

# LCMS-8050RX 测定纺织塑料消费品中 80 种 PFAS 化合物

## LCMSMS-1085

**摘要：** 本文参考检测行业在纺织品及塑料消费品上的检测标准 EN 17681-1:2025, 使用岛津超高效液相色谱 - 三重四极杆质谱联用仪建立测定 80 种全氟和多氟烷基物质 (简称 PFAS) 的 20 min 快速分析方法。本文结合消费品在检测行业的实际检测情况, 结合 80 种 PFAS 化合物的性质差异, 对含氟醇类化合物 (简称 FTOH) 设置独立分析方法, 便于定量确证。该方法具有灵敏度高、分析化合物种类全等特点, 可用于消费品检测等相关行业的 PFAS 项目测试作为参考。

**关键词：** 三重四极杆质谱 纺织与塑料品 PFAS LCMS-8050RX

### 技术特点：

- ❖ 测试的 PFAS 化合物种类全, 总数达到 80 个, 可有效应对当前主要的 PFAS 分析标准;
- ❖ 满足最新标准 EN 17681-1:2025 的灵敏度要求。

全氟和多氟烷基物质 (简称 PFAS) 因其耐高温、抗腐蚀特性被广泛应用于消费品 (如不粘锅、防水服装) 及塑料行业, 但其持久性、生物累积性及毒性也引发全球关注。研究表明长期接触低浓度氟化物可导致氟斑牙、骨骼病变, 甚至干扰内分泌系统; 而工业排放的氟化物通过大气沉降污染土壤与水体, 威胁农作物安全及生态平衡。

欧盟 2025 年 9 月实施的 EN 17681-1:2025 标准将对纺织、塑料等各类消费品的 PFAS 检测限值降至 0.1 µg/kg, 并要求进行全生命周期评估; 美国 EPA 同步修订《有毒物质控制法》, 限制 PFAS 在食品包装中

的使用。中国《生活饮用水卫生标准》亦将氟化物限值收紧至 1.0 mg/L。在此背景下, 当前塑料与纺织企业面临原料替代压力, 技术成本与供应链重构仍是瓶颈, 未来需通过绿色化学创新与跨区域协作, 实现经济与环境的双赢。我国是消费品出口大国, 当前对出口商品的 PFAS 项目质量监测至关重要。

本文结合当前检测行业在纺织和塑料类消费品的检测标准 EN 17681-1:2025, 使用岛津三重四极杆液质联用仪 LCMS-8050RX, 建立了 80 种 PFAS 化合物的快速分析方法, 为相关行业人员作参考。

## ■ 实验部分

### 1.1 仪器

本实验采用岛津超高效液相色谱仪 LC-40 XS 与三重四极杆质谱仪 LCMS-8050RX 联用系统。具体配置为：

系统控制器：CBM-40

脱气机：DGU-20A<sub>5</sub>

输液泵：LC-40D XS

自动进样器：SIL-40C XS

柱温箱：CTO-40C

质谱仪：LCMS-8050RX

色谱工作站：LabSolutions Ver.5.128

### 1.2 分析条件

液相色谱条件 1 (分析 80 个 PFAS)



## 质谱条件 2 (分析 FTOH 类)

离子化模式 : ESI-

雾化气流速 : 3 L/min

接口温度 : 200 °C

D L 温度 : 150 °C

加热气流速 : 10 L/min

干燥气流速 : 10 L/min

加热模块温度 : 150 °C

扫描模式 : MRM (参数见表 3)

表 3 MRM 质谱参数

No.	英文简称	CAS No.	前体离子	产物离子	Q <sub>1</sub> Pre Bias(V)	CE(V)	Q <sub>3</sub> Pre Bias(V)
1	PFBA	375-22-4	213.00	168.90*	15	11	15
2	PFPeA	2706-90-3	263.00	218.90*	20	7	23
				68.90	13	38	27
3	PFHxA	307-24-4	313.00	269.00*	11	9	18
				118.90	21	19	10
4	PFHpA	375-85-9	363.00	319.00*	18	11	14
				169.00	17	16	28
5	PFNA	375-95-1	463.00	418.90*	12	10	10
				219.20	12	16	13
6	PFDA	335-76-2	513.00	469.00*	24	13	15
				219.20	20	18	21
7	PFUnA	2058-94-8	563.00	518.80*	20	13	24
				269.20	20	20	26
8	PFDoA	307-55-1	613.00	568.80*	30	14	26
				269.00	30	20	26
9	PFTrA	72629-94-8	663.00	618.80*	24	13	32
				169.10	32	25	16
10	N-Et-FOSE	1691-99-2	630.00	59.10*	22	22	11
11	N-Me-FOSE	24448-09-7	616.00	58.90*	22	14	14
12	N-Et-PFOSA	4151-50-2	526.00	219.00*	20	25	22
				125.90	24	25	20
13	N-Me-PFOSA	31506-32-8	511.90	169.00*	24	29	18
				268.80	40	24	26
14	PFTeA	376-06-7	713.00	668.80*	20	13	34
				169.00	20	30	16
15	PFPrA	422-64-0	163.00	119.00*	11	12	10
16	PFOA	335-67-1	413.00	369.00*	20	10	19
				169.00	11	18	29

17	PFBS	375-73-5	299.00	79.90*	23	34	13
				98.90	21	28	15
18	PFHxS	355-46-4	399.00	79.90*	19	44	15
				98.80	15	35	25
19	PFHpS	375-92-8	449.00	79.80*	12	50	18
				98.90	17	38	22
20	PFOS	1763-23-1	499.00	79.90*	18	59	13
				98.80	18	44	15
21	PFOSA	754-91-6	497.90	77.90*	11	33	14
				47.90	14	98	16
22	PFDS	335-77-3	599.00	79.90*	22	63	18
				98.90	22	49	20
23	6:2 FTS	27619-97-2	427.00	406.90*	15	24	13
				80.80	11	41	14
24	H4PFUnA (8:3-FTCA)	34598-33-9	491.00	387.00*	17	14	18
				366.90	17	24	23
25	PF-3,7-DMOA	172155-07-6	468.80	269.00*	10	22	25
				219.00	17	24	21
26	HPFHpA	1546-95-8	344.70	281.20*	17	11	30
				130.90	16	25	25
27	8:2 FTS	39108-34-4	527.00	506.80*	24	28	34
				81.10	22	38	14
28	10:2 FTS	120226-60-0	626.80	606.80*	30	31	40
				81.00	22	50	16
29	C8-PFPA	40143-78-0	498.80	498.80*	18	12	22
				79.50	11	52	20
30	H2PFDA(8:2-FTCA)	27854-31-5	476.90	392.90*	13	18	17
				412.90	17	7	19
31	HFPO-DA	13252-13-6	285.00	169.00*	19	7	10
				185.00	19	17	11
32	NaDONA	2250081-67-3	376.90	251.20*	13	12	25
				85.10	18	27	18
33	4:2 FTS	757124-72-4	327.00	306.90*	16	20	21
				80.90	15	29	18
34	PFNS-Na	98789-57-2	548.90	79.90*	20	65	17
				98.80	26	49	19

35	PFPeS-Na	630402-22-1	349.10	79.90*	16	38	15
				98.80	13	30	21
36	PFODA	16517-11-6	912.65	868.70*	26	15	32
				219.10	26	30	22
37	PFHxSA	41997-13-1	397.90	77.90*	14	27	11
				169.10	19	26	30
38	N-Me-FHxSA	68259-15-4	412.00	168.90*	15	25	15
				319.00	15	19	20
39	PFHxDA	67905-19-5	812.70	768.80*	30	16	40
				218.90	30	27	24
40	8:2 PAP	57678-03-2	543.00	97.00*	26	19	19
				79.00	20	82	16
41	6:2 diPAP	57677-95-9	789.00	442.90*	28	21	21
				96.80	22	35	29
42	6:2/8:2 diPAP	943913-15-3	889.00	96.90*	32	34	23
				542.80	26	20	28
43	8:2 diPAP	678-41-1	989.00	542.80*	28	22	40
				97.10	22	48	18
44	6:2 PAP	57678-01-0	442.90	96.80*	21	20	15
				78.80	16	73	13
45	PFPeDA	141074-63-7	762.90	718.80*	22	14	38
				168.80	22	25	16
46	N-MeFBSE	39424-92-2	416.00	59.00*	15	22	10
47	N-Me-FOSAA	2355-31-9	570.00	511.90*	24	20	24
				483.00	26	16	23
48	N-ET-FOSAA	2991-50-6	583.90	526.00*	22	22	24
				169.20	22	32	16
49	9CI-PF3ONS	73606-19-6	530.90	351.10*	20	23	21
				83.10	20	27	14
50	11CI-PF3OUdS	83329-89-9	630.90	450.80*	28	28	21
				82.90	24	31	19
51	10:2-PAP	57678-05-4	642.80	96.90*	24	22	21
				79.00	24	84	16
52	8:2 FTUCA	70887-84-2	457.00	392.90*	12	14	27
53	7:3 FTCA	812-70-4	441.00	337.00*	15	14	23
				316.90	16	19	21

54	3:3 FTCA	356-02-5	241.00	63.10*	17	7	21
				177.10	17	8	15
55	6:2 FTCA	53826-12-3	377.00	292.90*	13	18	19
				62.90	18	8	13
56	5:3 FTCA	914637-49-3	341.00	236.90*	12	16	22
				217.10	16	25	22
57	NFDHA	151772-58-6	295.00	201.00*	11	10	19
				84.90	14	26	16
58	PFEESA	113507-82-7	315.00	135.10*	11	23	27
				68.90	14	53	14
59	PFMPA	377-73-1	229.00	84.90*	16	15	20
60	PFMBA	863090-89-5	279.00	85.10*	13	15	17
61	N-AP-FHxSA	50598-28-2	482.90	169.00*	17	29	30
				319.00	17	23	20
62	11H-PFUnDA	1765-48-6	545.00	480.80*	24	14	16
				169.00	20	21	17
63	8:8 PFPi	40143-79-1	900.80	500.80*	26	62	34
				63.00	24	79	10
64	FBSA	30334-69-1	298.00	78.10*	21	23	12
				48.10	14	65	16
65	HFPO-TA	13252-14-7	185.00	119.10*	11	16	25
				185.00	19	12	10
66	PFHEPA	252237-40-4	427.00	406.90*	15	18	18
				78.90	20	36	15
67	PFHpSi	68555-66-8	432.95	368.90*	16	12	26
				169.00	15	22	17
68	TFA	76-05-1	113.00	68.90*	11	14	16
				112.90	21	11	24
69	TFMSA	1493-13-6	149.00	79.90*	10	23	14
				98.80	10	24	20
70	TFSI	82113-65-3	280.00	147.10*	13	24	13
				211.10	21	18	23
71	6:2 FTUCA	70887-88-6	357.00	293.00*	13	15	18
				243.10	13	36	15
72	6:3 FTCA	27854-30-4	391.00	287.00*	18	15	18
				266.90	18	21	17

73	6:6 PFPi	40143-77-9	701.00	400.90*	20	47	27
				100.80	20	70	19
74	HFAC	1522-22-1	207.00	137.00*	15	16	12
				69.00	14	27	11
75	4:2 FTOH	2043-47-2	323.00	59.00*	15	22	10
76	6:2 FTOH	647-42-7	423.00	59.00*	15	22	11
77	8:2 FTOH	678-39-7	522.90	59.10*	20	23	10
78	10:2 FTOH	865-86-1	622.85	59.00*	22	25	12
79	12:2 FTOH	39239-77-5	722.85	59.10*	20	13	10
80	7:1 FTOH	307-30-2	458.95	59.10*	13	23	11

备注：\* 定量离子

### 1.3 标准溶液配制

单标储备溶液：80 种 PFAS 化合物各单标称重适量，使用 90% 甲醇水溶液（内含 1 mol/L NaOH\*）溶解，各单标溶液浓度为 100 mg/L。

混标中间溶液：使用含 0.05 mmol/L NaOH 甲醇溶液稀释各单标溶液得到混合中间溶液，此混标中间溶液中 PAP 类和 FTOH 类 PFAS 浓度为 1 mg/mL，其它浓度为 100 ng/L。

校准溶液：使用含 0.05 mmol/L NaOH 甲醇溶液对混标中间溶液稀释 10 倍，获得浓度为 10.0 (100) \*\*ng/mL 和 1.0 (10) \*\*ng/mL 校准溶液。

备注：\* 加入 NaOH 溶液，可有效消除 PFAS 化合物与甲醇溶剂发生酯化反应。\*\* 括号内为 PAP 类和 FTOH 类标液浓度。

### 1.4 样品前处理方法

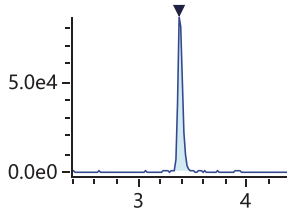
取试样 1 g（准确至  $\pm 0.01$  g）或 100 cm<sup>2</sup>（样品取样方式可根据实际情况而定），于 50 mL 聚丙烯离心管，加入 14 mL 甲醇，1.4 mL 1 mol/L NaOH 溶液，60°C 超声 60 min，冷却后用冰乙酸溶液调节 pH 值至 6-7，定容至 20 mL。若溶液浑浊可离心，取上清液上机测试。

## ■ 结果与讨论

### 2.1 MRM 色谱图

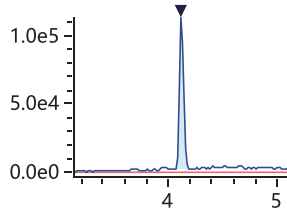
在 80 种 PFAS 化合物中，由于物化性质差异，使用一个液质分析方法很难同时满足所有化合物在灵敏度和色谱峰形上的共同要求。为此，在单一液质方法条件下，根据各化合物的检出限值为基准，最大化满足更多化合物的灵敏度和色谱峰形要求，是建立多化合物快速筛查分析方法的理想选择。对于部分灵敏度不理想的化合物，可另设独立方法进行二次定量验证。如 FTOH 类化合物在快筛方法条件 1 下测试的灵敏度较低，通常在 10 ng/mL 浓度水平下，4:2FTOH 和 7:1FTOH 即无法检出（其他 FTOH 类化合物灵敏度更高，可检出），但根据检测行业标准，FTOH 类化合物属于相伴相生的化合物（即常会共同检出），当任意一个 FTOH 类化合物检出时，需另用分析方法进行二次验证。同样对于 PAP 类化合物，若需进一步提高灵敏度和峰形，也可进一步优化流动相条件获得改善。条件 1 快筛分析 80 个 PFAS 化合物和条件 2 独立分析 6 个 FTOH 类化合物的 MRM 色谱图分别见图 1 和图 2。

Q 213.00&gt;168.90 (-) 8.59e4



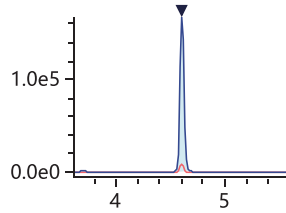
PFBA

Q 263.00&gt;218.90 (-) 1.14e5



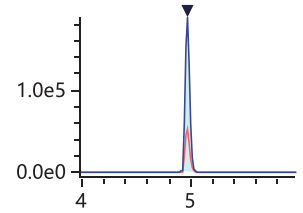
PFPeA

Q 313.00&gt;269.00 (-) 1.67e5



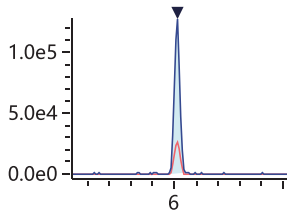
PFHxA

Q 363.00&gt;319.00 (-) 1.89e5



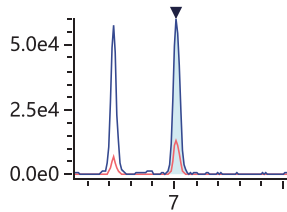
PFHpA

Q 463.00&gt;418.90 (-) 1.28e5



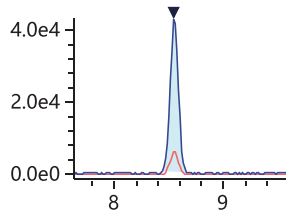
PFNA

Q 513.00&gt;469.00 (-) 6.02e4



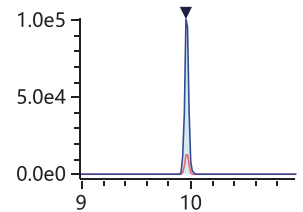
PFDA

Q 563.00&gt;518.80 (-) 4.33e4



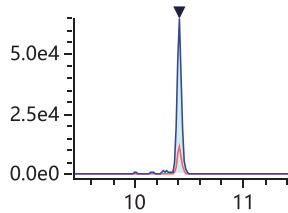
PFUnA

Q 613.00&gt;568.80 (-) 1.01e5



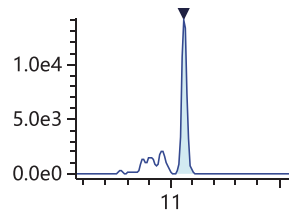
PFDoA

Q 663.00&gt;618.80 (-) 6.51e4



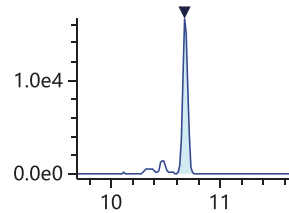
PFTrA

Q 630.00&gt;59.10 (-) 1.42e4



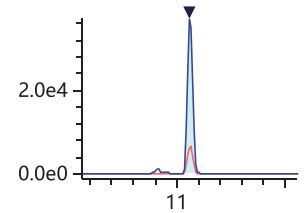
N-Et-FOSE

Q 616.00&gt;58.90 (-) 1.66e4



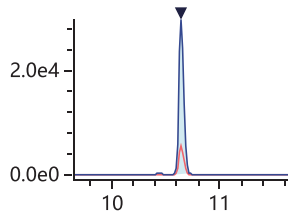
N-Me-FOSE

Q 526.00&gt;219.00 (-) 3.72e4



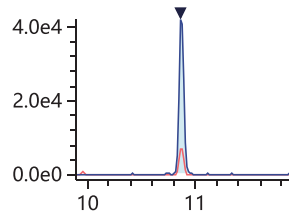
N-Et-PFOA

Q 511.90&gt;169.00 (-) 2.97e4



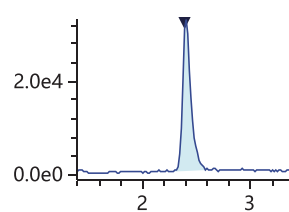
N-Me-PFOA

Q 713.00&gt;668.80 (-) 4.20e4



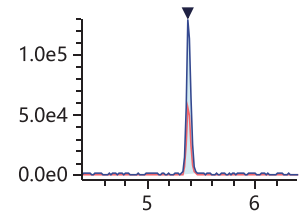
PFTeA

Q 163.00&gt;119.00 (-) 3.33e4



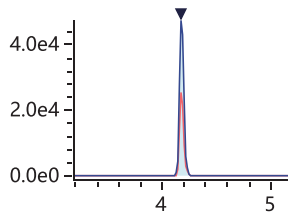
PFPrA

Q 413.00&gt;369.00 (-) 1.30e5



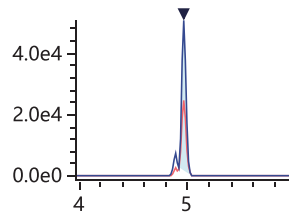
PFOA

Q 299.00&gt;79.90 (-) 4.76e4



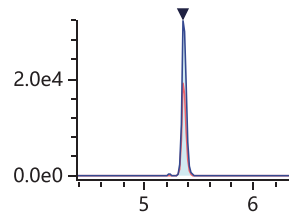
PFBS

Q 399.00&gt;79.90 (-) 5.09e4



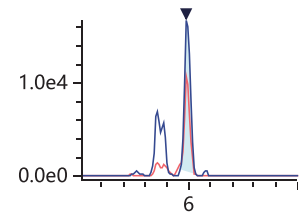
PFHxS

Q 449.00&gt;79.80 (-) 3.21e4



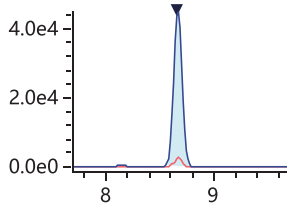
PFHpS

Q 499.00&gt;79.90 (-) 1.68e4



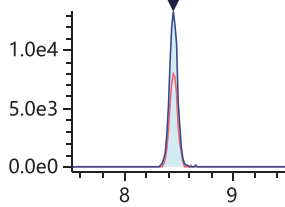
PFOS

Q 497.90&gt;77.90 (-) 4.50e4



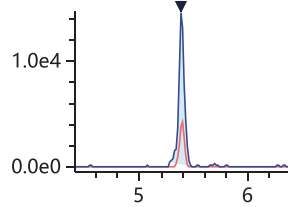
PFOSA

Q 599.00&gt;79.90 (-) 1.33e4



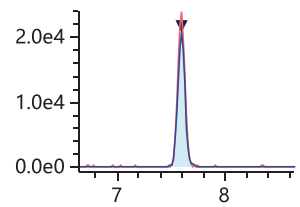
PFDS

Q 427.00&gt;406.90 (-) 1.47e4

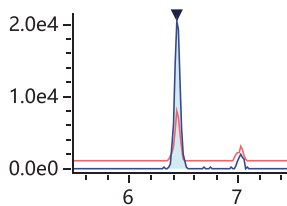


6:2 FTS

Q 491.00&gt;387.00 (-) 2.08e4

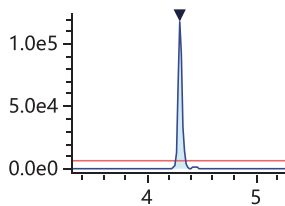

 H<sub>4</sub>PFUnA(8:3-FTCA)

Q 468.80&gt;269.00 (-) 2.05e4



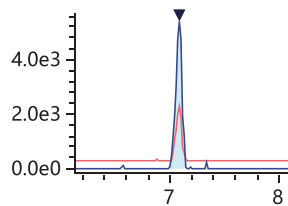
PF-3,7-DMOA

Q 344.70&gt;281.20 (-) 1.19e5



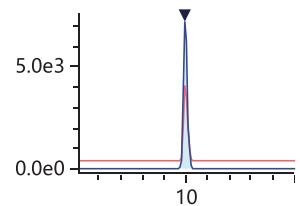
HPFHpA

Q 527.00&gt;506.80 (-) 5.42e3



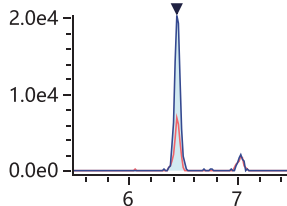
8:2 FTS

Q 626.80&gt;606.80 (-) 7.25e3



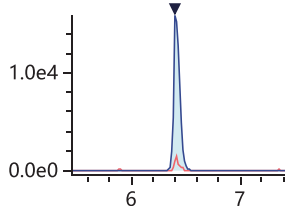
10:2 FTS

Q 468.80&gt;269.00 (-) 2.05e4

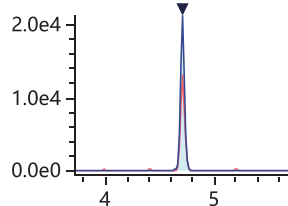


C8-PFPA

Q 476.90&gt;392.90 (-) 1.59e4

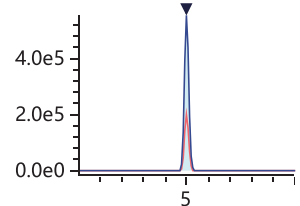

 H<sub>2</sub>PFDA(8:2-FTCA)

Q 285.00&gt;169.00 (-) 2.13e4



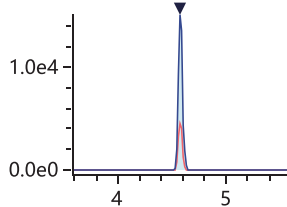
HFPO-DA

Q 376.90&gt;251.20 (-) 5.57e5



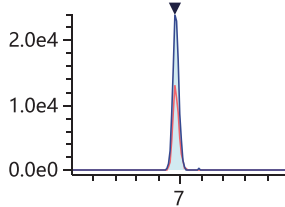
NaDONA

Q 327.00&gt;306.90 (-) 1.51e4



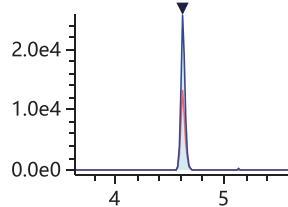
4:2 FTS

Q 548.90&gt;79.90 (-) 2.40e4



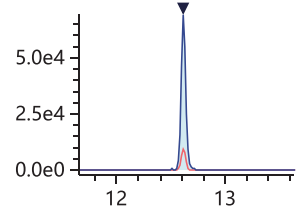
PFNS-Na

Q 349.10&gt;79.90 (-) 2.57e4



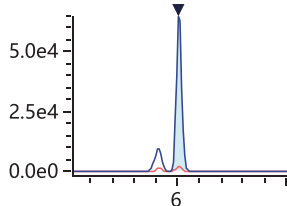
PFPeS-Na

Q 912.65&gt;868.70 (-) 6.93e4



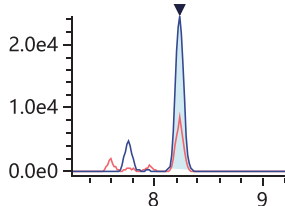
PFODA

Q 397.90&gt;77.90 (-) 6.49e4



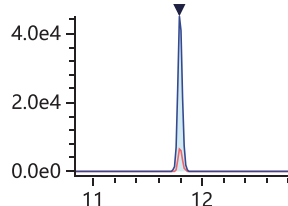
PFHxSA

Q 412.00&gt;168.90 (-) 2.44e4



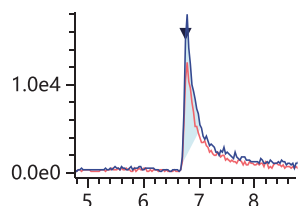
N-Me-FHxSA

Q 812.70&gt;768.80 (-) 4.51e4



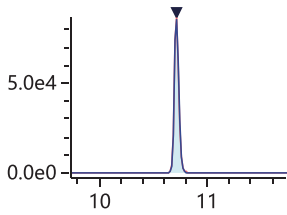
PFHxDA

Q 543.00&gt;97.00 (-) 1.82e4



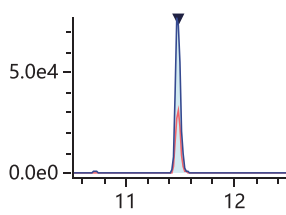
8:2 PAP

Q 789.00&gt;442.90 (-) 8.55e4



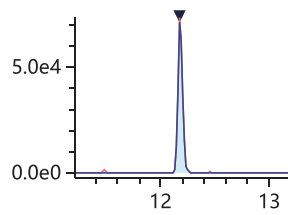
6:2 diPAP

Q 889.00&gt;96.90 (-) 7.75e4



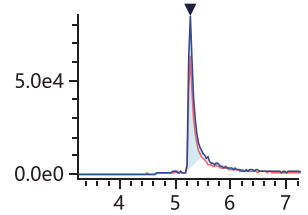
6:2/8:2 diPAP

Q 989.00&gt;542.80 (-) 7.14e4



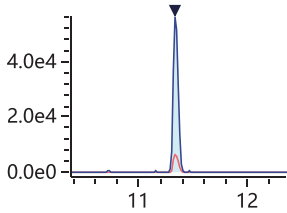
8:2 diPAP

Q 442.90&gt;96.80 (-) 8.57e4



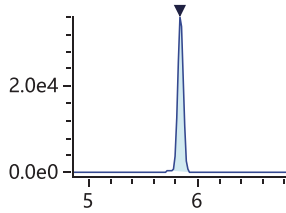
6:2 PAP

Q 762.90&gt;718.80 (-) 5.61e4



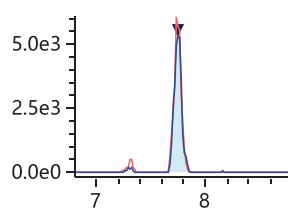
PFPeDA

Q 416.00&gt;59.00 (-) 3.60e4



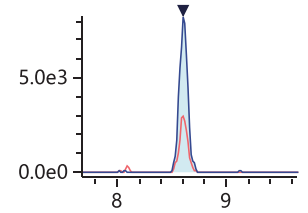
N-MeFBSE

Q 570.00&gt;511.90 (-) 5.34e3



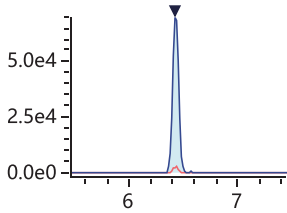
N-Me-FOSAA

Q 583.90&gt;526.00 (-) 8.22e3



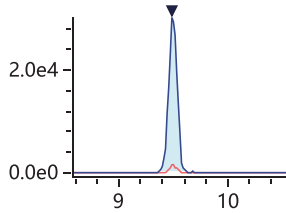
N-ET-FOSAA

Q 530.90&gt;351.10 (-) 6.97e4



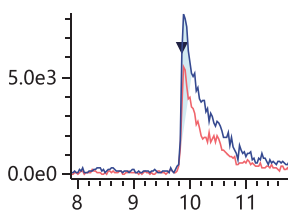
9Cl-PF3ONS

Q 630.90&gt;450.80 (-) 3.03e4



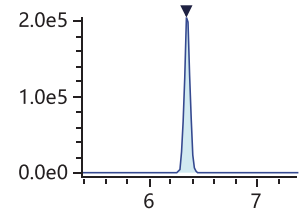
11Cl-PF3OUdS

Q 642.80&gt;96.90 (-) 8.27e3



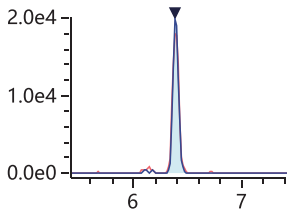
10:2-PAP\*

Q 457.00&gt;392.90 (-) 2.05e5



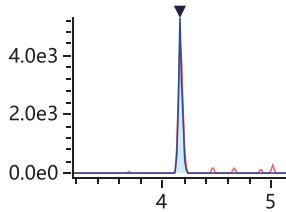
8:2 FTUCA

Q 441.00&gt;337.00 (-) 2.00e4



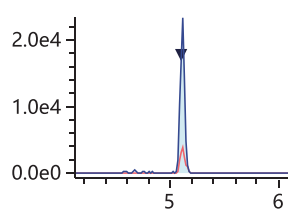
7:3 FTCA

Q 241.00&gt;63.10 (-) 5.29e3



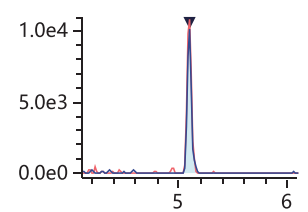
3:3 FTCA

Q 377.00&gt;292.90 (-) 2.34e4



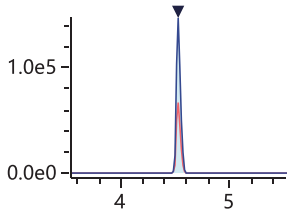
6:2 FTCA

Q 341.00&gt;236.90 (-) 1.02e4



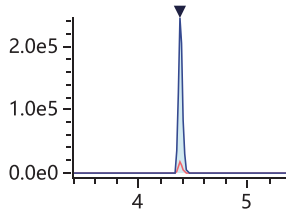
5:3 FTCA

Q 295.00&gt;201.00 (-) 1.47e5



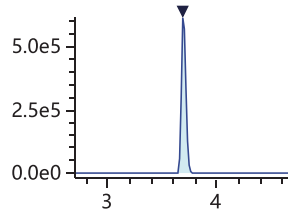
NFDHA

Q 315.00&gt;135.10 (-) 2.45e5



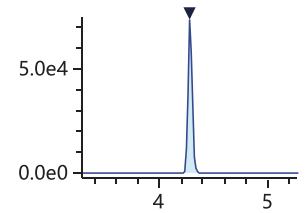
PFEESA

Q 229.00&gt;84.90 (-) 6.15e5



PFMPA

Q 279.00&gt;85.10 (-) 7.45e4



PFMBA

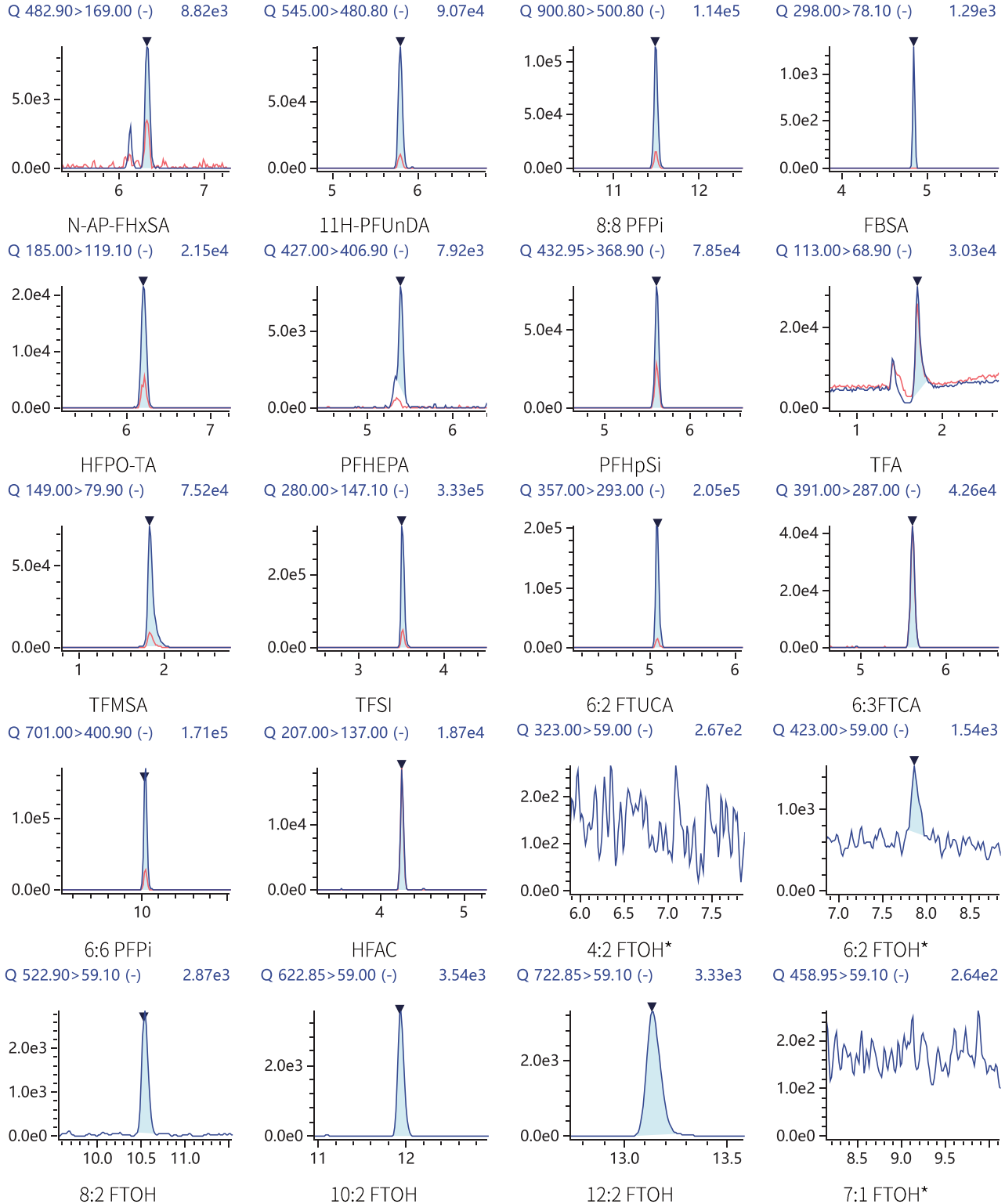


图1 80种PFAS快速分析MRM色谱图  
(1.0 ng/mL, 其中PAP类和FTOH类浓度为10 ng/mL, 条件1)

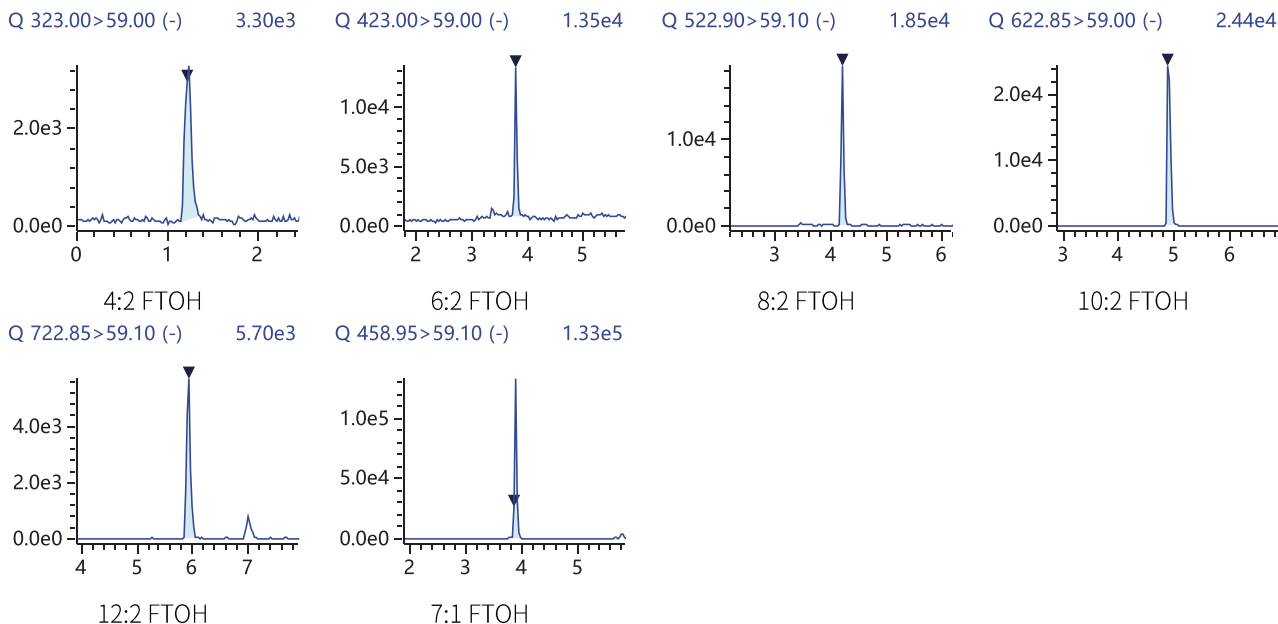


图 2 6 种 FTOH 类化合物独立分析 MRM 色谱图 (10.0 ng/mL, 条件 2)

## 2.2 检出限

根据以上最佳分析条件 (FTOH 类化合物使用条件 2, 其他 PFAS 使用条件 1) 测试 PFAS 化合物, 计算检出限值 (ASTM, S/N=3)。具体结果见下表 4。

表 4 80 种 PFAS 化合物检出限值

ID	化合物名称	检出限 (ng/mL)	ID	化合物名称	检出限 (ng/mL)
1	PFBA	0.02	41	6:2 diPAP	0.15
2	PFPeA	0.06	42	6:2/8:2 diPAP	0.20
3	PFHxA	0.03	43	8:2 diPAP	0.15
4	PFHpA	0.01	44	6:2 PAP	1.62
5	PFNA	0.02	45	PFPeDA	0.02
6	PFDA	1.74	46	N-MeFBSE	0.01
7	PFUnA	0.04	47	N-Me-FOSAA	0.09
8	PFDoA	0.01	48	N-ET-FOSAA	0.04
9	PFTTrA	0.02	49	9Cl-PF3ONS	0.02
10	N-Et-FOSE	0.04	50	11Cl-PF3OUdS	0.02
11	N-Me-FOSE	0.02	51	10:2-PAP	2.51
12	N-Et-PFOSA	0.02	52	8:2 FTUCA	0.01
13	N-Me-PFOSA	0.01	53	7:3 FTCA	0.01
14	PFTeA	0.03	54	3:3 FTCA	0.10
15	PFPPrA	0.07	55	6:2 FTCA	0.02

16	PFOA	0.03	56	5:3 FTCA	0.05
17	PFBS	0.01	57	NFDHA	0.01
18	PFHxS	0.01	58	PFEESA	0.01
19	PFHpS	0.02	59	PFMPA	0.01
20	PFOS	0.09	60	PFMBA	0.01
21	PFOSA	0.03	61	N-AP-FHxSA	0.03
22	PFDS	0.01	62	11H-PFU <sub>n</sub> DA	0.02
23	6:2 FTS	0.05	63	8:8 PFPi	0.01
24	H4PFUnA(8:3-FTCA)	0.01	64	FBSA	0.20
25	PF-3,7-DMOA	0.15	65	HFPO-TA	0.05
26	HPFHpA	0.02	66	PFHEPA	0.09
27	8:2 FTS	0.13	67	PFHpSi	0.01
28	10:2 FTS	0.01	68	TFA	0.20
29	C8-PFPA	0.05	69	TFMSA	0.02
30	H2PFDA(8:2-FTCA)	0.02	70	TFSI	0.01
31	HFPO-DA	0.02	71	6:2 FTUCA	0.01
32	NaDONA	0.01	72	6:3 FTCA	0.02
33	4:2 FTS	0.01	73	6:6 PFPi	0.01
34	PFNS-Na	0.02	74	HFAC	0.06
35	PFPeS-Na	0.02	75	4:2 FTOH	1.50
36	PFODA	0.01	76	6:2 FTOH	0.60
37	PFHxSA	0.02	77	8:2 FTOH	0.48
38	N-Me-FHxSA	0.11	78	10:2 FTOH	0.31
39	PFHxDA	0.01	79	12:2 FTOH	1.12
40	8:2 PAP	4.31	80	7:1 FTOH	0.12

## ■ 结论

本文建立了一种使用岛津三重四极杆液质联用仪 LCMS-8050RX 测定纺织品和塑料消费品中 80 种 PFAS 化合物的分析方法。该方法分析化合物覆盖面广、灵敏度高，适用于检测等相关行业 PFAS 化合物测试作为参考。

岛津应用云

