

特点描述

- ◆ LCMS-8060NX 可轻松满足并超过 ASTM D8421 中 44 种 PFAS 和 24 种替代物的方法性能标准。
- ◆ 优化色谱和质谱条件, 获得出色的峰形, 从而提高精密度和准确度。
- ◆ ASTM D8421 是一种经过 ASTM 验证的简单提取程序, 用于分析废水样品中的 PFAS。

■ 引言与背景

ASTM 国际发布了 ASTM D8421¹ 标准, 用于分析非饮用水样品中的 44 种全氟和多氟烷基化合物以及 24 种标记同位素。该方法以 1+1 的样品和甲醇比例提取物质, 过滤, 然后使用液相色谱 - 串联质谱 (LC/MS/MS) 外标法测量目标化合物。大多数化合物的最低报告限值为 10 ng/L, 线性范围为 10 - 400 ng/L。该方法要求实验室用纯化合物配制标准溶液。

为了节省实验室单独配制储备标准品的时间和精力, 我们使用市售标准品和标记同位素混标优化方法。此外, 我们优化了色谱条件, 使 PFBA 和 PFPrA 等早洗脱化合物能够获得更好的色谱峰形。

本应用报告总结了岛津 LCMS-8060NX 液相色谱质谱仪 (LC/MS/MS) (图 1) 在 ASTM D8421 列出的所有分析物中的性能, 结果达到或超过方法中的要求。

表 1 列出了分析物信息和线性范围。检测方法的报告限值 (RL) 定义为校准曲线最低标准品浓度的整数值。



图 1 岛津 LCMS-8060NX

表 1 D8421 分析物信息和线性范围列表

分析物名称	首字母缩略词	CAS 号	范围 (ng/L)
全氟十四酸	PFTreA	376-06-7	10-400
全氟十三酸	PFTriA	72629-94-8	10-400
全氟十二酸	PFDoA	307-55-1	10-400
全氟十一酸	PFUnA	2058-94-8	10-400
全氟癸酸	PFDA	335-76-2	10-400
全氟壬酸	PFNA	375-95-1	10-400
全氟辛酸	PFOA	335-67-1	10-400
全氟庚酸	PFHpA	375-85-9	10-400
全氟己酸	PFHxA	307-24-4	10-400
全氟戊酸	PFPeA	2706-90-3	50-1000
全氟丁酸	PFBA	375-22-4	50-1000
全氟癸烷磺酸	PFDS	335-77-3	10-400
全氟壬烷磺酸	PFNS	68259-12-1	10-400
全氟辛烷磺酸	PFOS	1763-23-1	10-400
全氟庚烷磺酸	PFHpS	375-92-8	10-400
全氟己烷磺酸	PFHxS	355-46-4	10-400
全氟戊烷磺酸	PFPeS	2706-91-4	10-400
全氟丁烷磺酸	PFBS	375-73-5	10-400

全氟辛烷磺酰胺	PFOSA	754-91-6	10-400
8:2 氟调聚物磺酸	8:2 FTS	39108-34-4	10-400
6:2 氟调聚物磺酸	6:2 FTS	27619-97-2	10-400
4:2 氟调聚物磺酸	4:2 FTS	757124-72-4	10-400
N- 乙基全氟辛烷磺酰氨基乙酸	NEtFOSAA	2991-50-6	10-400
N- 甲基全氟辛烷磺酰氨基乙酸	NMeFOSAA	2355-31-9	10-400
全氟十二烷磺酸	PFDoS	79780-39-5	10-400
N- 甲基全氟辛烷磺酰胺	NMeFOSA	31506-32-8	10-400
N- 乙基全氟辛烷磺酰胺	NEtFOSA	4151-50-2	10-400
N- 甲基全氟辛烷磺酰胺乙醇	NMeFOSE	24448-09-7	10-400
N- 乙基全氟辛烷磺酰胺乙醇	NEtFOSE	1691-99-2	10-400
六氟环氧丙烷二聚酸	HFPO-DA	13252-13-6	10-400
4,8- 二氧杂 -3H- 全氟壬酸	ADONA	919005-14-4	10-400
9- 氯十六氟 -3- 氧杂壬烷 -1- 磺酸	9Cl-PF3ONS	756426-58-1	10-400
11- 氯二十氟 -3- 氧杂十一烷 -1- 磺酸	11Cl-PF3OUdS	763051-92-9	10-400
五氟丙酸	PFPrA	422-64-0	50-1000
全氟 -3,6- 二氧庚酸	NFDHA	151772-58-6	10-400
全氟 (2- 乙氧基乙烷) 磺酸	PFEESA	113507-82-7	10-400
全氟 -3- 甲氧基丙酸	PFMPA	377-73-1	10-400
全氟 -4- 甲氧基丁酸	PFMBA	863090-89-5	10-400
2H,2H,3H,3H- 全氟己酸	3:3 FTCA	356-02-05	10-400
2H,2H,3H,3H- 全氟辛酸	5:3 FTCA	914637-49-3	10-400
2H,2H,3H,3H- 全氟癸酸	7:3 FTCA	812-70-4	10-400
2H- 全氟 -2- 辛烯酸	FHUEA	70887-88-6	10-400
2H- 全氟 -2- 癸烯酸	FOUEA	70887-84-2	10-400
双 (三氟甲烷) 磺酰亚胺锂 *	HQ-115	90076-65-6	10-400
替代物			
全氟 -n-[¹³ C ₄] 丁酸	MPFBA	NA	10-400
全氟 0-n-[¹³ C ₅] 戊酸	M5PFPeA	NA	10-400
全氟 -n-[1,2,3,4,6- ¹³ C ₅] 己酸	M5PFHxA	NA	10-400
全氟 -n-[1,2,3,4- ¹³ C ₄] 庚酸	M4PFHpA	NA	10-400
全氟 -n-[¹³ C ₈] 辛酸	M8PFOA	NA	10-400
全氟 -n-[¹³ C ₉] 壬酸	M9PFNA	NA	10-400
全氟 -n-[1,2,3,4,5,6- ¹³ C ₆] 癸酸	M6PFDA	NA	10-400
全氟 -n-[1,2,3,4,5,6,7- ¹³ C ₇] 十一烷酸	M7PFUnA	NA	10-400
全氟 -n-[1,2- ¹³ C ₂] 十二烷酸	MPFDoA	NA	10-400
全氟 -n-[1,2- ¹³ C ₂] 十四烷酸	M2PFTreA	NA	10-400
全氟 -1-[¹³ C ₈] 辛烷磺酰胺	M8FOSA	NA	10-400
N- 甲基 -d ₃ - 全氟 -1- 辛烷磺酰胺基乙酸	D3-N-MeFOSAA	NA	10-400
N- 乙基 -d ₅ - 全氟 -1- 辛烷磺酰胺基乙酸	D5-N-EtFOSAA	NA	10-400
N- 甲基 -d ₃ - 全氟 -1- 辛烷磺酰胺	d-N-MeFOSA	NA	10-400
N- 乙基 -d ₅ - 全氟 -1- 辛烷磺酰胺	d-N-EtFOSA	NA	10-400
2- (N- 甲基 -d ₃ - 全氟 -1- 辛烷磺酰氨基) 乙 -d ₄ - 醇	d7-N-MeFOSE	NA	10-400
2- (N- 乙基 -d ₅ - 全氟 -1- 辛烷磺酰氨基) 乙 -d ₄ - 醇	D9-N-EtFOSE	NA	10-400
2,3,3,3- 四氟 -2- (1,1,2,2,3,3,3- 七氟丙氧基 - ¹³ C ₃ - 丙酸	MHFPO-DA	NA	10-400
1H,1H,2H,2H- 全氟 -1-[1,2- ¹³ C ₂] 己烷磺酸盐	M4:2FTS	NA	10-400
1H,1H,2H,2H- 全氟 -1-[1,2- ¹³ C ₂] 辛烷磺酸盐	M6:2FTS	NA	10-400
1H,1H,2H,2H- 全氟 -1-[1,2- ¹³ C ₂] 癸烷磺酸盐	M8:2FTS	NA	10-400
全氟 -1-[¹³ C ₈] 辛烷磺酸盐	M8PFOS	NA	10-400
全氟 -1-[2,3,4- ¹³ C ₃] 丁磺酸盐	MPFBS	NA	10-400
全氟 -1-[1,2,3- ¹³ C ₃] 己烷磺酸盐	M3PFHxS	NA	10-400

红色化合物不在方法 1633 标准中，需要单独添加

■ 材料和方法

将含有分析物和标记同位素（替代物）的储备标准溶液从市售混合储备标准溶液（Wellington 方法 1633 标准混合物）中稀释至每个分析物的校准曲线范围内，如表 1 所示。

用含有 0.1% 乙酸的甲醇 / 水 =50/50 (V:V) 配制单独的标准溶液，以获得表 2 所示的最终浓度。

表 2 每个分析物的校准曲线标准溶液（CS）的浓度（ng/L）

	化合物	CS1	CS2	CS3	CS4	CS5	CS6	CS7	CS8	CS9	CS10	CS11	CS12	CS13	CS14	CS15
分析物	所有分析物，除非另有说明	1	2.5	5	10	25	40	60	80	100	150	200	250	375	500	800
	PFPeA	2	5	10	20	50	80	120	160	200	300	400	500	750	1000	1600
	PFBA, 4:2-FTS, 6:2-FTS, 8:2-FTS	4	10	20	40	100	160	240	320	400	600	800	1000	1500	2000	3200
	PFPrA, 5:3 FTCA, 7:3 FTCA	5	12.5	25	50	125	200	300	400	500	750	1000	1250	1875	2500	4000
	NMeFOSE, NEtFOSE	10	25	50	100	250	400	600	800	1000	1500	2000	2500	3750	5000	8000
替代物	13C9-PFNA, 13C6-PFDA, 13C7-PFUnA, 13C2-PFDoA, 13C2-PFTreA	0.25	0.625	1.25	2.5	6.25	10	15	20	25	37.5	50	62.5	93.75	125	200
	13C5-PFHxA, 13C4-PFHpA, 13C8-PFOA, 13C8-PFOA, D3- NMeFOA, D5-NEtFOA, 13C8- PFOS, 13C3-PFBS, 13C3-PFHxS	0.5	1.25	2.5	5	12.5	20	30	40	50	75	100	125	187.5	250	400
	13C5-PFPeA, 13C2-4:2FTS,13C2-6:2FTS, 13C2-8:2FTS, D3-NMeFOA, D5-NEtFOA	1	2.5	5	10	25	40	60	80	100	150	200	250	375	500	800
	13C4-PFBA, 13C3- HFPO-DA	2	5	10	20	50	80	120	160	200	300	400	500	750	1000	1600
	D7-NMeFOSE, D9-NEtFOSE	5	12.5	25	50	125	200	300	400	500	750	1000	1250	1875	2500	4000

为了从市售储备溶液中获得校准曲线溶液，配制并分析了 15 个不同浓度的点，标准溶液未过滤，直接使用。根据分析物不同，仅使用方法规定范围内的，6 至 10 个点制作校准曲线。

配制储备溶液并储存在不含 PFAS 的聚丙烯（PP）容器中。在分析之前，将溶液充分摇匀，然后转移到 2 mL PP LC 样品瓶中，并在 24 小时内进行分析。如果让样品或标准品留在 LC 样品瓶中时间过长，一些 PFAS 化合物可能会沉降、上升、沉淀或在样品瓶表面吸附。为确保溶液混合均匀，获得最佳结果，在进样前对溶液进行涡旋处理。

2.1 样品制备

取 5 mL 样品，置于 15 mL 聚丙烯样品瓶中，加入替代物混合标准溶液，再加入 5 mL 甲醇，涡旋混合约 2 分钟。混合后，加入乙酸调节 pH 值至 4。将等分试样转移到 LC 样品瓶中，用带隔垫的岛津实验器材（SGLC）提供的 PP 样品瓶加盖，确认样品瓶不含 PFAS。按照表 3 所示的条件进行分析。将校准曲线计算得到的浓度乘以 2，获得样品中的最终浓度。

2.2 分析条件

表 3 使用岛津 LCMS-8060NX 分析 ASTM D8421 标准中 PFAS 的仪器配置和分析条件。

流动相	A: 2 mmol/L 醋酸铵水溶液 / 乙腈 =95/5
	B: 乙腈
延迟柱	Shim-pack Scepter™ C18-120
	2.1 mm x 100 mm, 3 μm (P/N: 227-31014-05)
分析柱	Shim-pack™ GIST-HP C18
	3.0 mm x 100 mm, 3 μm (P/N: 227-30040-04)
梯度 (%B)	10% (0 min) =>22% (2.3-3.0 min)
	45% (6.0 min) =>80% (13.0 min) =>95% (14.0-16 min) =>10% (16.01-20.0 min)
离子源	IonFocus ESI

柱温箱温度	40 °C
流速	0.6 mL/min
进样量	25 μL
多次抽取 进样程序	共进样 25 μL 样品 → 25 μL 0.1% 乙酸水溶液
接口温度	170 °C
探针位置	+3 mm
雾化气流量	3 L/min
加热气流量	15 L/min
接口电压	-0.5 kV (所有化合物的值相同)
DL 温度	200
加热块温度	300
干燥气流量	5 L/min
聚焦电压	-2 kV (所有化合物的值相同)

■ 结果和讨论

之前的报告³描述了根据 ASTM D8272² 标准, 在 9 种废水基质中对该方法的特异性、线性、回收率和精密度进行的单一实验室验证。在本应用报告中, 对进样方式、色谱柱和流速进行优化, 以改善色谱峰形, 尤其是早洗脱化合物的峰形, 如 PFPrA 和 PFBA。将 25 μL 样品与 25 μL 0.1% 乙酸水溶液共进样显著改善了 PFPrA、PFBA 和 PFMPA 的峰形 (图 2)。实验结果表明, 内径和粒径大, 柱长长的色谱柱与高流速相结合, 可实现更大的轴向扩散, 从而改善峰形 (图 3)。

最后, 为了更好地从流动相中分离杂质, 选择了新的延迟柱, 并修改了梯度程序 (图 4)。优化色谱和质谱仪条件后, 配制混合物 (表 2) 的校准曲线溶液并用于后续分析。使用 LabSolutions™ 软件优化化合物参数, 包括定量离子、定性离子和碰撞能量, 每个化合物至少使用两个 MRM 通道 (部分化合物只有一个通道)。

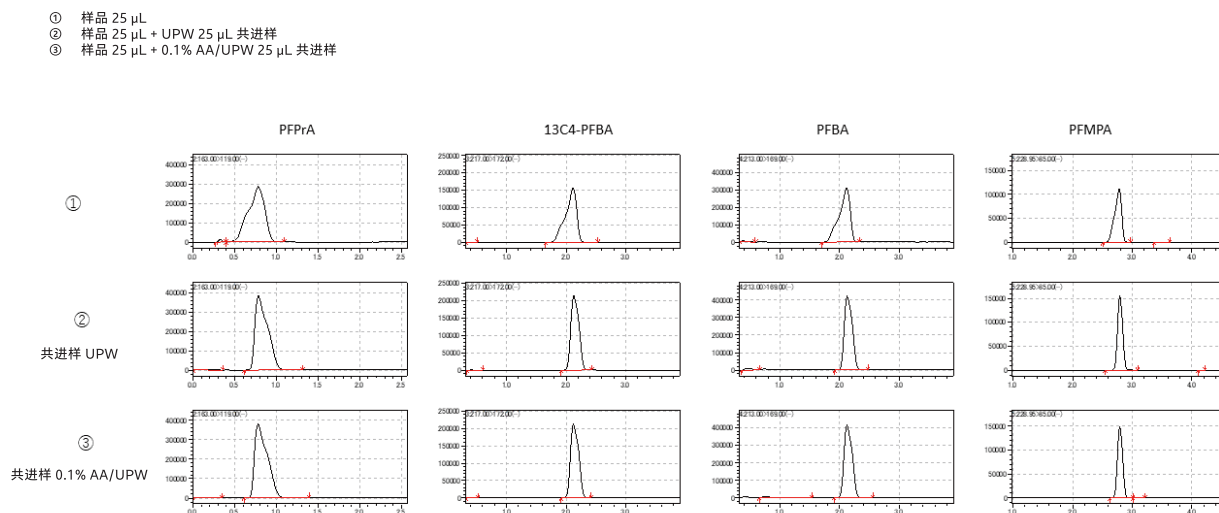


图 2 优化进样方式以改善峰形

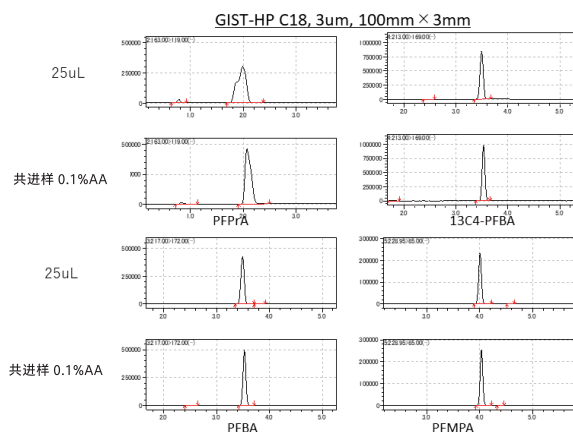


图3 使用最终色谱柱和流速，直接进样和溶剂共进样的色谱图示例

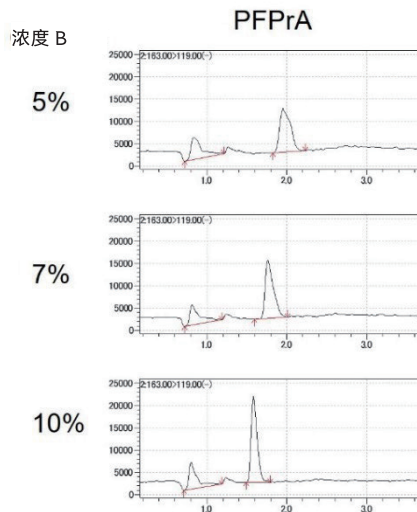
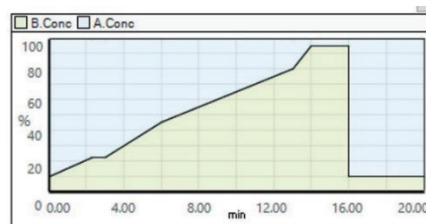


图4 最早洗脱的峰 PFPrA 的色谱图和梯度程序

线性研究

使用岛津 LabSolutions Insight 数据处理软件，获得每种分析物的校准曲线，%RSD 小于 30%，符合 ASTM D8421 的要求。表 4 显示了校准数据、定量离子和定性离子的 MRM 通道（部分化合物只有一个通道）和保留时间。图 5 和图 6 显示了 PFOA 和 PFOS 的校准曲线及中间点标准溶液色谱图。

选择这些化合物是因为可能在废水中对其进行调节。此外，图 7 和图 8 显示了 PFPrA 和 NEtFOSE 的校准曲线及中间点标准溶液色谱图，选择这两个化合物是因为它们分别是最早和最晚洗脱的化合物。

表 4 校准数据汇总。

化合物	定量离子	定性离子	保留时间 (min)	r ²
PFTreA	712.95>668.95	712.95>169.00	11.756	0.9962
PFTriA	662.95>618.95	662.95>169.00	11.026	0.9978
PFDaA	612.95>568.95	612.95>319.00	10.286	0.9987
PFUnA	562.95>518.95	562.95>269.00	9.543	0.9991
PFDA	512.95>468.95	512.95>219.00	8.813	0.9967
PFNA	462.95>418.95	462.95>219.00	8.11	0.9921
PFOA	412.95>369.00	412.95>169.00	7.451	0.9929
PFHpA	362.95>319.00	362.95>169.00	6.807	0.9989
PFHxA	312.95>269.00	312.95>119.00	6.028	0.9976
PFPeA	263.00>219.00	263.00>69.00	4.728	0.9996
PFBA	213.00>169.00	----	3.026	0.9985
PFDS	598.90>79.95	598.90>98.95	10.785	0.9971
PFNS	548.95>79.95	548.95>98.95	10.033	0.9975
PFOS	498.95>79.95	498.95>98.95	9.275	0.9951
PFHpS	448.95>79.95	448.95>98.95	8.522	0.9951
PFHxS	398.95>79.95	398.95>98.95	7.783	0.9917
PFPeS	348.95>79.95	348.95>98.95	7.059	0.9917
PFBS	298.95>79.95	298.95>98.95	6.17	0.9990
PFOSA	497.95>77.95	497.95>477.95	11.075	0.9979
8:2FTS	526.95>506.95	526.95>80.90	8.426	0.9976
6:2FTS	426.95>406.95	426.95>80.90	7.148	0.9960
4:2FTS	326.95>306.95	326.95>80.90	5.678	0.9970
NEtFOSAA	584.00>418.95	584.00>526.00	9.01	0.9950
NMeFOSAA	569.95>418.95	569.95>482.95	8.703	0.9929

PFDoS	698.90>79.95	698.90>98.95	12.228	0.9959
NMeFOSA	511.95>219.00	511.95>169.00	13.556	0.9956
NEtFOSA	526.00>219.00	526.00>169.00	14.149	0.9988
NMeFOSE	616.00>59.00	----	13.246	0.9996
NEtFOSE	630.00>59.00	----	13.853	0.9998
HFPO-DA	285.00>169.00	285.00>185.00	6.365	0.9971
ADONA	376.95>251.00	376.95>85.00	7.064	0.9980
9Cl-PF3ONS	530.90>350.95	532.90>352.95	9.809	0.9994
11Cl-PF3OUdS	630.90>450.95	632.90>452.95	11.308	0.9994
PFPaA	163.00>119.00	----	1.589	0.9996
NFDHA	294.95>201.00	294.95>85.00	5.937	0.9953
PFEEA	314.95>135.00	314.95>82.95	6.628	0.9978
PFMPA	228.95>85.00	----	3.656	0.9981
PFMBA	278.95>85.00	----	5.279	0.9979
3:3 FTCA	241.00>177.00	241.00>117.00	3.804	0.9717
5:3 FTCA	341.00>237.00	341.00>217.00	6.375	0.9945
7:3 FTCA	441.00>317.00	441.00>337.00	7.752	0.9964
FHUEA	357.00>293.00	----	6.472	0.9962
FOUEA	456.95>393.00	----	7.704	0.9973
HQ-115	279.90>146.95	279.90>210.90	7.259	0.9988
13C4-PFBA_Surr	217.00>172.00	----	3.023	0.9982
13C5-PFPeA_Surr	268.00>223.00	----	4.726	0.9976
13C5-PFHxA_Surr	318.00>273.00	318.00>120.00	6.026	0.9972
13C4-PFHpA_Surr	367.00>322.00	----	6.806	0.9994
13C8-PFOA_Surr	421.00>376.00	----	7.45	0.9959
13C9-PFNA_Surr	472.00>427.00	----	8.108	0.9947
13C6-PFDA_Surr	519.00>474.00	----	8.81	0.9989
13C7-PFUnA_Surr	570.00>525.00	----	9.541	0.9979
13C2-PFDoA_Surr	614.95>569.95	----	10.285	0.9968
13C2-PFTreA_Surr	714.95>669.95	----	11.755	0.9952
13C8-PFOA_Surr	505.95>77.95	----	11.077	0.9983
D3-NMeFOSAA_Surr	573.00>418.95	----	8.697	0.9933
D5-NEtFOSAA_Surr	589.00>418.95	----	9	0.9976
D3-NMeFOSA_Surr	515.00>219.00	515.00>168.90	13.548	0.9993
D5-NEtFOSA_Surr	531.00>219.00	531.00>168.90	14.131	0.9983
D7-NMeFOSE_Surr	623.05>59.00	----	13.206	0.9957
D9-NEtFOSE_Surr	639.10>59.00	----	13.807	0.9994
13C3-HFPO-DA_Surr	287.00>169.00	284.90>185.00	6.363	0.9921
13C2-4:2FTS_Surr	329.00>308.95	329.00>80.90	5.678	0.9943
13C2-6:2FTS_Surr	428.95>408.95	428.95>80.90	7.147	0.9903
13C2-8:2FTS_Surr	528.95>508.95	528.95>80.90	8.425	0.9956
13C8-PFOS_Surr	506.95>79.95	506.95>98.95	9.274	0.9966
13C3-PFBS_Surr	301.95>79.95	301.95>98.95	6.17	0.9953
13C3-PFHxS_Surr	401.95>79.95	401.95>98.95	7.782	0.9921

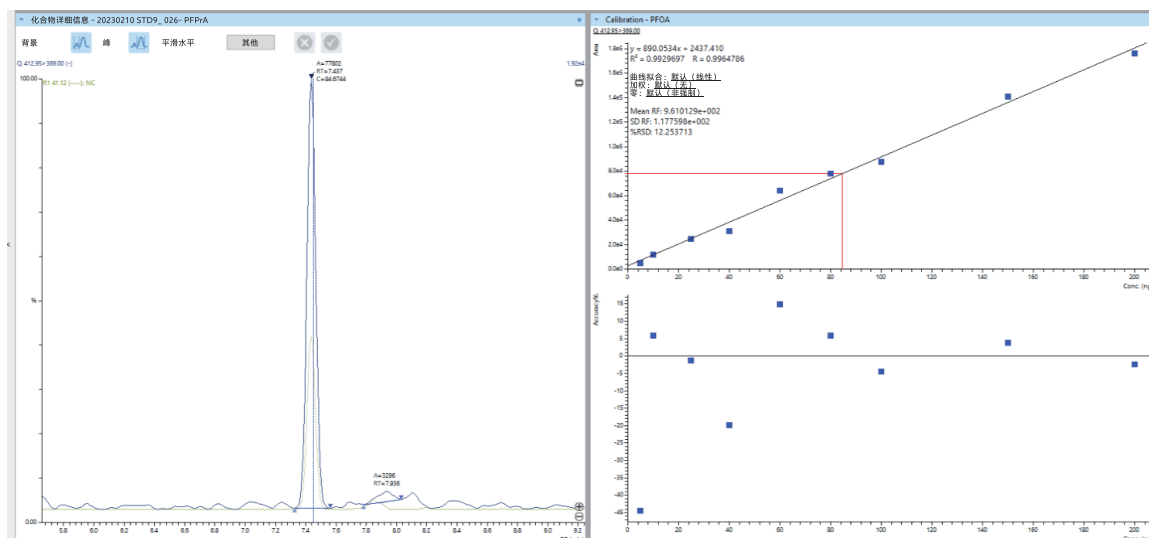


图5 PFOA的校准曲线和中间点标准溶液色谱图

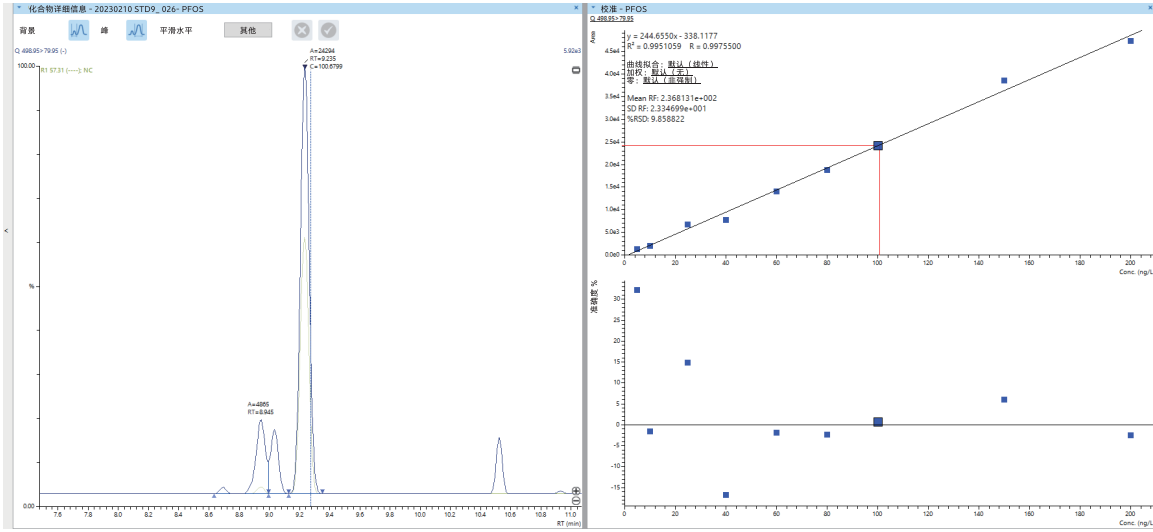


图 6 PFOS 的校准曲线和中间点标准溶液色谱图

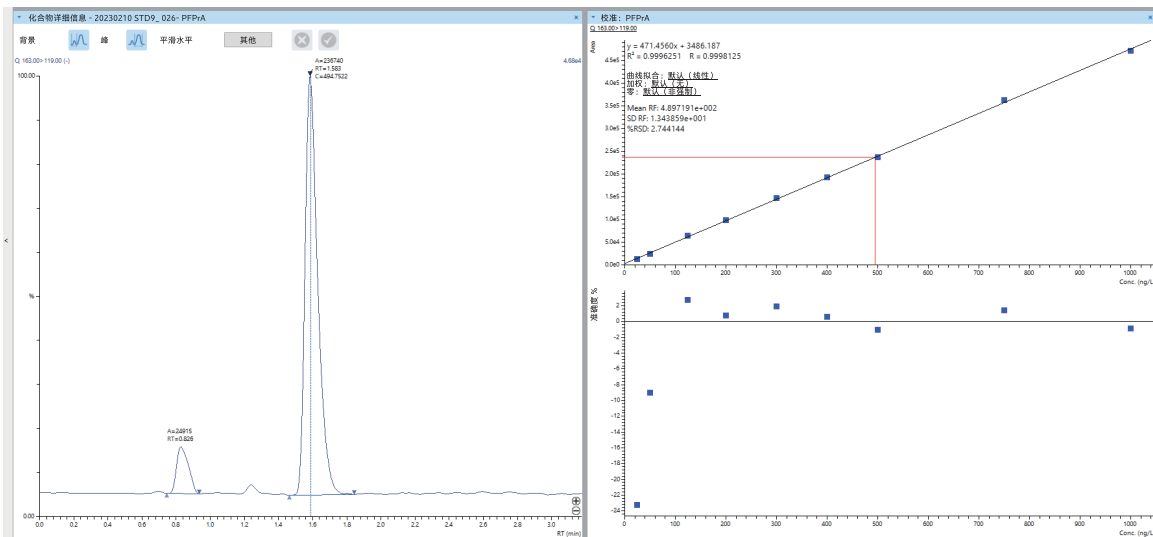


图 7 PFPrA 的校准曲线和中间点标准溶液色谱图

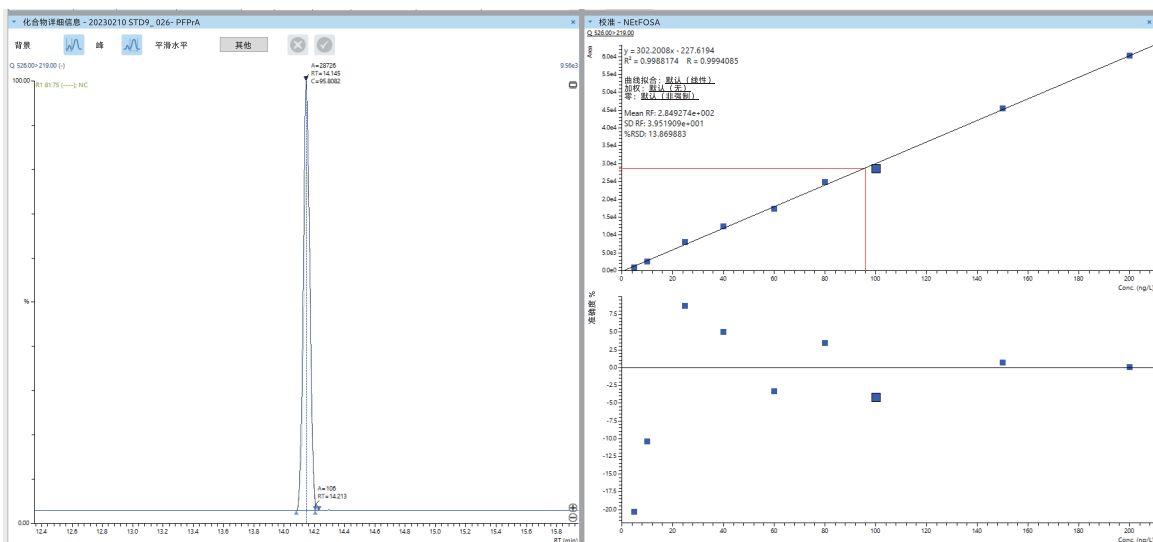


图 8 NETFOSE 的校准曲线和中间点标准溶液色谱图

回收率和重复性研究

分别在试剂水和废水中按照表 5 所示浓度加标四次，评估回收率和重复性。测得结果减去未加标样品基质中发现的天然 PFAS 后计算回收率。

这些数据完全在 ASTM D8421 方法的回收率在 70 -130% 之间和 RSD≤30% 范围内。

表 5 试剂水和废水中的回收率和重复性

化合物	加标浓度 (ppt)	试剂水回收率 %	试剂水 %RSD (n=4)	废水回收率 %	废水 %RSD (n=4)
PFTreA	160	110	3.76	119	2.71
PFTriA	160	109	2.08	79.9	4.82
PFDoA	160	104	4.33	107	4.6
PFUnA	160	113	5.53	105	2.49
PFDA	160	113	2.67	102	4.5
PFNA	160	113	6.71	107	2.34
PFOA	160	111	7.52	112	5.7
PFHpA	160	116	4.13	108	4.46
PFHxA	160	114	6.83	115	3.41
PFPeA	320	106	4.37	108	2.47
PFBA	640	107	0.55	108	2.06
PFDS	160	112	8.89	112	3.73
PFNS	160	113	3.72	116	5.58
PFOS	160	110	3.83	122	4.02
PFHpS	160	115	6.09	102	6.91
PFHxS	160	113	5.93	113	13.15
PFPeS	160	124	4.94	119	9.49
PFBS	160	109	4.59	114	5.12
PFOSA	160	101	2.44	100	4.59
8:2FTS	640	113	6.24	103	4.97
6:2FTS	640	119	3.2	107	3.3
4:2FTS	640	121	0.7	100	2.47
NEtFOSAA	160	113	7.5	89.4	10.15
NMeFOSAA	160	111	13.35	88.0	7.42
PFDoS	160	106	5.23	108	9.31
NMeFOSA	160	102	3.68	91.5	5.59
NEtFOSA	160	100	0.73	90.5	3.33
NMeFOSE	1600	97.2	0.34	93.6	0.94
NEtFOSE	1600	96.8	0.9	93.5	1.39
HFPO-DA	160	109	2.35	112	9.66
ADONA	160	110	1.01	104	4.22
9Cl-PF3ONS	160	111	2.01	111	1.92
11Cl-PF3OUdS	160	112	3.59	111	2.78
PFPPrA	800	108	1.8	105	0.77
NFDHA	160	107	9.13	110	4.16
PFEESA	160	112	4.71	115	4.45
PFMPA	160	106	2.37	102	5.83
PFMBA	160	113	7.07	115	2.55
3:3 FTCA	160	87.1	20.57	94.8	14.52
5:3 FTCA	800	95.7	6.91	90.4	4.22
7:3 FTCA	800	92.5	2.56	88.8	2.73
FHUEA	160	99.1	3.91	95.3	2.16
FOUEA	160	102	4.2	97.2	3.5
HQ-115	160	112	2.56	111	0.78
替代物					
13C4-PFBA_Surr	320	102	1.7	96.4	2.88
13C5-PFPeA_Surr	160	108	6.03	96.4	3.36
13C5-PFHxA_Surr	80	110	3.7	101	5.35
13C4-PFHpA_Surr	80	104	6.43	105	5.99
13C8-PFOA_Surr	80	107	11.32	100	10.19

13C9-PFNA_Surr	40	98.2	13.76	92.2	17.29
13C6-PFDA_Surr	40	106	5.74	96.5	8.59
13C7-PFUnA_Surr	40	98.6	6.01	90.8	6.68
13C2-PFDoA_Surr	40	96.1	4.31	94.9	5.43
13C2-PFTreA_Surr	40	98.9	10.44	119	9.46
13C8-PFOSA_Surr	80	92.2	2.22	91.4	6.54
D3-NMeFOSAA_Surr	160	98.4	3.95	90.6	6.56
D5-NEtFOSAA_Surr	160	95.0	3.55	81.3	3.26
D3-NMeFOSA_Surr	80	89.3	12.1	82.6	8.57
D5-NEtFOSA_Surr	80	90.5	8.83	84.2	8.94
D7-NMeFOSE_Surr	800	88.8	0.49	85.4	1.68
D9-NEtFOSE_Surr	800	89.6	0.97	85.9	1.49
13C3-HFPO-DA_Surr	320	103	3.19	101	8.25
13C2-4:2FTS_Surr	160	116	3.15	96.2	6.88
13C2-6:2FTS_Surr	160	119	2.25	97.3	5.65
13C2-8:2FTS_Surr	160	104	0.73	97.4	7.53
13C8-PFOS_Surr	80	103	9.45	105	9.61
13C3-PFBS_Surr	80	121	5.06	94.0	6.33
13C3-PFHxS_Surr	80	116	9.99	108	6.65

■ 结论

本应用报告展示了使用岛津 LCMS-8060NX 液相色谱质谱仪 (LC/MS/MS) 按 ASTM D8421 方法对非饮用水中的 44 种 PFAS 和 24 种替代物进行的分析。通过优化色谱条件, 即使是最早洗脱的化合物 (如 PFPrA 和 PFBA), 也能获得出色的峰形。

岛津 LCMS-8060NX 的高度灵敏轻松超越 ASTM 方法的性能标准, 为检测实验室提供一种高度准确、可靠、可重复的废水样品中 PFAS 的分析方案。

■ 参考文献

1. ASTM Test Method D8241 Determination of Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS) in Aqueous Matrices by Co- solvation followed by Liquid Chromatography Tandem Mass Spectrometry (LC/MS/MS)
2. ASTM Standard D8272-19 -Standard Guide for Development and Optimization of D19 Chemical Analysis Methods Intended for EPA Compliance Reporting / ASTM International / West Conshohocken / PA / 2020 / 10.1520/D8272-19/ <https://www.astm.org/>
3. Lipps, W., 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), Shimadzu Whitepaper, August 2023.

UPLC-MS

ULTRA FAST MASS SPECTROMETRY



LCMS-8040



LCMS-8045



LCMS-8050



LCMS-8060NX



LCMS-2020



LCMS-2050



Q-TOFLCMS-9030/9050

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 (SSI) 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。SSI 服务网络遍布全美，共设有 10 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

岛津应用云



LabSolutions、Shim-pack 和 Shim-pack Sceptor 是岛津制作所或其附属公司在日本和 / 或其他国家 / 地区的商标。



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：2023 年 9 月