	30 28
M3PFBS	4.813	302 > 80	34
PFHpA	5.401	363 > 319 363 > 169	9 16
M4PFHpA	5.400	367 > 322	10
PFPeS	5.606	349 > 80 349 > 99	42 30

6-2 FTS	5.797	427 > 407 427 >81	23 39
M6-2 FTS	5.799	429 >409	22
PFOA	6.048	413 > 369 413 >169	10 17
M8PFOA	6.051	421 > 376	10
PFHxS	6.305	399 > 80 399 >99	43 22
M3PFHxS	6.306	402 > 80 403 >84	49 49
PFNA	6.642	463 > 419 463 >219	11 16
M9PFNA	6.641	472 > 427	12
8-2 FTS	6.927	527 > 507 527 >81	26 49
M8-2 FTS	6.928	529 > 509 527 >81	26 49
PFHpS	6.928	449 > 80 449 >99	51 37
N-MeFOSAA	7.254	570 > 419 570 >483	21 16
d3M N-MeFOSAA	7.243	573 > 419	20
PFDA	7.189	513 > 468.9 413 >219	11 17
M6PFDA	7.188	519 > 474	11
N-EtFOSAA	7.469	584 > 419 584 >483	20 16
M N-EtFOSAA	7.463	589 > 419	21
PFOS	7.483	499 > 80 499 >99	54 38
M8PHOS	7.484	507 > 80	55
PFUdA	7.697	563 > 519 563 >269	12 16
M7PFUdA	7.695	570 > 525	12
PFNS	8.009	549 > 80 549 >99	54 44
PFDoA	8.181	613 > 569 613 >169	12 21
MPFDoA	8.179	615 > 570	11
FOSA	8.498	498 > 78	43
M8FOSA	8.498	506 > 78	48
PFDS	8.523	599 > 80 599 >99	55 50
PFTriA	8.662	663 > 619 663 >169	12 27
PFTeDA	9.155	713 > 669 713 >169	13 27
M2PFTeDA	9.130	715 > 670	15

校准标准品

这些研究使用Wellington Laboratories提供的标准品（目录号：PFAC-24PAR和MPFAC-24ES）。然后用95:5的乙腈:水作为稀释剂，将这些标准品稀释成EPA 8327方法第7.4节规定的标准工作液。使用标准工作液建立5-200 ppt的标准曲线，溶剂由50:50的水:甲醇溶液含0.1%乙酸组成，以匹配样品提取溶剂。校准标准品不进行过滤。

样品制备

采用溶剂水、地表水、地下水和废水为样品基质，对EPA 8327方法进行检测。本报告展示了代表性色谱图，并列出了每个被测基质的结果表格。每个样品用甲醇和0.1%乙酸（50:50）稀释，加入同位素标记的替代物，涡旋处理2分钟。然后通过0.2 μm的注射器滤膜过滤样品，进行LC/MS/MS分析。

■ 结果和讨论

众所周知，PFAS可以存在于溶剂、玻璃器皿、移液管、导管、脱气机和LC-MS/MS仪器的其它部件中。通过在溶剂和样品阀之间放置一个延迟柱，可以消除来自LC系统的PFAS污染。这样可将样品中的PFAS与LC系统中的PFAS分离。所有用于研究的用品都无PFAS污染。为了监测不受污染的情况，每批次开始时进样两份空白样品：系统不进样（空气进样，如图1所示）和试剂空白（超纯水：甲醇（50:50）中0.1%的乙酸，如图2所示）。图1和图2中的数据表明用于分析的仪器和材料中不含PFAS。

使用九点标准曲线对所有PFAS目标物进行校准，范围在5 ng/L-200 ng/L之间。曲线的线性使用1/x加权系数，而不是强制过原点。所有的化合物或通道都具有很好的线性，其相关系数（ r^2 ）大于0.99。各标准品的校准误差均在±30%以内。图3显示了5 ng/L标准品的总离子流图和MRM色谱图；该图展示了标准曲线中最低浓度下目标物的分离和峰形。图4显示了EPA 8327方法草案中所有PFAS目标物和替代化合物在80 ng/L下的中间浓度水平标准品的色谱图，并证实了峰形在高浓度下保持不变。

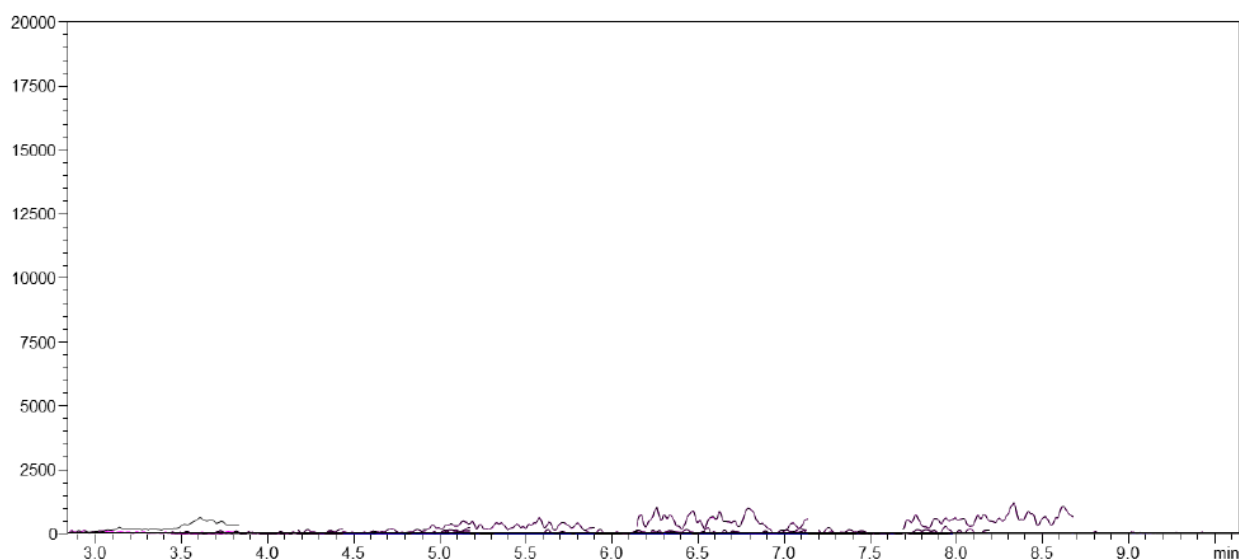


图 1：不进样空白的 TIC 色谱图

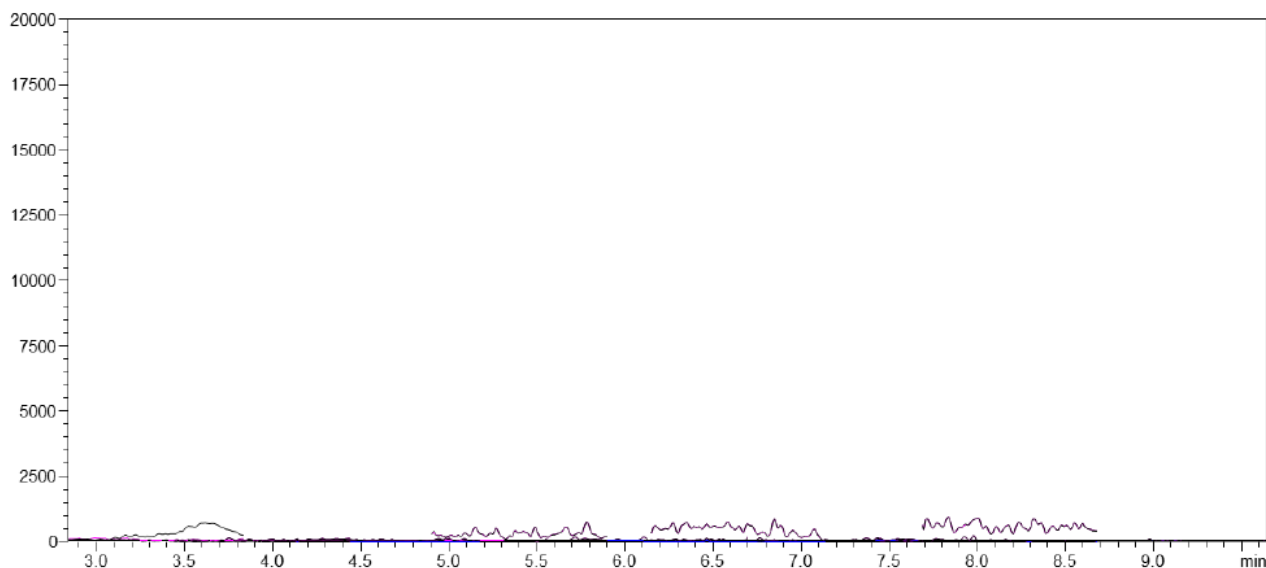


图 2：空白试剂在含 0.1% 乙酸的 50:50 MeOH:H₂O 中的 TIC 色谱图

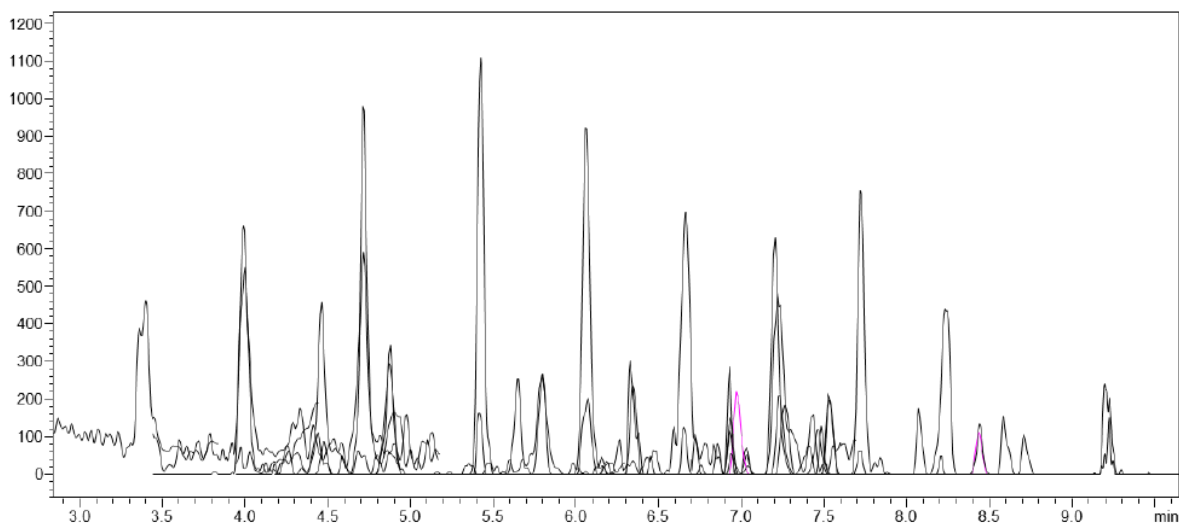


图 3: EPA 8327 方法中所有 PFAS 在最低校准曲线浓度 (5 ppt) 下的 TIC (黑色) 色谱图和 MRM 通道 (其它颜色)

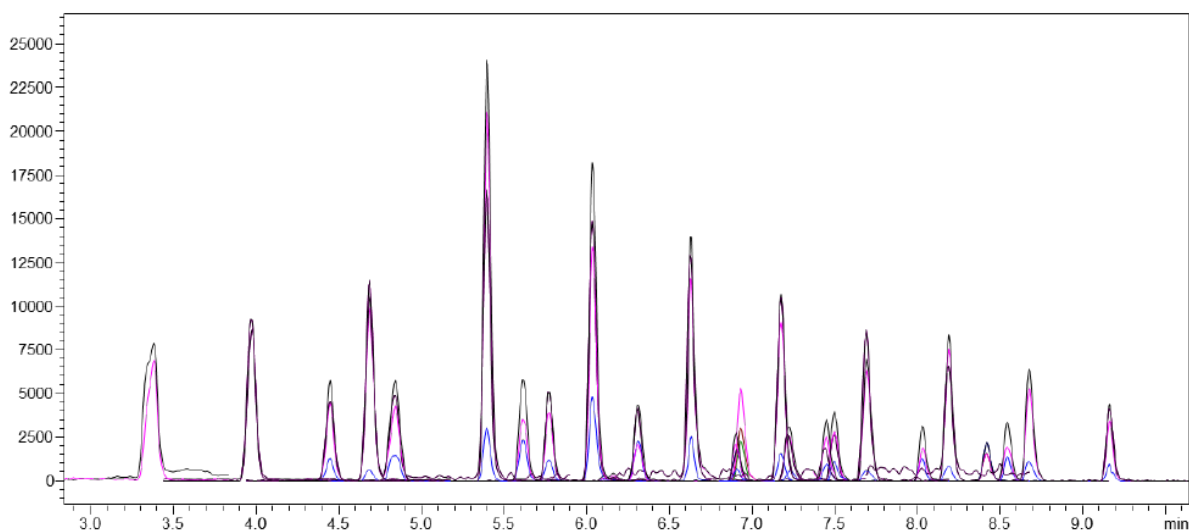


图 4: EPA 8327 方法中所有 PFAS 在中间校准曲线浓度 (80 ppt) 下的 TIC (黑色) 色谱图和 MRM 通道 (其它颜色)

图5显示了5 ng/L典型色谱峰的提取离子流色谱图以及PFHxS、PFOS和PFTreA的标准曲线。表4列出了EPA 8327方法中所有目标物在代表性低、中、高浓度下的计算浓度和回收率。所有回收率均在EPA 8327方法草案规定的可接受限值范围内(最低校准点为50%-150%,其余校准点为70%-130%)。表4还包括每个目标化合物在5 ng/L时的信噪比。除PFHxS外,其余化合物的信噪比均大于3,这些结果表明,大多数化合物的可以实现更高的灵敏度。

图6显示了在各种基质中加入60 ppt的24种PFAS化合物的色谱图,包括试剂水、地下水、地表水和废水。结果表明尽管样品成分有差异并且存在潜在干扰,但在所分析的所有样品类型中分离和峰形都保持不变。

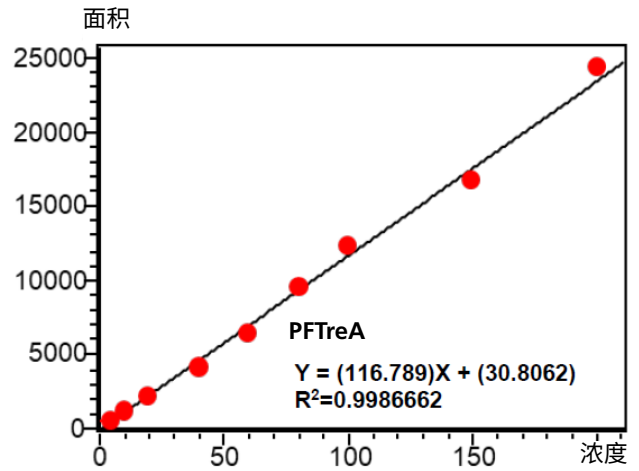
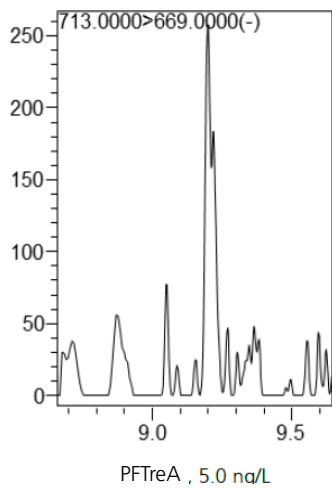
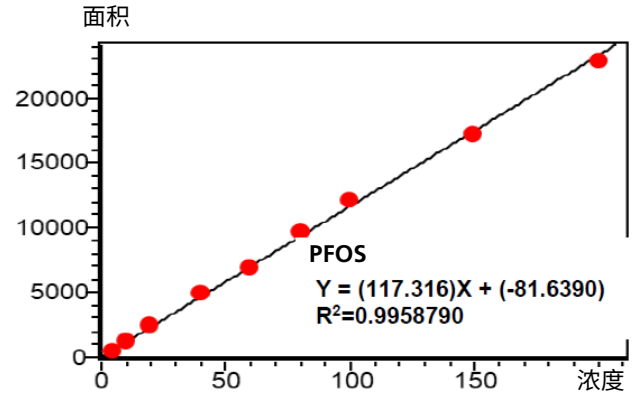
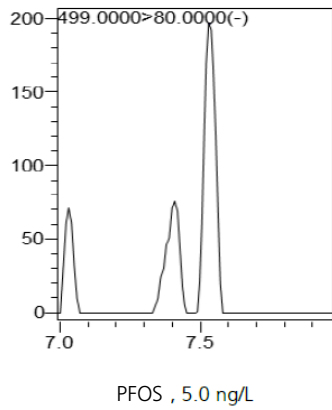
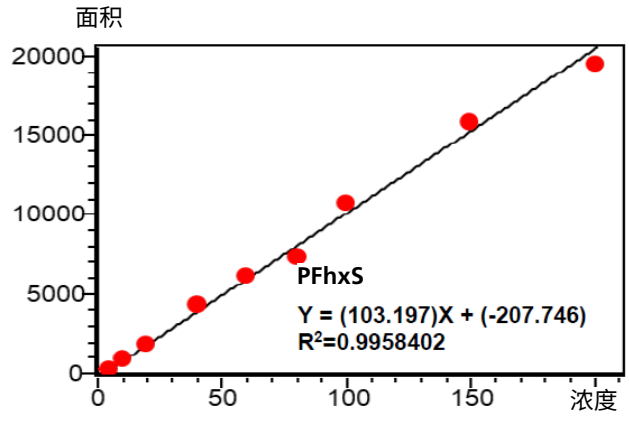
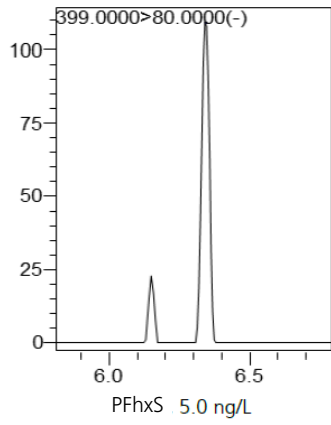
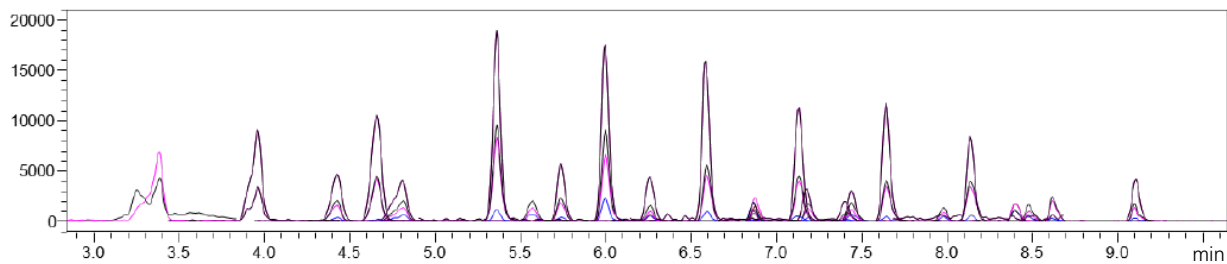
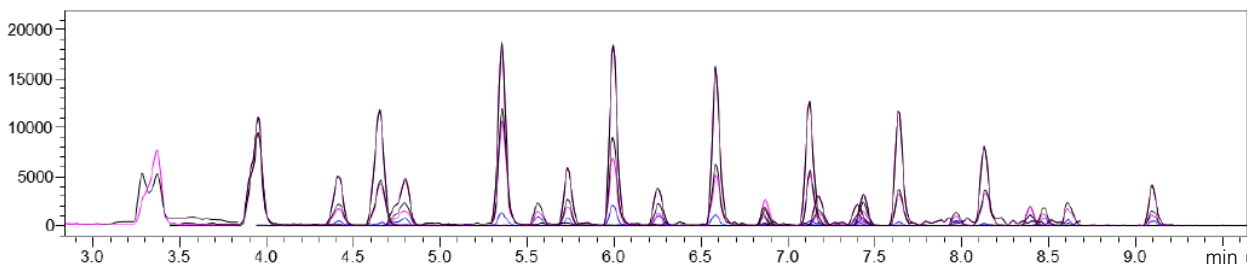


图 5: EPA 8327 方法中所列化合物的代表性色谱图和标准曲线

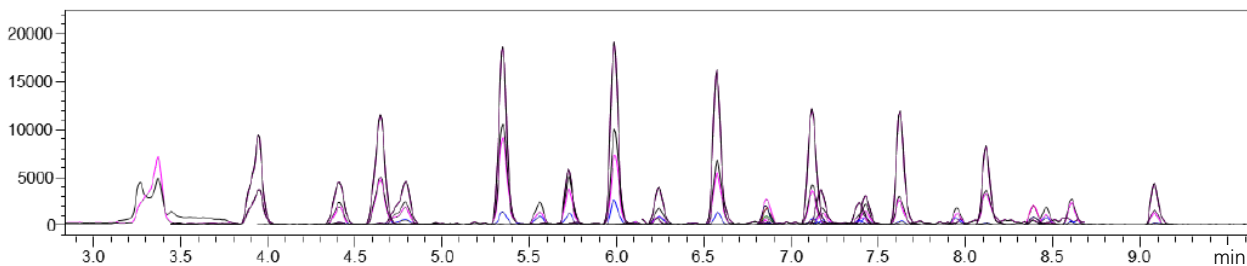
A. 试剂水



B. 地下水



C. 地表水



D. 废水

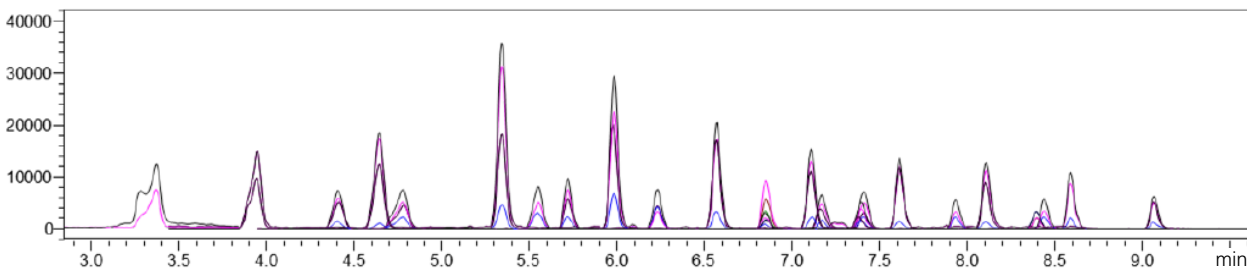


图 6：在以下基质中加入 60 ng/L 24 种 PFAS 化合物的色谱图（TIC 和 MRM）：A）试剂水；B）地下水；C）地表水；和 D）废水

表 4: EPA 8327 方法中所有目标物在低、中、高标准品水平下的计算浓度

化合物	RT (min)	浓度	5 ppt		40 ppt		200 ppt	
			回收率 (%)	信噪比 (S/N) (*)	浓度	回收率 (%)	浓度	回收率 (%)
PFBA	3.382	4.48	90	3.28	42.37	106	196.7	98
M4PFBA	3.378	4.65	93	72.36	40.14	100	200.1	100
PFPeA	3.897	5.20	104	21.57	41.49	104	200.8	100
M5PFPeA	3.892	5.09	102	268.79	40.34	101	202.3	101
4-2 FTS	4.333	4.56	91	212.65	41.08	103	199.8	100
M2-4-2 FTS	4.319	4.82	96	71.11	41.48	104	200.8	100
PFHxA	4.544	4.95	99	44.95	41.10	103	198.3	99
M5PFHxA	4.542	4.99	100	830.68	40.57	101	198.5	99
PFBS	4.676	4.25	85	9.21	38.96	97	195.2	98
M3PFBS	4.674	5.15	103	172.98	39.32	98	202.2	101
PFHpA	5.219	4.99	100	37.17	39.01	98	196.1	98
M4PFHpA	5.217	4.93	99	1247.7	38.68	97	199.6	100
PFPeS	5.399	5.31	106	196.02	41.15	103	199.6	100
6-2 FTS	5.586	4.25	85	75.54	37.33	93	183.1	92
M2-6-2 FTS	5.591	4.94	99	61.36	39.19	98	205.0	103
PFOA	5.826	4.61	92	46.56	40.05	100	198.7	99
M8PFOA	5.827	4.50	90	611.9	41.73	104	195.5	98
PFHxS	6.062	5.69	114	(INF)	41.34	103	195.3	98
M3PFHxS	6.064	5.08	102	(INF)	41.46	104	204.1	102
PFNA	6.401	3.83	77	23.64	38.10	95	198.9	100
M9PFNA	6.397	5.13	103	292.26	39.58	99	195.4	98
8-2 FTS	6.681	4.04	81	(INF)	33.29	83	200.1	100
M2-8-2 FTS	6.673	4.92	98	31.79	35.90	90	198.6	99
PFHpS	6.663	4.35	87	(INF)	41.09	103	197.8	99
N-MeFOSAA	7.005	5.30	106	(INF)	39.93	100	208.6	104
d3-NMeFOSAA	7.001	5.98	120	(INF)	39.33	98	197.8	99
PFDA	6.93	5.45	109	64.37	40.68	102	201.1	101
M6PFDA	6.927	5.02	100	596.91	39.27	98	201.5	101
N-EtFOSAA	7.221	5.67	113	14.63	38.42	96	202.8	101
d5-NEtFOSAA	7.221	5.45	109	(INF)	44.72	112	200.8	100
PFOS	7.204	5.39	108	(INF)	34.56	86	196.8	98
M8PFOS	7.201	4.71	94	(INF)	36.86	92	195.4	98
PFUnA	7.426	5.42	108	21.82	41.21	103	197.1	99
M7PFUnA	7.423	5.34	107	545.68	43.51	109	203.8	102
PFNS	7.705	4.94	99	(INF)	44.30	111	198.2	99
PFDoA	7.893	5.14	103	54.66	37.82	95	205.8	103
M2PFDoA	7.889	5.11	102	(INF)	39.36	98	202.2	101
FOSA	8.207	4.95	99	(INF)	41.83	105	200.8	100
M8FOSA	8.215	4.94	99	1663.83	41.12	103	201.9	101
PFDS	8.188	4.94	99	(INF)	41.55	104	200.1	100
PFTriA	8.359	4.40	88	43.58	42.18	105	198.1	99
PFTreA	8.816	4.66	93	21.34	39.44	99	199.8	100
M2PFTreA	8.82	4.48	99	1703.08	37.43	94	198.0	99

(*) INF: 当一种化合物的背景噪声为零时的信噪比值。

表5展示了试剂水中加入80 ng/L目标物和替代物的准确度(加标回收率)和精密度(%RSD)。所有化合物的平均回收率均在70-130%以内,精密度RSD(%RSD) ≤ 20%,完全符合EPA 8327方法草案规定的质量保证标准。

表6-9列出了在试剂水、地下水、地表水和废水样品中加入160 ng/L的替代物回收率和精密度(%RSD)。按照该方法验收标准的要求,所有待测PFAS的替代物回收率均在70-130%之间,并且精密度(%RSD) ≤ 20%。

表 5: 试剂水中加入 80 ng/L 的 24 种 PFAS 和 19 种质量标记替代物的准确度 (加标回收率) 和精密度 (%RSD)。

成分	#1	#2	#3	#4	平均浓度 (ng/L)	平均回收率 (%)	%RSD
PFBA	81.5	83.9	84.1	83.1	83.1	103.9	1.4
MPFBA	79.3	81.4	81.3	81.3	80.8	101.0	1.3
PFPeA	78.2	78.3	81.5	82.8	80.2	100.3	2.8
M5PFPeA	77.9	77.8	80.6	80.6	79.2	99.0	2.0
4-2 FTS	78.5	84.1	81.8	84.1	82.1	102.6	3.2
M4-2 FTS	78.5	82.0	78.3	83.1	80.5	100.6	3.1
PFHxA	80.0	80.3	79.9	81.7	80.5	100.6	1.1
M5PFHxA	80.3	82.3	80.9	81.0	81.1	101.4	1.1
PFBS	78.0	81.0	79.2	83.6	80.5	100.6	3.0
M3PFBS	77.7	81.0	81.2	81.8	80.4	100.5	2.3
PFHpA	81.1	81.8	81.6	82.4	81.7	102.1	0.6
M4PFHpA	80.8	81.3	80.5	78.0	80.1	100.2	1.8
PFPeS	78.2	78.9	79.7	82.4	79.8	99.8	2.3
6-2 FTS	80.3	90.8	90.1	80.5	85.4	106.8	6.7
M6-2 FTS	79.0	86.3	79.7	75.9	80.2	100.3	5.5
PFOA	80.7	80.9	80.0	82.8	81.1	101.4	1.4
M8PFOA	79.0	82.4	84.3	83.9	82.4	103.0	2.8
PFHxS	71.6	74.3	75.6	76.1	74.4	93.0	2.7
M3PFHxS	78.4	78.3	81.9	79.6	79.5	99.4	2.1
PFNA	78.9	74.8	84.4	79.5	79.4	99.3	4.9
M9PFNA	79.0	79.8	79.8	77.7	79.1	98.9	1.3
8-2 FTS	82.3	75.3	88.1	68.6	78.6	98.3	10.7
M8-2 FTS	87.0	80.1	81.8	84.4	83.3	104.1	3.6
PFHpS	81.3	81.0	79.2	79.8	80.3	100.4	1.26
N-MeFOSAA	79.5	76.7	94.3	80.7	82.8	103.5	9.5
d3M N- MeFOSAA	74.5	83.1	83.5	78.3	79.9	99.8	5.4
PFDA	81.3	80.4	79.1	84.5	81.3	101.7	2.8
M6PFDA	81.1	78.6	81.7	83.2	81.2	101.4	2.4
N-EtFOSAA	66.8	78.1	83.0	69.0	74.2	92.8	10.2
M N-EtFOSAA	74.3	69.6	75.1	82.0	75.3	94.1	6.7
PFOS	74.2	74.4	71.5	80.9	75.2	94.0	5.3
M8PHOS	77.8	78.7	73.9	79.7	77.5	96.9	3.3
PFuDA	77.5	81.6	87.3	79.1	81.4	101.7	5.3
M7PFuDA	75.8	80.1	82.7	85.4	81.0	101.3	5.1
PFNS	77.0	82.5	95.6	85.4	85.1	106.4	9.2
PFDoA	74.4	79.2	80.5	78.8	78.2	97.8	3.4
MPFDoA	75.8	78.1	79.3	78.9	78.0	97.6	2.0
FOSA	75.4	80.9	85.6	81.8	80.9	101.2	5.2
M8FOSA	80.0	83.1	81.6	83.0	81.9	102.4	1.7
PFDS	78.1	83.2	78.6	82.7	80.7	100.8	3.3
PFTriA	76.0	79.4	78.9	82.7	79.2	99.1	3.4
PFTeDA	71.3	85.8	83.9	78.8	80.0	100.0	8.1
M2PFTeDA	67.1	76.7	78.5	82.3	76.2	95.2	8.5

表 6: 地下水-替代物的加标回收率: 160 ng/L 的准确度 (回收率%) 和精密度 (%RSD)。

样品ID	160 ng/L #1	160 ng/L #2	160 ng/L #3	160 ng/L #4	平均回收率 (ng/L)	%RSD
d3-NMeFOSAA	182.7	170.8	219.4	173.5	116.7	12.0
d5-NEtFOSAA	165.1	188.6	174.0	169.9	109.0	5.8
M2-4-2 FTS	144.6	163.7	153.0	146.9	95.0	5.6
M2-6-2 FTS	164.9	157.6	168.4	141.3	98.8	7.6
M2-8-2 FTS	152.7	194.6	177.2	172.0	108.9	9.9
M2PFDoA	185.9	197.6	215.0	187.3	122.8	6.8
M2PFTreA	219.0	223.5	232.1	208.4	138.0	4.5
M3PFBS	174.0	175.5	180.2	175.6	110.2	1.5
M3PFHxS	184.5	202.9	196.5	176.1	118.8	6.3
M4PFBA	181.0	195.4	189.1	186.9	117.6	3.2
M4PFHpA	180.3	188.0	190.1	180.2	115.4	2.8
M5PFHxA	186.2	199.9	193.6	168.7	117.0	7.2
M5PFPeA	182.4	192.4	193.8	182.1	117.3	3.4
M6PFDA	182.5	179.5	194.2	176.7	114.6	4.2
M7PFUnA	185.4	191.9	204.3	196.0	121.5	4.1
M8FOSA	193.4	194.6	215.3	184.7	123.1	6.6
M8PFOA	182.2	187.9	188.9	179.7	115.5	2.4
M8PFOS	184.2	188.9	198.3	185.5	118.3	3.4
M9PFNA	173.9	186.0	195.7	182.8	115.4	4.9

表 7: 试剂水-替代物的加标回收率: 160 ng/L 的准确度 (回收率%) 和精密度 (%RSD)。

样品ID	160 ng/L #1	160 ng/L #2	160 ng/L #3	160 ng/L #4	平均回收率 (ng/L)	%RSD
d3-NMeFOSAA	152.5	158.2	152.3	155.7	96.7	1.8
d5-NEtFOSAA	145.8	144.1	139.2	153.2	91.0	4.0
M2-4-2 FTS	129.5	146.5	136.2	130.7	84.8	5.7
M2-6-2 FTS	139.5	145.2	136.5	131.2	86.3	4.2
M2-8-2 FTS	124.3	139.7	156.5	145.1	88.4	9.5
M2PFDoA	149.2	152.6	152.2	148.4	94.2	1.4
M2PFTreA	143.2	140.9	148.6	136.8	89.0	3.5
M3PFBS	133.1	152.9	138.7	141.2	88.4	5.9
M3PFHxS	137.6	146.1	149.4	142.9	90.0	3.5
M4PFBA	140.2	126.2	140.7	138.7	85.3	5.0
M4PFHpA	147.8	154.2	152.1	153.3	94.9	1.9
M5PFHxA	151.3	152.2	154.5	146.5	94.5	2.2
M5PFPeA	145.6	152.1	147.4	148.7	92.8	1.8
M6PFDA	150.2	151.3	148.8	154.1	94.5	1.5
M7PFUnA	146.0	149.6	150.3	144.7	92.3	1.8
M8FOSA	143.3	171.0	149.2	134.3	93.4	10.4
M8PFOA	145.7	157.8	153.7	145.5	94.2	4.0
M8PFOS	139.2	141.6	140.6	140.9	87.9	0.7
M9PFNA	153.3	149.2	156.6	157.5	96.4	2.4

表 8：地表水-替代物的加标回收率：160 ng/L 时的准确度（回收率%）和精密度（%RSD）。

样品ID	160 ng/L #1	160 ng/L #2	160 ng/L #3	160 ng/L #4	平均回收率 (ng/L)	%RSD
d3-NMeFOSAA	159.9	134.1	139.7	132.6	88.5	8.9
d5-NEtFOSAA	133.1	144.2	140.6	111.3	82.7	11.1
M2-4-2 FTS	149.9	134.2	122.9	132.3	84.3	8.3
M2-6-2 FTS	141.3	124.5	134.4	132.6	83.3	5.2
M2-8-2 FTS	143.2	131.1	128.0	116.8	81.1	8.4
M2PFDoA	157.3	146.4	146.2	137.8	91.8	5.4
M2PFTreA	155.9	138.4	135.4	137.4	88.6	6.7
M3PFBS	153.7	136.2	143.5	132.2	88.4	6.7
M3PFHxS	153.5	128.0	143.6	131.4	87.0	8.4
M4PFBA	155.8	140.6	141.6	132.9	89.2	6.7
M4PFHpA	155.9	139.4	140.2	130.7	88.5	7.4
M5PFHxA	162.8	144.8	142.2	129.2	90.5	9.6
M5PFPeA	158.2	144.1	140.1	136.8	90.5	6.5
M6PFDA	148.1	137.5	138.5	138.1	87.9	3.6
M7PFUnA	151.2	145.2	143.9	143.2	91.2	2.5
M8FOSA	155.3	149.2	131.9	135.2	89.3	7.8
M8PFOA	156.7	138.5	146.7	136.6	90.4	6.3
M8PFOS	141.2	139.1	136.7	120.8	84.1	6.9
M9PFNA	157.2	136.0	144.3	132.3	89.1	7.7

表 9：废水-替代物回收率：160 ng/L 时的准确度（回收率%）和精密度（%RSD）。

样品ID	160 ng/L #1	160 ng/L #2	160 ng/L #3	160 ng/L #4	平均回收率 (ng/L)	%RSD
d3-NMeFOSAA	158.1	145.7	150.1	138.8	92.6	5.4
d5-NEtFOSAA	161.7	153.8	147.5	141.7	94.5	5.7
M2-4-2 FTS	170.6	147.6	161.9	159.5	100.0	5.9
M2-6-2 FTS	146.9	157.1	146.2	143.0	92.7	4.1
M2-8-2 FTS	151.2	151.7	166.9	146.3	96.3	5.8
M2PFDoA	160.1	160.5	168.6	143.3	98.9	6.7
M2PFTreA	153.4	150.3	157.4	136.7	93.4	6.0
M3PFBS	179.4	165.4	163.8	151.9	103.2	6.8
M3PFHxS	169.9	151.6	160.2	144.6	97.9	7.0
M4PFBA	173.8	172.4	155.5	149.5	101.8	7.5
M4PFHpA	169.1	164.5	156.1	148.4	99.7	5.7
M5PFHxA	174.3	171.4	164.2	148.5	102.9	7.0
M5PFPeA	174.6	168.7	158.5	149.5	101.8	6.8
M6PFDA	154.4	154.1	155.1	134.8	93.5	6.6
M7PFUnA	156.5	156.9	167.9	139.5	97.0	7.6
M8FOSA	156.2	169.7	159.3	146.6	98.8	6.0
M8PFOA	166.2	156.4	162.5	150.2	99.3	4.4
M8PFOS	147.4	146.3	150.7	136.2	90.7	4.3
M9PFNA	159.8	157.6	164.5	142.3	97.6	6.2

■ 总结与结论

本应用报告使用岛津UFMS™ LCMS-8050对EPA SW-846 8327方法进行了评价，该方法可进样直接分析非饮用水（即地下水、地表水和废水）中的24种PFAS和19种质量标记的替代物。本文中引用的数据表明：将LCMS-8050用于PFAS分析在具有挑战性的环境基质中表现优异，并且只需制备少量样品。

所有PFAS化合物的线性、准确度和精密度均达到了EPA 8327方法草案的要求。因此，岛津LCMS-8050可以在非饮用水中获得快速、可靠和高灵敏度的定量结果，从而实现高通量分析。

■ 参考文献

1. 环境科学与技术。“多氟化合物：过去、现在和将来”
<http://www.greensciencepolicy.org/wp-content/uploads/2014/10/Lindstrom-Strynar-and-Libelo-2011.pdf>
2. 美国有毒物质与疾病登记署，“全氟和多氟烷基化合物（PFAS）与您的健康”，2018年10月31日。[在线]。
访问网址：
<https://www.atsdr.cdc.gov/pfas/> [2018年12月11日访问]
3. 美国环境保护署（EPA）全氟和多氟烷基化合物（PFAS）
<https://www.epa.gov/pfas> [2018年11月27日访问]
4. 美国国家环境健康科学研究院全氟化学物质（PFC）
https://www.niehs.nih.gov/health/materials/perfluorinated_chemicals_508.pdf [2018年11月27日访问]
5. US EPA.全氟和多氟烷基化合物（PFAS）的基本信息。
<https://www.epa.gov/pfas/basic-information-about-and-polyfluoroalkyl-substances-pfass>
6. US EPA.PFOA和PFOS的饮用水健康咨询
<https://www.epa.gov/ground-water-and-drinking-water/drinking-water-health-advisories-pfoa-and-pfos>
7. ASTM International, “ASTM D7979-17: “利用液相色谱串联质谱法（LC/MS/MS）测定水、污泥、进水、污水和废水中全氟化合物的标准试验方法”，West Conshohocken, 2017
8. ASTM D7979-17, 利用液相色谱串联质谱法（LC/MS/MS）测定水、污泥、进水、污水和废水中全氟和多氟烷基化合物的标准试验方法，ASTM International, West Conshohocken, 2017, www.astm.org (2018年11月27日访问)
9. 利用LCMS-8045对EPA M537.1中规定的全氟和多氟烷基化合物（PFAS）进行分析。Brahm Prakash, Gerard Byrne II, Ruth Marfil-Vega, Yuka Fujito, 岛津科学仪器公司, 马里兰州哥伦比亚, 邮编: 21046

UFGS

ULTRA FAST MASS SPECTROMETRY



LCMS-8040



LCMS-8045



LCMS-8050



LCMS-8060



LCMS-2020



Q-TOF LCMS-9030

岛津制作所成立于1875年，始终秉持“以科学技术向社会做贡献”的理念，致力于引领先进技术的发展，积淀了丰厚的创新底蕴。岛津科学仪器(SII)成立于1975年，是岛津制作所的美国子公司，致力于为整个北美、中美和南美洲部分地区的实验室提供全面的分析解决方案。SII 服务网络遍布全美，共设有九个区域办事处，东西海岸均开设应用实验室，我们的技术专家、服务和销售工程师可随时为您提供服务。

有关岛津科学仪器的更多信息，以及如何联系您当地的办事处，请访问我们的网站 www.ssi.shimadzu.com



岛津企业管理（中国）有限公司
岛津（香港）有限公司

<http://www.shimadzu.com.cn>

用户服务热线电话： 800-810-0439
400-650-0439

免责声明：

*本资料未经许可不得擅自修改、转载、销售；
*本资料中的所有信息仅供参考，不予任何保证。
如有变动，恕不另行通知。

第一版发行日：2019年11月