

使用高分辨率飞行时间质谱仪Xevo™ G3 QToF直接进样方法筛查饮用水中的全氟烷基和多氟烷基化合物(PFAS)

Hania Khoury-Hollins, Lisa Reid, Stuart Adams

Waters Corporation

摘要

过去几十年来，全氟烷基和多氟烷基化合物(PFAS)在工业加工和制造中的广泛使用引起了全球环境和健康问题。随着此类化合物数量的不断增加，使用传统靶向方法监测PFAS的工作变得越来越具挑战性。采用高分辨率质谱(HRMS)的筛查工作流程是监测受监管PFAS和检测非监管PFAS的理想桥梁。本研究通过直接进样10 µL样品和标准品对PFAS筛查方法进行测试。使用ACQUITY Premier UPLC与Xevo G3 QToF质谱仪的联用系统分析样品。在负电离模式下使用MS^E采集模式采集数据，并使用waters_connect™处理数据。本研究评估了Xevo G3 QToF的灵敏度和动态范围，46种化合物中有30种的检出浓度≤5 ng/L，所有化合物的动态范围覆盖三个数量级。在一份饮用水样品中检出PFHxA，浓度为5 ng/L，质量数测量精度为0.8 ppm。

优势

- 使用LC与高分辨率飞行时间质谱仪(QToF)联用系统直接进样方法的PFAS筛查工作流程
 - 在ng/L水平的低浓度PFAS分析中具有高质量精度和高灵敏度
 - 在没有可供从头鉴定的标准品的情况下，分析超出目标和管制范围的PFAS化合物
-

简介

全氟烷基和多氟烷基化合物(PFAS)是一类特殊的人造有机化合物，其中的氢原子被氟原子部分或完全取代。这种C-F键是带来重要特性的关键，例如防水和防油性能、类似表面活性剂的特性以及对化学和热降解的高度稳定性。然而，这些特性使PFAS在环境中具有高度持久性，因此被称为“永远的化学品”¹⁻³。自20世纪60年代末首次报道生物样品中存在PFAS以来，PFAS与不同疾病之间的联系已得到充分证实⁶。因此，监管机构现在将其视为主要的环境和健康问题，而目标PFAS清单也在不断扩展^{4-5、7-9}。

业界广泛应用靶向方法来定量不同基质中的PFAS¹⁰⁻¹¹。但这些方法受限于质量分辨率较低且只能检测已知化合物，因为需要通过分析标准品获取色谱保留时间、母离子和子离子质量数。受限于这些标准品的可获得性，靶向方法只能分析少量PFAS，每种分析方法只能分析约40种PFAS¹¹。目前已知的PFAS化合物数量已超过15000种，高分辨率质谱(HRMS)筛查方法具有明显优势，能够解决这一挑战，从研究样品中筛查出更多的PFAS相关化合物¹²。HRMS可以生成定性和定量数据，借助精确质量数和同位素分布等信息生成分子式，这是从头鉴定的第一步。此外，高碰撞能量扫描的碎裂特征有助于对组分进行进一步的结构表征和推断性鉴定¹³。该技术的要求和检测限极富挑战性，HRMS仪器和方法的灵敏度必须达到ng/L水平^{9,14}。

通常建议在分析前使用固相萃取(SPE)等样品前处理技术进行样品净化和浓缩。然而，SPE技术可能偏向于对SPE小柱具有高吸附亲和力的化合物。许多PFAS相关化合物受专有权保护，可能没有列在任何观察列表数据库中^{12,15}。在不使用标准品的情况下，如需全面鉴定这些化合物，可能需要核磁共振(NMR)等互补技术¹⁶。但NMR需要大量高浓度的样品，而这也是一项挑战。LC-HRMS直接进样方法是一种无偏差检查样品成分的理想方法，能够基于准确质量数测量、同位素分布、碎片离子信息和质量数亏损过滤来进行推断性鉴定^{13,17}。由于业界面临的种种挑战，因此迫切需要高灵敏度的HRMS仪器，既能用于筛查又能进行从头注释/鉴定。

在本研究中，我们将使用更新的隔离柱和PFAS方法包改良的ACQUITY Premier UPLC系统与搭载Waters™ PFAS数据库的Xevo G3 QToF联用，展示了水样中PFAS筛查的性能¹⁸。

实验

样品前处理

所有PFAS标准品均购自Wellington laboratories，使用甲醇制备浓度为10 ng/mL的储备液，其中包含表1中列出的所有化合物。使用0.1%甲酸的甲醇:水(1:1)溶液连续稀释储备液，制得浓度范围为0.5~5000 ng/L的溶液。每个浓度水平重复分析三次。

将由自来水、过滤水和MilliQ水组成的水样直接收集到样品瓶中，不进行样品前处理，每份样品进样10 μ L并重复分析三次。

化合物名称	缩写词	CAS编号	分子式	保留时间 (min)
11-氯二十氟-3-氧代十二烷-1-磺酸	11Cl-PF3OUdS	763051-92-9	C ₁₀ HClF ₂₀ O ₄ S	14.3
3:3氟调聚羧酸	3:3 FTCA	356-02-5	C ₆ H ₅ F ₇ O ₂	9.1
4:2氟调聚磺酸	4:2 FTSA	757124-72-4	C ₆ H ₅ F ₉ O ₃ S	9.7
5:3 FTA	5:3 FTCA	914637-49-3	C ₈ H ₅ F ₁₁ O ₂	11.8
1H,1H,2H,2H-全氟辛烷磺酸	6:2 FTSA	27619-97-2	C ₈ H ₅ F ₁₃ O ₃ S	11.9
3-(全氟庚基)丙酸	7:3 FTCA	812-70-4	C ₁₀ H ₅ F ₁₅ O ₂	13.5
氟调聚磺酸8:2	8:2 FTSA	39108-34-4	C ₁₀ H ₅ F ₁₇ O ₃ S	13.4
全氟(2-((6-氯己基)氧基)乙磺酸)	9Cl-PF3ONS	756426-58-1	C ₈ HClF ₁₆ O ₄ S	13.1
4,8-二氧杂-3H-全氟壬酸	ADONA	919005-14-4	C ₇ H ₂ F ₁₂ O ₄	11.1
全氟丁烷磺酰胺	FBSA	30334-69-1	C ₄ H ₂ F ₉ NO ₂ S	10.6
全氟己烷磺酰胺	FHxSA	41997-13-1	C ₆ H ₂ F ₁₃ NO ₂ S	12.6
全氟辛烷磺酰胺	FOSA	754-91-6	C ₈ H ₂ F ₁₇ NO ₂ S	14.1
全氟(2-丙氧基丙酸酯)	GEN-X	122499-17-6	C ₅ HF ₁₁ O	10.3
全氟-2,5-二甲基-3,6-二氧杂壬酸	HFPO-TA	13252-14-7	C ₉ HF ₁₇ O ₄	13.1
N-乙基全氟辛烷-1-磺酰胺	N-EtFOSA	4151-50-2	C ₁₀ H ₆ F ₁₇ NO ₂ S	15.2
N-乙基全氟辛烷磺酰氨基乙酰胺	N-EtFOSAA	2991-50-6	C ₁₂ H ₆ F ₁₇ NO ₄ S	14.1
全氟-3,6-二氧杂庚酸	NFDHA	151772-58-6	C ₅ HF ₉ O ₄	9.6
N-甲基全氟辛烷磺酰胺	N-MeFOSA	31506-32-8	C ₁₁ H ₆ F ₁₇ NO ₄ S	15.0
N-甲基全氟戊烷磺酰氨基乙酰胺	N-MeFOSAA	2355-31-9	C ₁₁ H ₆ F ₁₇ NO ₄ S	13.8
七氟丁酸	PFBA	375-22-4	C ₄ HF ₇ O ₂	4.9
全氟丁烷磺酸	PFBS	375-73-5	C ₄ HF ₉ O ₃ S	8.6
全氟癸酸	PFDA	335-76-2	C ₁₀ HF ₁₉ O ₂	13.4
三氟代十二烷酸	PFDoA	307-55-1	C ₁₂ HF ₂₃ O ₂	14.6
全氟十二烷磺酸	PFDoDS	79780-39-5	C ₁₂ HF ₂₅ O ₃ S	15.2
全氟癸烷磺酸	PFDS	335-77-3	C ₁₀ HF ₂₁ O ₃ S	14.1
全氟-4-乙基环己烷	PFecHS	67584-42-3	C ₈ F ₁₅ KO ₃ S	11.8
全氟(2-乙氧基乙烷)磺酸	PFEESA	113507-82-7	C ₄ HF ₉ O ₄ S	9.2
全氟庚酸	PFHpA	375-85-9	C ₇ HF ₁₃ O ₂	11.0
全氟庚烷磺酸	PFHpS	375-92-8	C ₇ HF ₁₅ O ₃ S	11.9
全氟己酸	PFHxA	307-24-4	C ₇ HF ₁₁ O ₂	9.8
全氟十六烷酸	PFHxDA	67905-19-5	C ₁₆ HF ₃₁ O ₂	15.7
全氟己烷磺酸	PFHxS	355-46-4	C ₆ HF ₁₃ O ₃ S	11.0
全氟-4-甲氧基丁酸	PFMBA	863090-89-5	C ₅ HF ₉ O ₃	8.7
全氟-3-甲氧基丙酸	PFMPA	377-73-1	C ₄ HF ₇ O ₃	6.3
全氟壬酸	PFNA	375-95-1	C ₉ HF ₁₇ O ₂	12.7
全氟壬基磺酸	PFNS	68259-12-1	C ₉ HF ₁₉ O ₃ S	13.4
全氟辛酸	PFOA	335-67-1	C ₈ HF ₁₅ O ₂	11.9
全氟十八烷酸	PFODA	16517-11-6	C ₁₈ HF ₃₅ O ₂	15.9
全氟辛烷磺酸	PFOS	1763-23-1	C ₈ HF ₁₇ O ₃ S	12.7
全氟戊酸	PFPeA	2706-90-3	C ₅ HF ₉ O ₂	8.0
全氟戊烷磺酸	PFPeS	2706-91-4	C ₅ HF ₁₁ O ₃ S	10.0
全氟十四烷酸	PFTeDA	376-06-7	C ₁₄ HF ₂₇ O ₂	15.4
全氟十三烷酸	PFTriDA	72629-94-8	C ₁₃ HF ₂₅ O ₂	15.1
全氟十三烷磺酸	PFTriDS	791563-89-8	C ₁₃ HF ₂₇ O ₃ S	15.4
全氟十一烷酸	PFUnDA	2058-94-8	C ₁₁ HF ₂₁ O ₂	14.1
全氟十一烷磺酸	PFUnDS	749786-16-1	C ₁₁ HF ₂₃ O ₃ S	14.6

表1.混合物中的PFAS标准品及其保留时间(min)列表

LC-MS条件

液相色谱系统:	使用PFAS方法包（部件号：205000588和205000589）改良的ACQUITY Premier液相色谱系统
样品瓶:	聚丙烯自动进样器样品瓶（P/N：186005219），带预开口隔垫盖（P/N：186000305）
分析柱:	ACQUITY Premier BEH™ C ₁₈ , 1.7 μm, 2.1 x 100 mm, 90 Å Column（P/N：186009453）
隔离柱:	Atlantis™ Premier BEH C ₁₈ AX隔离柱, 2.1 x 50 mm, 5 μm（P/N：186009452）
柱温:	35 °C
样品温度:	6 °C
进样体积:	10 μL
流速:	0.3 mL/min
流动相A:	95:5水:甲醇（含2 mM醋酸铵）
流动相B:	100%甲醇（含2 mM醋酸铵）

液相色谱梯度表

时间 (min)	流速 (mL/min)	%A	%B	曲线
0	0.3	100	0	初始
1	0.3	80	20	6
6	0.3	55	45	6
13	0.3	20	80	6
14	0.3	5	95	6
17	0.3	5	95	6
18	0.3	100	0	1
22	0.3	100	0	1

质谱条件

质谱系统:	Xevo G3 QTof
电离模式:	ESI-
质量范围:	m/z 50-1200
采集速率:	每秒4幅谱图(4 Hz)
实时校正标准液:	亮氨酸脑啡肽(m/z 554.2620)
采集模式:	MS ^E , 一种数据非依赖型采集方法
离子源条件:	
毛细管电压:	0.5 kV
锥孔电压:	10 V
离子源温度:	100°C

脱溶剂气温度:	250°C
锥孔气流速:	100 L/h
脱溶剂气流速:	600 L/h
离子源补偿:	30 V
碰撞能量	
低碰撞能量:	4 V
高碰撞能量:	梯度20~70 V
传输调谐设置:	
StepWave RF:	100 V
梯度主体:	5 V

软件工具

使用waters_connect采集数据，并在UNIFI™应用程序中进行数据分析。

结果与讨论

筛查工作流程 — 鉴定和仪器质量精度

在MS^E采集模式下，对含有46种PFAS（浓度为2000 ng/L）的标准品溶液进行LC-HRMS分析，然后使用UNIFI应用程序筛查工作流程处理采集到的数据。该工作流程包括质量数亏损过滤步骤，用于区分PFAS相关组分。比对沃特世生成的PFAS数据库筛选生成的组分列表¹⁸。基于精确质量数和碎裂鉴定组分，接受质量数测量精度≤3 ppm的推断性鉴定。图1展示了2000 ng/L混标中46种已鉴定PFAS的提取离子流色谱图(XIC)。

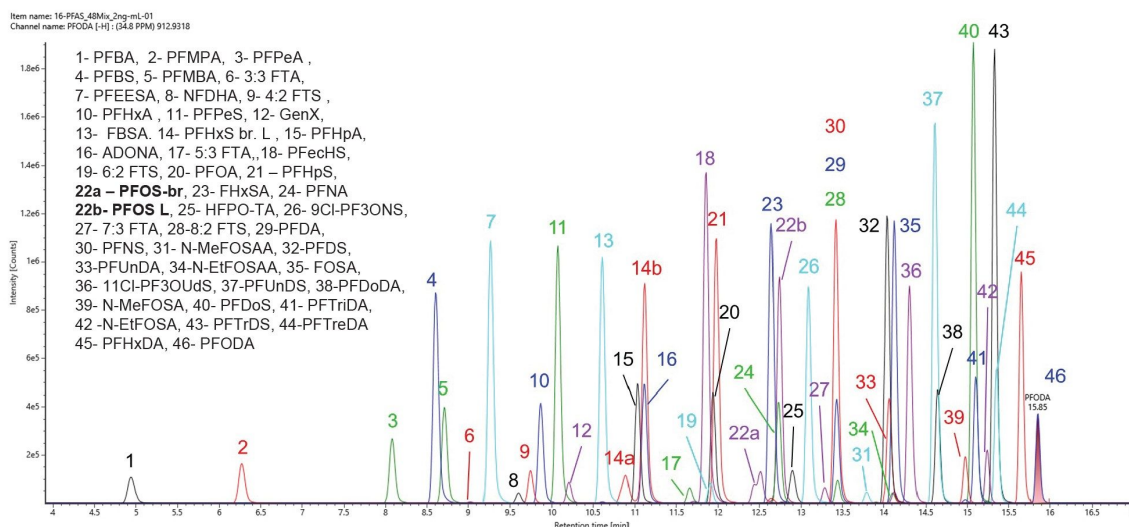


图1.在用含0.1%甲酸的甲醇:水(1:1)制得的2000 ng/L溶液中鉴定的46种PFAS标准品的提取离子流色谱图(XIC)。该色谱方法能够分离直链和支链化合物。图中比例仅指示了可见异构体（例如支链和直链PFOS，分别为化合物22a和22b）。

图1展示了在2000 ng/L混标中鉴定的不同类别PFAS的洗脱顺序，质量数测量精度 ≤ 3 ppm。如Adams等人(2023)所述，PFAS LC方法包 (P/N: 205000588 <<https://www.waters.com/nextgen/global/shop/service-parts--kits/205000588-kit-analysis-perfluorinated-compounds.html>> 和205000589 <<https://www.waters.com/nextgen/global/shop/service-parts--kits/205000589-acquity-alliance-bottle-accessory-kit.html>>) 对于区分样品成分中的任何残留实验室污染物至关重要¹⁰。使用的色谱方法能够分离直链和支链PFAS分析物，例如，支链PFOS (PFOS-br)的洗脱时间早于直链PFOS (PFOS-L) (图1，峰编号分别为22a和22b)。例如N-甲基全氟辛烷磺酰氨基乙酸(N-MeFOSAA)和N-乙基全氟辛烷磺酰氨基乙酸(N-EtFOSAA)的直链/支链异构体均可使用该色谱方法成功分离和区分。图2A展示了N-MeFOSAA (直链和支链) 的提取离子流色谱图(XIC)，图2B展示了在低碰撞能量和高碰撞能量下2000 ng/L混标中直链N-MeFOSAA的质谱图 (分别为图2B的上图和下图)。

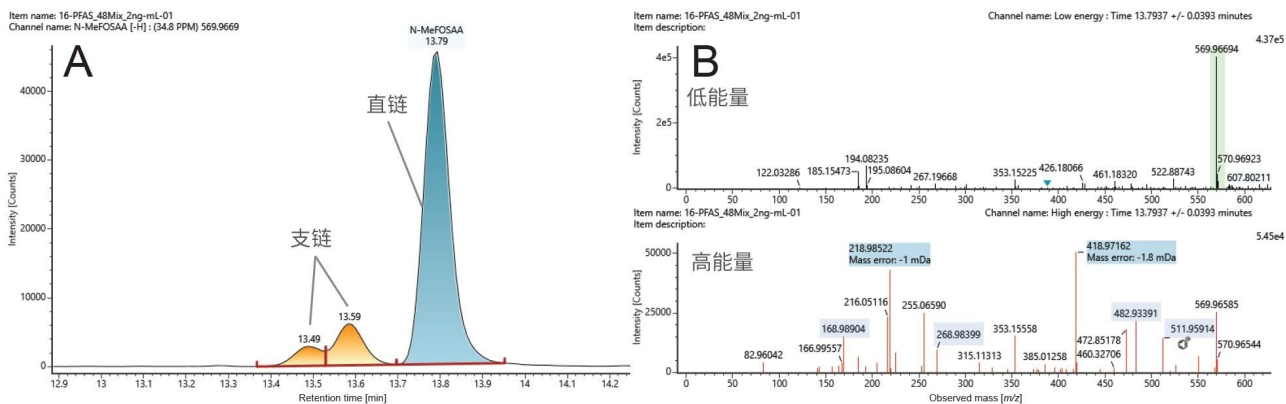


图2.在2000 ng/L混标中鉴定的N-甲基全氟辛烷磺酰氨基乙酸(N-MeFOSAA)，质量精度：-0.7 ppm。A：N-MeFOSAA（直链和支链）的提取离子流色谱图(XIC)；B：低碰撞能量和高碰撞能量下直链N-MeFOSAA的质谱图（分别为上图和下图）。

图2A中的XIC显示一个主峰在13.8 min处洗脱，两个次峰在13.5 min和13.6 min处洗脱（图2B）。图2B所示的谱图对应低碰撞能量和高碰撞能量下13.8 min处洗脱主峰的谱图（分别为上图和下图）。低碰撞能量谱图展示了 m/z 569.96694处的主要离子，鉴定为N-MeFOSSA，质量数测量精度为-0.7 ppm。高能量谱图展示了13.8 min处洗脱基峰生成的不同碎片离子，其中有6个碎片离子对应于直链N-MeFOSAA的不同断键（图3），这6个碎片离子中有2个未在13.49 min或13.6 min处检出，表明这两种离子对应于N-MeFOSAA支链异构体。 m/z 218.98525和 m/z 268.98256处的这些特有碎片离子对应于 $[C_4F_9]^-$ 和 $[C_5F_{11}]^-$ （图3，以蓝色突出显示）。

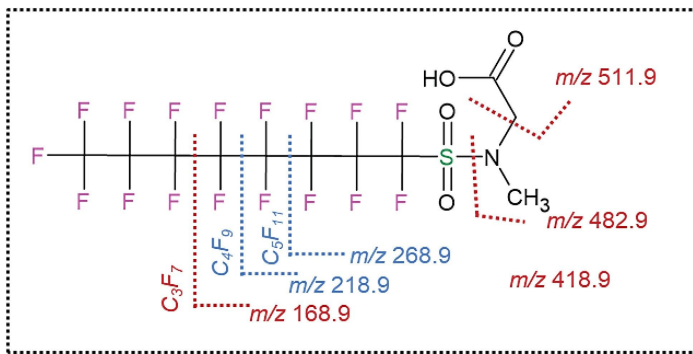


图3.直链*N*-MeFOSAA的结构及建议的碎裂路径。直链异构体特有的碎片离子用蓝色表示，直链和支链异构体共有的碎片离子用红色表示。

线性、灵敏度和动态范围

使用配备不含PFAS浸出物的组件（例如PFAS LC方法包）的LC对于减少任何残留的实验室污染至关重要，能够确保鉴定出的任何PFAS物质均是来自样品成分¹¹。由于PFAS以低浓度存在于复杂基质中，因此本研究评估了Xevo G3 QTof的灵敏度和动态范围。连续稀释46种PFAS的混标，制得浓度范围为0.5 ng/L-5000 ng/L的溶液。将这些标准品重复分析三次，并使用waters_connect中的UNIFI应用程序处理数据。数据评估采用筛查和定量方法。将低能量扫描得到的每种鉴定出的分析物的响应值及其相应的浓度作图，获得标准曲线，并采用1/X加权进行线性回归拟合。

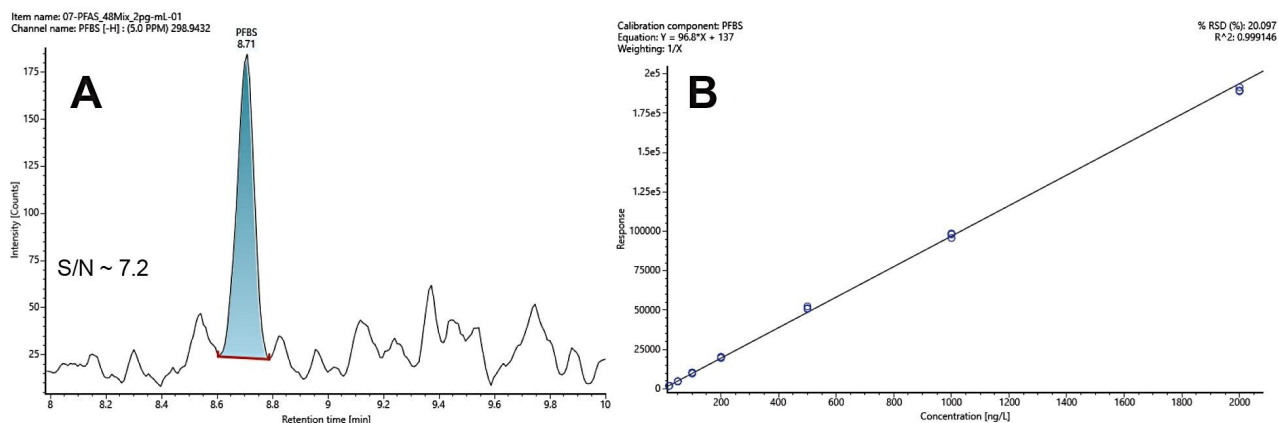


图4.A: 2 ng/L全氟丁烷磺酸(PFBS)的提取离子流色谱图。PFBS鉴定结果为 m/z 298.9432, 质量数测量精度为 ± 0.7 ppm, 信噪比为7.2。信噪比的计算采用峰到峰方法。B: 低碰撞能量下离子响应的标准曲线。线性回归拟合采用 $1/X$ 加权, 确定系数 $R^2=0.99915$ 。2 ng/L~2000 ng/L范围内的PFBS响应呈线性。

图4A展示了2 ng/L全氟丁烷磺酸(PFBS)的XIC, 信噪比(S/N)为7.2, 使用峰到峰方法计算。在 m/z 298.9432处检出并鉴定了PFBS, 质量数测量精度为 ± 0.7 ppm。PFBS的响应在2~2000 ng/L的浓度范围内呈线性, 确定系数(R^2)为0.99915 (图4B)。需要注意的是, 该方法的动态范围涵盖三个数量级, 可以使用标准品(如有)定量PFAS分析物。此分析的柱上进样量为10 μ L, PFBS的检测限为2 ng/L或柱上进样0.02 pg (2 ppt), 信噪比 >7.2 。本研究考察了所有46种化合物的线性和灵敏度, 其中30种化合物的LLOD ≤ 5 ng/L。表2汇总了所研究各化合物的检测下限(LLOD)、定量上限(HLOQ)、信噪比(S/N)和 R^2 。

缩写词	CAS ID	LLOD (ng/L)	HLOQ (ng/L)	S/N	R ²
11Cl-PF3OUdS	763051-92-9	5.0	2000	6.0	0.9982
3:3 FTCA	356-02-5	100.0	5000	4.2	0.9974
4:2 FTSA	757124-72-4	10.0	5000	6.8	0.9989
5:3 FTCA	914637-49-3	20.0	5000	3.1	0.9920
6:2 FTSA	27619-97-2	50.0	5000	8.4	0.9970
7:3 FTCA	812-70-4	10.0	2000	3.2	0.9904
8:2 FTSA	39108-34-4	10.0	5000	3.2	0.9973
9Cl-PF3ONS	756426-58-1	10.0	2000	5.5	0.9975
ADONA	919005-14-4	2.0	2000	6.8	0.9990
FBSA	30334-69-1	1.0	2000	5.3	0.9987
FHxSA	41997-13-1	2.0	2000	94.5	0.9987
FOSA	754-91-6	1.0	2000	4.0	0.9991
GEN-X (-CO ₂)	122499-17-6	20.0	5000	4.3	0.9980
HFPO-TA	13252-14-7	20.0	2000	5.8	0.9951
N-EtFOSA	4151-50-2	5.0	5000	7.0	0.9971
N-EtFOSAA	2991-50-6	50.0	5000	5.0	0.9930
NFDHA	151772-58-6	20.0	5000	3.1	0.9980
N-MeFOSA	31506-32-8	10.0	5000	5.4	0.9963
N-MeFOSAA	2355-31-9	50	5000	10.2	0.9888
PFBA	375-22-4	5.0	5000	8.6	0.9974
PFBS	375-73-5	1.0	2000	3.4	0.9991
PFDA	335-76-2	5.0	2000	5.0	0.9989
PFDoA	307-55-1	5.0	5000	7.3	0.9968
PFDoDS	79780-39-5	0.5	2000	3.4	0.9987
PFDS	335-77-3	5.0	2000	10.9	0.9987
PFecHS	67584-42-3	2.0	2000	3.3	0.9990
PFEESA	113507-82-7	1.0	2000	3.5	0.9992
PFHpA	375-85-9	5.0	2000	11.0	0.9989
PFHpS	375-92-8	5.0	2000	10.2	0.9976
PFHxA	307-24-4	2.0	2000	3.6	0.9995
PFHxDA	67905-19-5	5.0	5000	7.1	0.9719
PFHxS	355-46-4	5.0	2000	7.7	0.9989
PFMBA	863090-89-5	2.0	2000	3.7	0.9995
PFMPA	377-73-1	100.0	2000	20.6	0.9944
PFNA	375-95-1	5.0	2000	6.5	0.9988
PFNS	68259-12-1	5.0	2000	12.6	0.9992
PFOA	335-67-1	2.0	2000	3.0	0.9982
PFODA	16517-11-6	50.0	2000	4.4	0.9518
PFOS L	1763-23-1	5.0	2000	11.02	0.9993
PFPeA	2706-90-3	10.0	2000	3.47	0.9992
PFPeS	2706-91-4	1.0	2000	3.1	0.9987
PFTeDA	376-06-7	5.0	2000	7.4	0.9987
PFTrDA	72629-94-8	5.0	2000	10.3	0.9917
PFTriDS	791563-89-8	1.0	2000	5.2	0.9963
PFUnDA	2058-94-8	2.0	2000	3.98	0.9990
PFUnDS	749786-16-1	2.0	2000	3.3	0.9989

表2.46种标准品的检测结果汇总，包括检测下限(LLOD)、定量限上限(HLOQ)、使用峰

到峰方法计算的信噪比，以及 R^2 。

这些结果表明，Xevo G3 QToF具有出色的灵敏度，30种化合物的检测限 ≤ 5 ng/L（柱上进样量0.05 pg），其中PFBS、FBSA、FOSA和PFEEESA的LOD为1 ng/L（柱上进样量0.01 pg），PFHxA和ADONA的LOD为2 ng/L（柱上进样量0.02 pg）。有些数值低于监管机构要求的方法检测限(MDL)，因此需要进行样品前处理和样品浓缩¹⁴。46种化合物中有4种化合物的LLOD为50 ng/L，2种化合物的LLOD为100 ng/L。值得注意的是，本研究使用的分析方法适用于不稳定的化合物，如果需要靶向分析，可以通过修改某些离子源参数来改善检测限¹⁹。PFAS物质的线性在三个数量级范围内得到验证，校准曲线上至少有六个点，且三次重复进样的% RSD小于10%。所有46种化合物均显示出线性响应，且定量曲线的 R^2 值 >0.99 。

水样中PFAS的检测和定量

采用该筛查方法直接分析自来水、经过滤的饮用水和MilliQ水，这些水从源头直接收集到分析样品瓶，未经样品前处理或净化步骤。筛查的46种PFAS化合物中，在自来水样品中初步鉴定出PFHxA。PFHxA鉴定的质量数测量精度为-0.3 ppm，定量的浓度水平为5 ng/L，PFHxA的检测下限确定为2 ng/L（图5）。

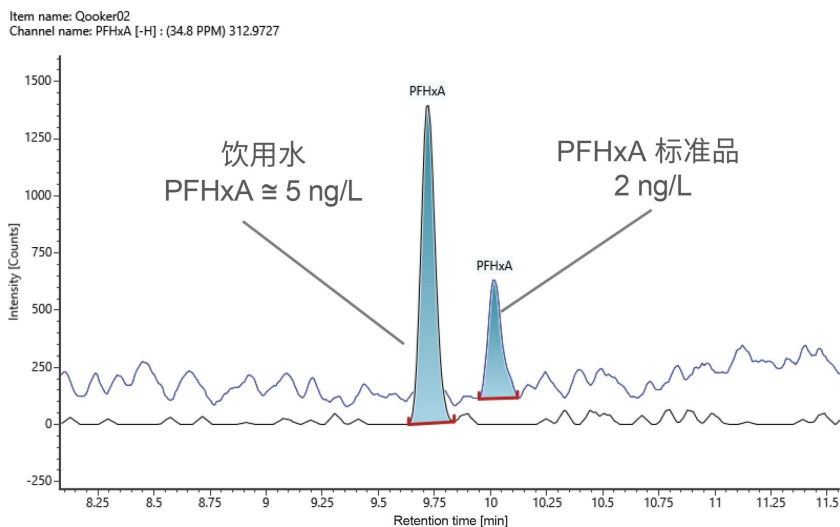


图5.浓度分别为2 ng/L和5 ng/L的标准溶液和饮用水样品中PFHxA的提取离子流色谱图叠加图。在饮用水中鉴定出PFHxA，质量数测量精度为-0.3 ppm。

结论

PFAS筛查工作流程使用waters_connect中的UNIFI应用程序结合Xevo G3 QToF的灵敏度进行了简化，用于定量分析水样中的PFAS。UNIFI筛查和发现工作流程可提供丰富的选项，包括从质量数亏损过滤到在线数据库和谱库搜索。生成的数据集将用于靶向定量方法，并且可以针对使用不同数据库来源的鉴定和发现工作流程进行回顾性挖掘。Xevo G3 QToF仪器的高灵敏度有助于突破使用SPE进行样品前处理的局限性，以及使用传统靶向方法鉴定时对市售标准品的需求。要提高灵敏度，还可以选择增加进样体积。

参考资料

1. Giesy J P and Kannan K Global Distribution of Perfluorooctane Sulfonate in Wildlife. *Environ.Sci.Technol.* 35: 1339–1342, 2001.
2. Pan C G, Liu Y S, Ying G G. Perfluoroalkyl Substances (PFASs) in Waste Water Treatment Plants and Drinking Water Treatment Plants: Removal Efficiency and Exposure Risk. *Water Res.* 106, 562–570, 2016.
3. Podder A, Sadmani A H M A, Reinhart D, Chang N B, Goel R. Per and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS) as a Contaminant of Emerging Concern in Surface Water: A Transboundary Review of their Occurrences and Toxicity Effects. *J. Hazard.Mater.* 419: 126361, 2021.
4. Travis D R. Evidence that There are Two Forms of Fluoride in Human Serum. *Nature* 27: 1050–1051, 1968.
5. Hansen K J, Clemen L A. Ellefson M E., Johnson H O. Compound-specific Quantitative Characterisation of Organic Fluorochemicals in Biological Matrices. *Environ.Sci.Technol.* 35, 766–770, 2001.
6. Dickman R A. and Aga D S. A Review of Recent Studies on Toxicity, Sequestration, and Degradation of Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS) *J. Hazard.Mater.* 436: 129120, 2022 and references within.
7. European Union Reference Laboratory for Halogenated POPs in Feed and Food. Guidance Document on Analytical Parameters for the Determination of Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS) in

Food and Feed. Version 1.2. May 2022.

8. Stockholm Convention on Persistent Organic Pollutants (POPs), 2019, Accessed, September 2021. <http://chm.pops.int/TheConvention/Overview/TextoftheConvention/tabid/2232/Default.aspx> < <http://chm.pops.int/TheConvention/Overview/TextoftheConvention/tabid/2232/Default.aspx>> .
9. United States Environmental Protection Agency. Analysis of Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS) in Aqueous, Solid, Biosolids, and Tissue Samples by LC-MS/MS. 4th Draft method 1633, July 2023.
10. Adams S, Dreolin N, Organtini K L, Hancock P. 以鱼类参比样品作为案例研究, 使用高灵敏度LC-MS/MS方法分析动物产品中的全氟烷基和多氟烷基化合物(PFAS). 沃特世应用纪要. 720008108ZH, 2023.
11. Organtini K, Rosnack K, Hancock P. 根据EPA 1633分析全氟烷基和多氟烷基化合物(PFAS) 第1部分: 建立和评估方法. 沃特世应用纪要. 720008117ZH, 2023.
12. U.S. Environmental Protection Agency. CompTox Chemicals Dashboard. <https://comptox.epa.gov/dashboard/chemical-lists/pfasmaster> < <https://comptox.epa.gov/dashboard/chemical-lists/pfasmaster>> accessed November 2023.
13. Charbonnet J A, McDonough C A, Xiao F, Schwichtenberg T, Cao D, Kaserzon S, Thomas K V, Dewapriya P, Place B J, Schymanski E L, Field J A, Helbling D E, Higgins C P. Communicating Confidence of Per- and Polyfluoroalkyl Substance Identification via High-Resolution Mass Spectrometry. *Environ. Sci. Technol. Lett.* 9: 473–481, 2022.
14. United States Environmental Protection Agency. Method 533. Determination of Per and Polyfluoroalkyl Substances in Drinking Water by Isotope Dilution Anion Exchange Solid Phase Extraction and Liquid Chromatography/Tandem Mass Spectrometry. November 2019.
15. Suspect List of Possible Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS). NIST Public Data Repository. <https://data.nist.gov/od/id/mds2-2387> <<https://data.nist.gov/od/id/mds2-2387>> accessed November 2023.
16. Camdzic D, Dickman R A, Joyce A S, Wallace J S, Ferguson P L, Aga D S. Quantitation of Total PFAS Including Trifluoroacetic Acid with Fluorine Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy. *Anal. Chem.* 95: 5484–5488, 2023.

17. Schymanski E L, Singer H P, Slobodnik J, Ipolyi I M, Oswald P, Krauss M, Schulze T, Haglund P, Letzel T, Grosse S, Thomaidis N S, Bletsou A, Zwiener C, Ibáñez M, Portolés T, de Boer R, Reid M J, Onghena M, Kunkel U, Schulz W, Guillon A, Noyon N, Leroy G, Bados P, Bogialli S, Stipanich D, Rostkowski P, Hollender J. Non-target Screening with High-Resolution Mass Spectrometry: Critical Review Using a Collaborative Trial on Water Analysis. *Anal. Bioanal. Chem.* 407:6237–6255, 2015.
18. Towhig M, Fujimoto G, Mohan A, Organtini K L, Rosnack S and Hird S. 环境样品中全氟烷基和多氟烷基化合物(PFAS)的非靶向分析方法. 沃特世应用纪要. 720007184ZH, 2021.
19. Khoury-Hollins, H, Riba I, Kirk J. 使用Xevo™ G3 QToF质谱仪优化不稳定和稳定的全氟烷基或多氟烷基化合物(PFAS)混合物的离子源和传输参数. 沃特世应用纪要. 720008118ZH, 2024.

特色产品

ACQUITY Premier系统 <<https://www.waters.com/waters/nav.htm?cid=135077739>>

Xevo G3 QToF <<https://www.waters.com/nextgen/global/products/mass-spectrometry-systems/xevo-g3-qtof.html>>

UNIFI科学信息系统 <<https://www.waters.com/134801648>>

waters_connect软件解决方案 <<https://www.waters.com/waters/nav.htm?cid=135040165>>

720008198ZH, 2024年1月



© 2024 Waters Corporation. All Rights Reserved.

[使用条款](#) [隐私策略](#) [商标](#) [招聘](#) [法律和隐私声明](#) [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