

使用TOP测定法和ACQUITY™ QDa™ II质谱检测器对地表水中的PFAS进行常规检测

Henry Foddy, Cristian Cojocariu, Vladimir Nikiforov

Waters Corporation, NILU

摘要

全氟烷基和多氟烷基化合物(PFAS)因具有毒性并且容易在生物体内蓄积,日益成为一个主要的环境和公共卫生问题。数十年来,PFAS在全球广泛使用,使这些化合物成为普遍且持久的环境污染物。传统检测方法通常难以全面揭露PFAS的污染情况;总可氧化前体(TOP)测定法通过监测样品氧化前后的全氟烷基羧酸(PFCA)浓度,可以评估给定样品中全氟烷基酸(PFAA)前体的含量。研究团队在英格兰西北部多家废水处理厂下游采集了八个地表(河流)水样品,并使用ACQUITY QDa II质谱检测器进行分析。分析结果表明,所有地表水样品中的PFCA总含量均显著增加,证明该技术可用于支持和补充现有PFAS检测方法。

优势

- TOP测定法通过单一方法即可评估全氟烷基酸(PFAA)及其前体的总体负荷,为地表水样品分析提供一种补充检测手段
- 此分析采用ACQUITY QDa II质谱检测器,通过LC-MS和标准质量信息实现经济、便捷、可靠的样品初筛,为更复杂的传统检测方法提供支持与补充

简介

全氟烷基和多氟烷基化合物(PFAS)是某些有机氟环境污染物的统称，是一组合成化学品，数十年来广泛应用于各种工业应用和消费品中。由于PFAS的持久性和抗降解特性，以及具有潜在毒性和生物蓄积性，因此作为日益严重的环境和健康问题而备受关注¹。

河流、地下水和饮用水源的PFAS污染在全球已屡见不鲜，人们担心此类污染的严重程度仍有待发掘。在英国，由于近期废水和污水渗入河流等水体的事件频发，进一步加剧了这一担忧；这种未经处理或处理不充分的废水排入河流的情况可能会加剧整个重要生态系统和食物链的营养转移和持久性污染问题²。PFAS的固有特性，例如高持久性、强吸附性以及远距离迁移和沉积能力，都会加剧和传播对生态系统的潜在危害³。PFAS对传统环境修复技术的抗性导致相关的影响治理工作极具挑战性，亟需开发新技术并实施严格监管措施，以保护生态系统和公共健康。

大众对PFAS污染的日益关注给环境检测和监管框架带来沉重负担，因为传统检测方法通常难以全面揭露PFAS的污染情况。这些方法主要检测全氟烷基酸(PFAA)，有时会忽略可降解为这些持久性物质的潜在前体化合物。此类分析方法的挑战之一在于：超过12,000种非PFAA的PFAS化合物缺乏确证标准品⁴。

而总可氧化前体(TOP)测定法弥补了这一方面的空白。该方法通过氧化未知PFAA前体和中间体的非氟化部分，将其转化为稳定的PFAA化合物，从而更全面地揭示环境样品中PFAA的总负荷⁵。

本研究结合ACQUITY QDa II质谱检测器与TOP测定法，展示了一种经济高效的分析方法，可减轻传统检测方法（通常更复杂且耗费大量资源）的负担。该方法可与传统方法相辅相成，提供更多有关样品中PFAS总含量的信息，从而对潜在污染的环境样品进行更有效的初筛。

本研究中，研究团队在英格兰西北部多家废水处理厂(WWTP)下游采集了若干地表（河流）水样品，重点关注污水排放及溢流频发区域，采样区域见图1。

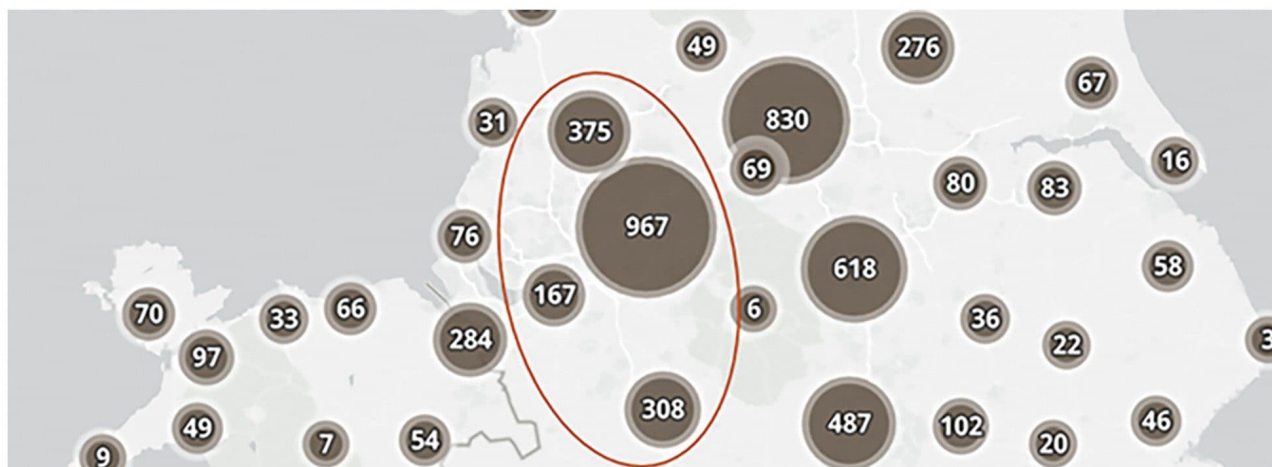


图1.一幅标注了2023年英格兰与威尔士地区污水排放网的地图，显示了经过处理的污水排放情况，以及未经处理的污水和暴雨径流对河流的溢流情况。资料来源：The Rivers Trust (<https://theriverstrust.org/sewage-map>)。图中以红色标示了采集河流水样的大致收集范围半径。

实验

采集地表水

2024年6月，研究团队在英格兰西北部的多条河流中采集了地表（河流）水样品。采样点位于污水处理厂(WWTP)下游，尤其关注近期报告存在污水排放或溢流的区域。每个采样点使用预先经LC-MS级甲醇冲洗3次、Milli-Q水冲洗1次的HDPE容器采集约2升水样。样品运回实验室后经过滤处理，并在室温条件下储存直至分析（分析工作在采样后60天内完成）。

为监测储存过程可能产生的污染，研究团队同步采集了2升Milli-Q水作为空白样品与地表水样品一起储存。利用该试剂水样品配制50 ng/L加标试剂水样品，与地表水样品同步开展评估工作。

总可氧化前体测定

TOP测定采用与Houtz和Sedlak⁵所述类似的方法进行，具体步骤详见图2。对照样品和改良样品均重复分析三次。通过氧化程序采集的样品在文中均称作“改良”样品。

整个分析过程均遵循实验室控制PFAS污染的最佳实践([720007905 <https://www.waters.com/nextgen/global/library/library-details.html?documentid=720007905EN&t=720007905en>](https://www.waters.com/nextgen/global/library/library-details.html?documentid=720007905EN&t=720007905en))。所有125 mL HDPE瓶临用前均用LC-MS级甲醇彻底清洗3次，用Milli-Q水清洗1次。待干燥后贴标并按实验要求加标。向标记地表（河流）水样品的储液瓶中加入浓度相当于50 ng/L的ADONA溶液，向试剂水样品中加入含相同浓度ADONA的PFAS混标。随后将储液瓶置于样品烘箱中干燥约20分钟以挥干有机溶剂。

从样品烘箱中取出后，将所有储液瓶在氮气流下静置，以驱散瓶内可能残留的挥发性物质。ADONA是一种可在TOP测定程序中可靠氧化的化合物，因此被用作工艺效率的指示剂。值得注意的是，ADONA通常不存在于天然地表水样品中，且其氧化产物不会干扰分析。

在进行SPE之前，向所有样品中添加内标(IS)混合物以评估萃取程序的有效性。IS混合物的加标浓度为50 ng/L。同时设置了一份不含IS混合物的程序空白样品。萃取前先样品超声处理5分钟。本研究所用分析标准品均购自Wellington Laboratories。

固相萃取

使用Oasis WAX/GCB小柱（200 mg WAX，50 mg GCB，WAX粒径60 µm）([186011111 <https://www.waters.com/nextgen/global/shop/sample-preparation--filtration/186011111-oasis-wax-gcb-for-pfas-analysis-6cc-vac-cartridge-200-mg-wax-50-.html>](https://www.waters.com/nextgen/global/shop/sample-preparation--filtration/186011111-oasis-wax-gcb-for-pfas-analysis-6cc-vac-cartridge-200-mg-wax-50-.html))进行固相萃取(SPE)，具体操作步骤参见快速入门指南([720008199 <https://help.waters.com/help/global/support/library-details.html?documentid=720008199>](https://help.waters.com/help/global/support/library-details.html?documentid=720008199))，此外，干燥步骤见图2。

仪器

将ACQUITY QDa II质谱检测器与装配BSM和FTN以及PFAS方法包([176004549 <https://www.waters.com/nextgen/global/shop/application-kits/176004549-pfas-solution-installation-kit--with-oasis-500mg-kit-2.html>](https://www.waters.com/nextgen/global/shop/application-kits/176004549-pfas-solution-installation-kit--with-oasis-500mg-kit-2.html))的ACQUITY Premier LC系统联用进行样品评估。该方法包内含一根隔离柱，有助于延迟任何可能与分析峰共洗脱的残留背景干扰。分辨率调谐和校正在仪器启动过程中自动完成，无需分析人员干预。该方法采用ACQUITY Premier CSH™ C₁₈色谱柱，运行时间22分钟，使PFAS化合物实现良好分离。

LC-MS实验条件

液相色谱系统：

ACQUITY Premier BSM，流通针式(FTN)

检测:	ACQUITY QDa II质谱检测器
色谱柱:	ACQUITY Premier CSH C ₁₈ 色谱柱 1.7 μm, 2.1 x 100 mm (P/N: 186009461)
柱温:	50 °C
样品温度:	10 °C
进样体积:	10 μL
流速:	0.3 mL/min
运行时间:	22 min
流动相A:	2 mM醋酸铵水溶液
流动相B:	2 mM醋酸铵的甲醇溶液
样品瓶:	700 μL聚丙烯螺口带盖瓶 (P/N: 186005221)
电离模式:	负离子电喷雾(ES-)
毛细管电压:	0.55 kV
脱溶剂气温度:	350 °C
离子源温度:	120 °C
采集模式:	选择离子监测(SIR)

液相色谱梯度

时间 (min)	流速 (mL/min)	%A	%B	曲线
初始	0.3	95	5	6
1	0.3	75	25	6
6	0.3	50	50	6
13	0.3	15	85	6
14	0.3	5	95	6
17	0.3	5	95	6
18	0.3	95	5	6
22	0.3	95	5	6

软件

数据采集、处理和报告：

MassLynx™ 4.2版

结果与讨论

PFCA作为PFAS前体主要氧化产物的定量分析

全氟烷基羧酸(PFCA)是一类含有羧酸官能团和完全氟化的碳链的PFAS化合物。在TOP测定法中，PFCA作为PFAS前体的主要氧化产物进行监测。

通过评估氧化后总PFCA浓度的相对增幅，可估算给定样品中可氧化PFAS前体的总负荷，从而更全面地评估污染水平。本分析中监测的PFCA化合物包括PFBA、PFPeA、PFHpA、PFHxA、PFOA和PFNA。

在加标50 ng/L的改良试剂水重复样中，PFBA、PFHxA和PFOA的报告浓度与对照样品相比显著增加(%)，增幅分别为65%、67%和106%。相反，所有改良重复样中均未检出ADONA，表明在工作流程中实现了完全氧化。50 ng/L加标试剂水样品的对照重复样和改良重复样的色谱图比较如图3所示。

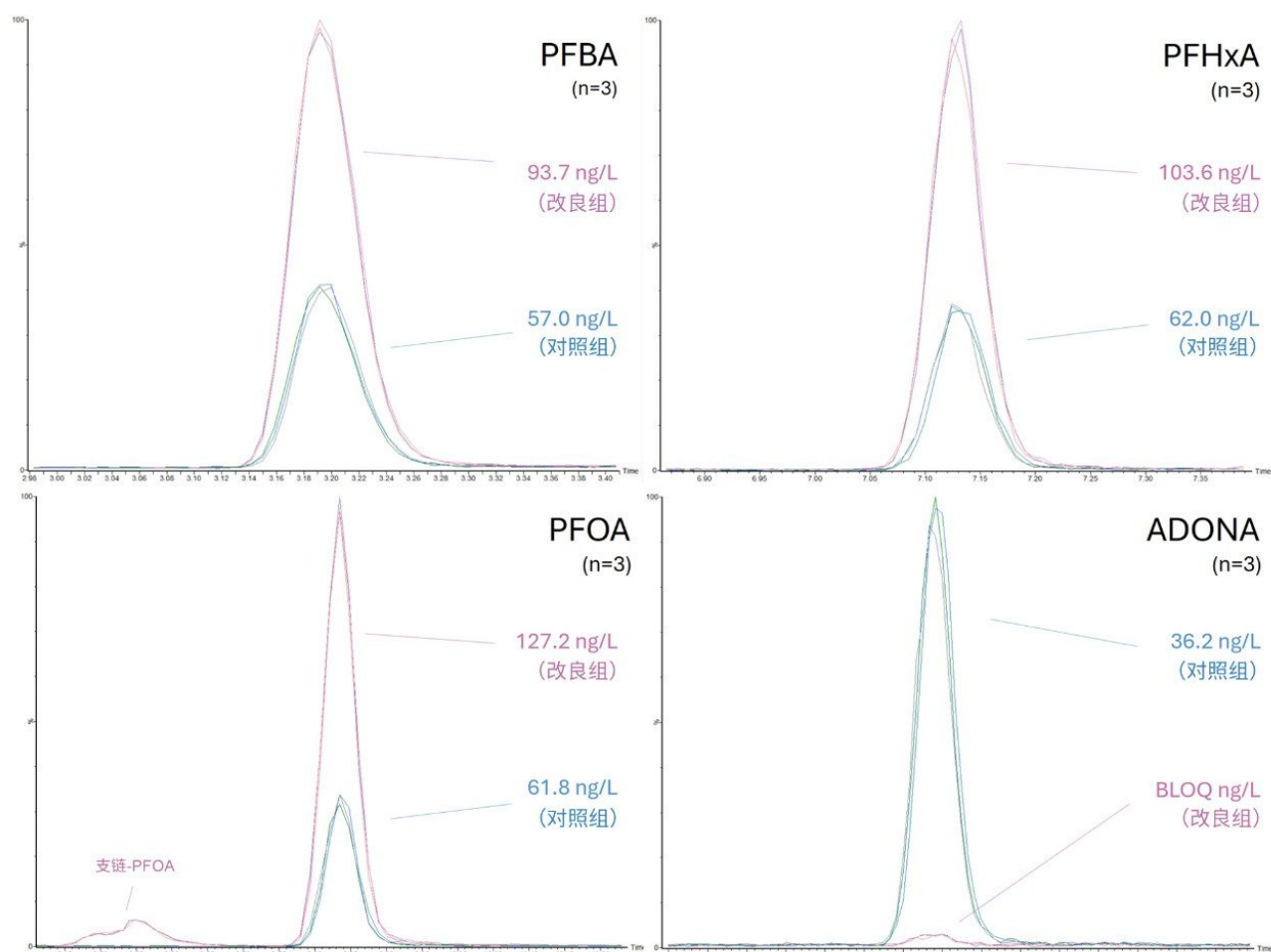


图3.通过TOP测定程序采集的50 ng/L加标试剂水样品的对照重复样和改良重复样(n=3)中PFBA、PFHxA、PFOA和ADONA的色谱图

选定PFCA化合物浓度增加的部分原因可能是样品中的其他PFAS化合物发生了氧化，如图4所示。与对照样品相比，改良样品中N-MeFOSAA和N-EtFOSAA的报告浓度降至BLOQ浓度，降幅超过90%。研究表明，N-MeFOSAA和N-EtFOSAA几乎完全氧化为PFOA⁵，这可以解释改良样品中PFOA浓度增加超过两倍的现象⁵。其他PFCA化合物在改良样品中的浓度变化极小或无明显变化：PFPeA (0%)、PFHpA (-4%)、PFNA (-26%)。

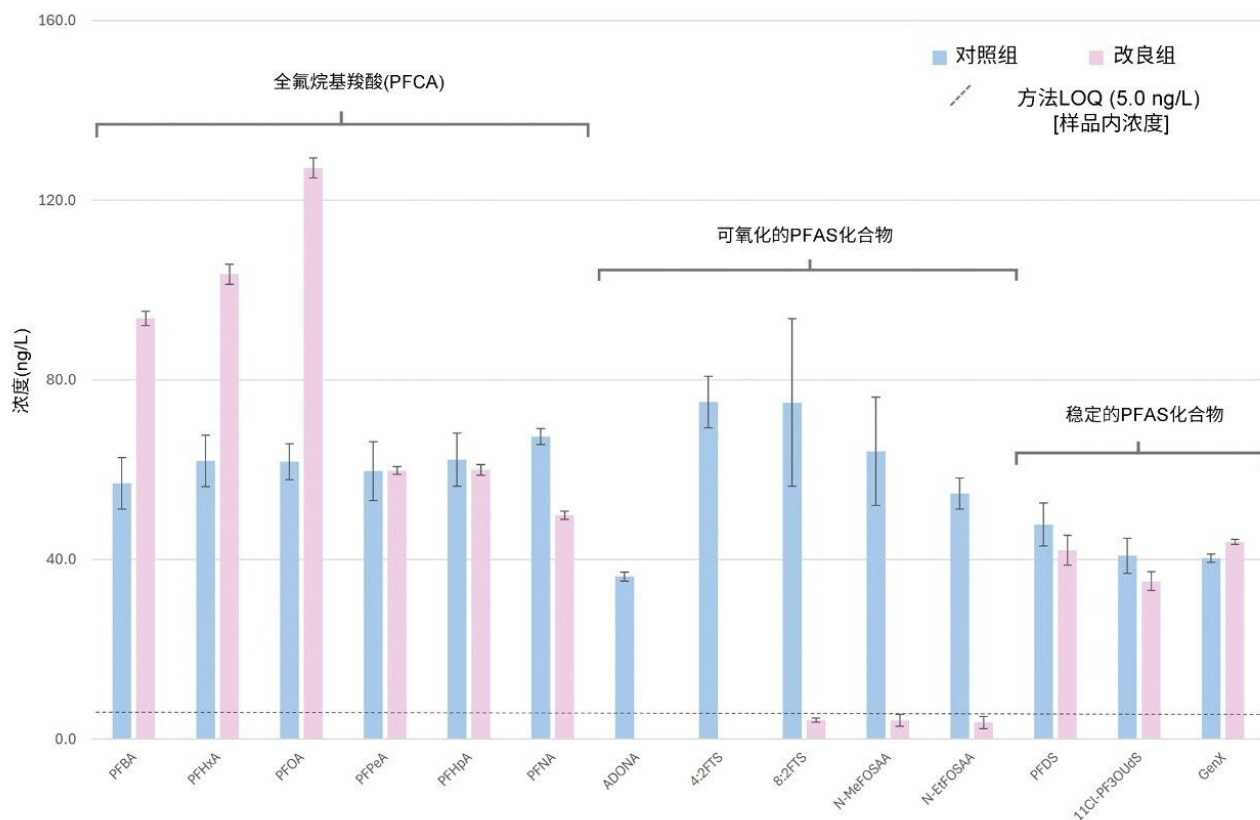


图4.通过TOP测定程序采集的50 ng/L加标试剂水样品对照重复样和改良重复样($n=3$)中PFAS化合物的计算浓度比较。5.0 ng/L (样品内浓度) 处的虚线表示方法LOQ。

在改良重复样中未检出4:2FTS，表明其已完全氧化。这一结果符合预期，因为该化合物属于可氧化磺酸类物质。同样，与对照重复样相比，改良样品中8:2FTS的浓度降至BLOQ水平，6:2FTS的报告浓度降低90%以上，降至7.1 ng/L。有趣的是，4:2FTS、6:2FTS和8:2FTS的降解可能与相应PFBA和PFHxA浓度升高有关。本研究，6:2FTS在对照加标重复样中的回收率超过250%，超出了可接受范围。这一现象在其他TOP测定法分析中也有报告⁵。50 ng/L加标试剂水样品中的其他PFAS化合物均不可氧化，在改良重复样与对照重复样中的浓度相当（相关示例见下图）。

如图5所示，本研究考察的所有地表（河流）水样品在改良重复样中PFCA总浓度均显著增加。具体数值详见表1。

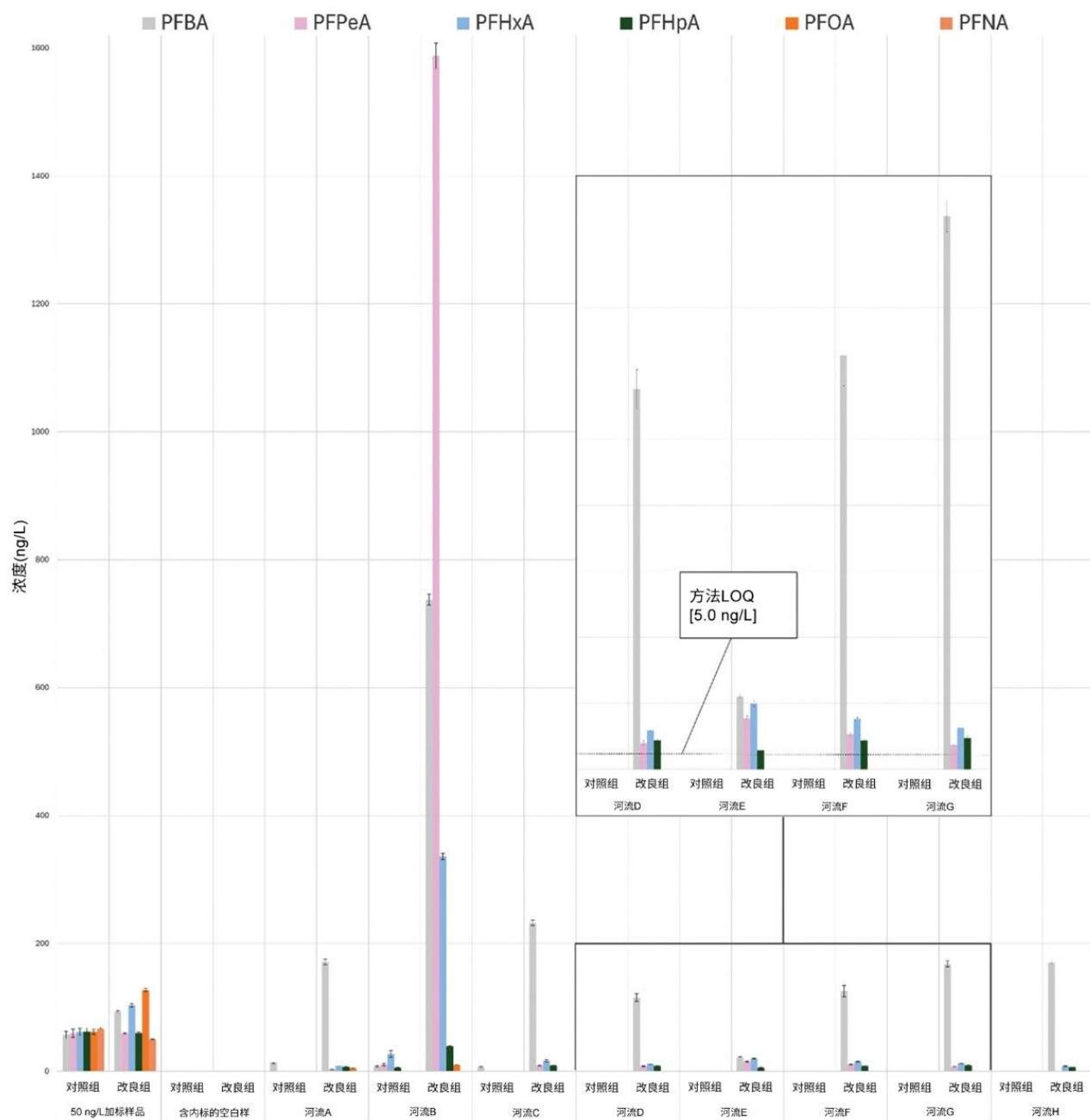


图5.通过TOP测定程序采集的河流A-H地表水样品、50 ng/L加标试剂水样品及含内标的空白样品的对照重复样与改良重复样($n=3$)中PFCA浓度对比。插图中5.0 ng/L (样品内浓度)处的虚线表示方法LOQ。

化合物	50 ng/L加标样品		空白样（含内标）		河流A		河流B		河流C	
	对照组	改良组	对照组	改良组	对照组	改良组	对照组	改良组	对照组	改良组
PFBA	57.0	93.7	BLOQ	BLOQ	13.7	171.0	7.7	737.6	6.4	232.1
PFPeA	59.7	59.8	BLOQ	BLOQ	BLOQ	BLOQ	10.3	1588.4	BLOQ	9.3
PFHxA	62.0	103.6	BLOQ	BLOQ	BLOQ	8.6	27.3	336.2	BLOQ	16.2
PFHpA	62.2	60.0	BLOQ	BLOQ	BLOQ	7.3	5.3	39.2	BLOQ	9.5
PFOA	61.8	127.2	BLOQ	BLOQ	BLOQ	5.1	BLOQ	10.0	BLOQ	BLOQ
PFNA	67.4	49.9	BLOQ	BLOQ	BLOQ	BLOQ	BLOQ	BLOQ	BLOQ	BLOQ
总计	370.0	494.1	0.0	0.0	13.7	192.0	50.6	2711.5	6.4	267.1
化合物	河流D		河流E		河流F		河流G		河流H	
	对照组	改良组	对照组	改良组	对照组	改良组	对照组	改良组	对照组	改良组
PFBA	BLOQ	115.3	BLOQ	22.0	BLOQ	125.5	BLOQ	167.8	BLOQ	169.8
PFPeA	BLOQ	7.9	BLOQ	15.4	BLOQ	10.6	BLOQ	7.5	BLOQ	BLOQ
PFHxA	BLOQ	11.7	BLOQ	19.9	BLOQ	15.2	BLOQ	12.6	BLOQ	8.4
PFHpA	BLOQ	8.7	BLOQ	5.8	BLOQ	8.7	BLOQ	9.4	BLOQ	6.5
PFOA	BLOQ	BLOQ	BLOQ	BLOQ	BLOQ	BLOQ	BLOQ	BLOQ	BLOQ	BLOQ
PFNA	BLOQ	BLOQ	BLOQ	BLOQ	BLOQ	BLOQ	BLOQ	BLOQ	BLOQ	BLOQ
总计	0.0	143.6	0.0	63.1	0.0	160.0	0.0	197.3	0.0	184.7

表1.通过TOP测定程序采集的河流A-H地表水样品、50 ng/L加标试剂水样品及含内标的空白样品的对照重复样与改良重复样(n=3)中PFCA总浓度分布明细。

有趣的是，氧化后地表（河流）水样品的PFCA谱图与加标试剂水样品的PFCA谱图存在差异，在加标试剂水样品中，PFOA是氧化后丰度最高的化合物。在研究的大多数地表（河流）水样品中，PFBA的相对增幅最大，与类似研究的结果一致^{7,8}。这可能表明样品中存在全氟丁基物质。

在研究的所有河流水样品中，河流B的地表水样品氧化水平最高。其中一个原因可能是河流B的对照重复样中6:2 FTS水平较高，平均浓度为234.2 ng/L (RSD±16.9%) (n=3)。多项研究表明，6:2 FTS是污水处理厂释放的一种主要PFAS⁷。6:2 FTS通常会被氧化为PFBA、PFPeA和PFHxA⁵。在研究的所有样品中，河流B样品的采集位置距离污水处理厂也最近。

该工作流程显示，虽然大多数河流地表水对照样品中的PFCA总含量可忽略不计(BLOQ)，但在经过氧化程序后，改良样品中的相对增幅表明存在潜在的PFCA前体化合物。除在河流F的对照样品中检出6.1 ng/L PFOS外，其余所有对照重复样和改良重复样中经未检出其他传统PFAS化合物。

此外，此工作流程中还分析了2个过程空白样品（n=3次技术重复样），以评估样品前处理过程中的污染情况，以及氧化后可能存在的基线共洗脱或污染情况。其中一个过程空白样品中加入了浓度为50 ng/L的IS混合物。值得注

意的是，含IS和不含IS的两个过程空白样品，其改良样品中均未检出PFCA。

同样，除6:2FTS外，在对照样品或氧化过程空白样品中均未检出其他PFAS。6:2FTS在含IS的空白样品中平均浓度为：对照样品67.6 ng/L，改良样品156.6 ng/L。相较于对照重复样，改良重复样中6:2FTS的浓度更高，且改良重复样中不含任何PFCA，表明该化合物未发生氧化，因此污染是在氧化步骤后引入的。图6显示了含内标的改良空白样品的重复测定示例，显示氧化后未检出所监测的PFAS化合物。

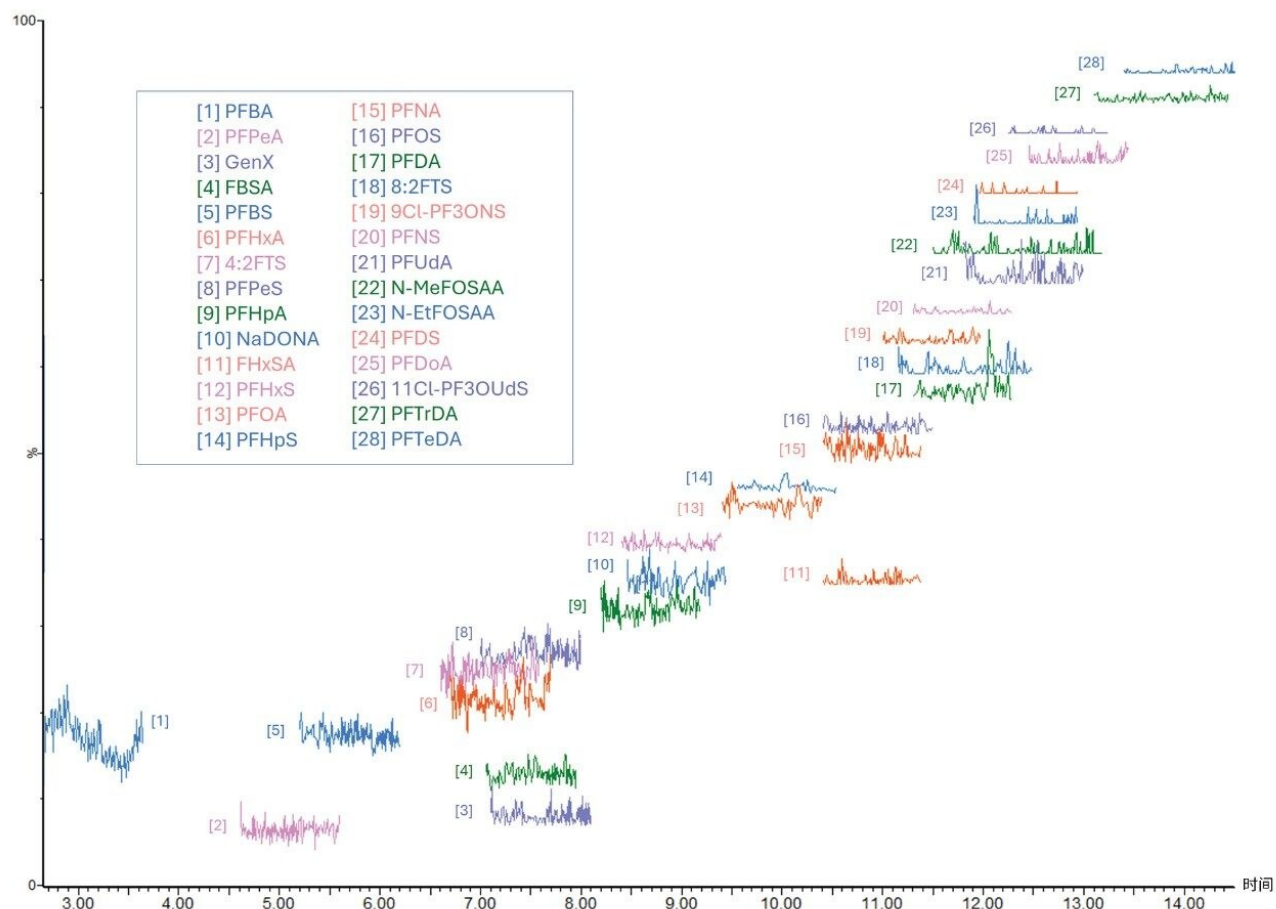


图6.含内标的程序空白改良重复样中所有被监测PFAS化合物的SIR通道概览，表明改良空白样中不含PFAS化合物。[6:2FTS未显示]。

在所有地表（河流）水样品中，加标浓度为50 ng/L的ADONA在所有改良重复样中均未检出，表明氧化成功（图7）。地表水样品中加标ADONA的浓度差异可部分归因于该化合物未使用内标校正。

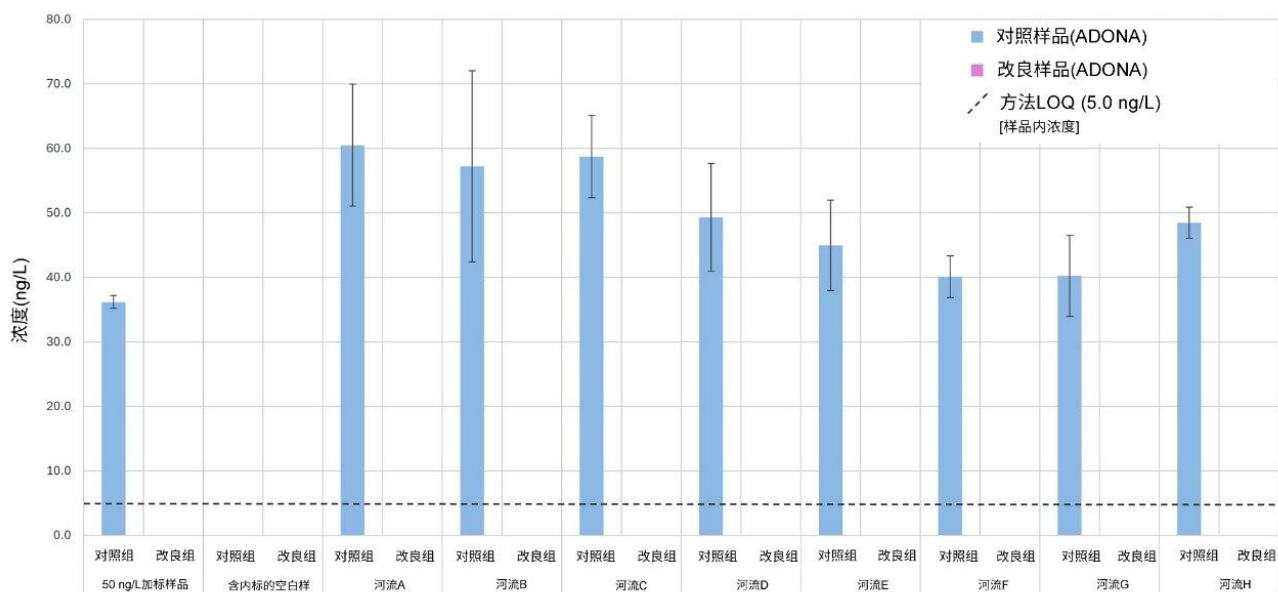


图7.经过TOP测定程序后地表（河流）水样品对照重复样与改良重复样($n=3$)中ADONA浓度对比。5.0 ng/L（样品内浓度）处的虚线表示方法LOQ。

为确保萃取程序的效率，本研究监测了样品的内标回收率。空白样品($n=3$)中PFCA- ^{13}C 标记内标的回收率在69%~94%范围内，表明方法性能良好（图8）。该工作流程中所有样品的平均回收率($n=30$)详见表2。

13C-PFBA		13C5-PFPeA		13C6-PFHxA		13C4-PFHpA		13C8-PFOA		13C9-PFNA	
对照组	改良组	对照组	改良组	对照组	改良组	对照组	改良组	对照组	改良组	对照组	改良组
91%	68%	77%	63%	79%	67%	76%	65%	76%	60%	64%	48%

表2.分析中所有样品的对照重复样($n=30$)和改良重复样($n=30$)的PFCA- ^{13}C 标记内标平均回收率(%)

灵敏度和重现性

数据重现性如图9所示，图中显示了河流A地表水样品对照组和改良组三次进样($n=3$)中PFBA、PFHpA和PFHxA的色谱图。重复样结果显示浓度高于和低于方法LOQ，设定为5.0 ng/L（样品内浓度），相当于最低浓度的校准标准品。

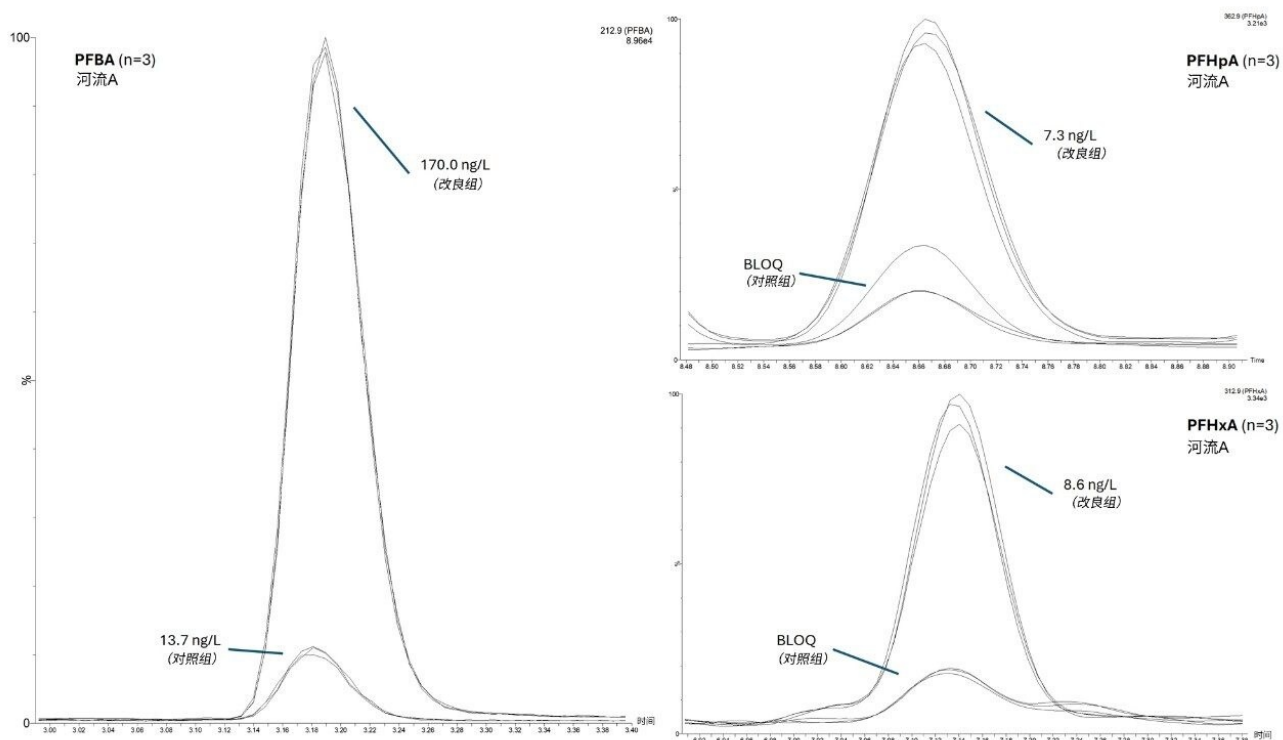


图9.河流A地表水样品对照重复样和改良重复样($n=3$)中PFBA、PFHpA和PFHxA的色谱图。在接近方法LOQ (5.0 ng/L, 样品内浓度) 的浓度水平下, 重复样的重现性良好, 证明了工作流程的一致性。

TOP测定法通常是一种定性方法, 但本工作流程将样品嵌入校准曲线, 以更好地评估方法性能。所有化合物的校准曲线范围为1~80 ng/mL (瓶内浓度, 相当于实际样品中的5~400 ng/L), 加入10 ng/mL (相当于实际样品中的50 ng/L) 内标混合物。所有化合物校准曲线的 R^2 值均大于0.99 (详见补充表S1, 补充部分)。超出该校准范围的浓度后续通过进一步分析确认。

残留和仪器污染

在分析过程中注入50:50甲醇:水溶液作为溶剂空白, 评估仪器污染或残留情况。整个分析过程中, 所有监测化合物在全部溶剂空白进样中均未观察到污染或残留。图10展示了在每份地表水样品前后进样溶剂空白($n=16$)分析所有PFCA化合物的结果。

TOP测定法分析的注意事项

ACQUITY QDa II质谱检测器（一款标准质量分析仪器）可扩展地表水样品中PFAS的分析范围，证明该方法具有足够的灵敏度和可靠性以支持此类分析。该方法凸显了额外PFAS工作流程的实用性，这些工作流程有助于监测可能对当地生态系统和野生动物造成严重下游后果的未知前体和不受监管的PFAS化合物。

需要指出的是，TOP测定方法存在局限性：其仅涵盖可氧化的PFAS化合物（即通过氧化降解后可被靶向分析检测的化合物）⁹。此外，由于氧化过程中可能产生基质干扰和假阳性结果，需使用HRMS确认PFBA和PFPeA的浓度。然而，经TOP测定法制备的对照样品和改良样品可直接使用HRMS或LC-MS/MS重新分析，无需重复样品前处理过程。对于需要超高灵敏度对痕量PFAS进行定量及确证的样品分析，应选用更灵敏的仪器（如Xevo™ TQ Absolute™）¹⁰。

结论

本工作流程在所有地表（河流）水样品中检测到至少三种化合物（共监测六种PFCA化合物）浓度明显增加，表明样品中存在大量PFAA前体或其他未知PFAS化合物，这些物质可能未被完全揭露，因此需进一步研究。多数样品氧化后检测到高浓度PFBA，提示全氟丁基前体是所评估的当地河流中主要的PFAS前体类型。

- 通过比较氧化前后PFCA的浓度，TOP测定法可揭示传统PFAS工作流程可能无法完全捕获的“隐藏”PFAA前体水平，从而提升实验室的检测能力。
- 所有八份地表（河流）水样品在氧化后的总PFCA含量均显著增加，范围为63~2711 ng/L (ppt)，表明存在严重的前体污染，而传统分析方法可能无法检出。
- ACQUITY QDa II质谱检测器非常适合此工作流程，通过可靠且经济有效的LC-MS分析提供标准质量数据用于补充样品评估
- 有效初筛潜在污染的环境样品有助于支持传统LC-MS/MS PFAS检测方法

参考资料

1. Podder, A. *et al.* (2021) ‘Per and poly-fluoroalkyl substances (PFAS) as a contaminant of emerging concern in Surface Water: A transboundary review of their occurrences and toxicity effects’ , *Journal of Hazardous Materials*, 419, p. 126361. [doi:10.1016/j.jhazmat.2021.126361](https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2021.126361) <

<https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/34157464/> .

2. Junaid, M. *et al.* (2024) ‘Trophic transfer and interfacial impacts of micro(nano)plastics and per- and polyfluoroalkyl substances in the environment’ , *Journal of Hazardous Materials*, 465, p. 133243. [doi:10.1016/j.jhazmat.2023.133243](https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2023.133243) <<https://www.semanticscholar.org/paper/Trophic-transfer-and-interfacial-impacts-of-and-in-Junaid-Liu/185546c9e1eed1f2c9ca7a28fd6e34395b304609>> .
3. Wee, S.Y. and Aris, A.Z. (2023) ‘Environmental impacts, exposure pathways, and health effects of PFOA and PFOS’ , *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 267, p. 115663. [doi:10.1016/j.ecoenv.2023.115663](https://doi.org/10.1016/j.ecoenv.2023.115663) <<https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/37976959/>> .
4. U.S. EPA. PFAS Strategic Roadmap: EPA’s Commitments to Action 2021–2024. <https://www.epa.gov/pfas/pfas-strategic-roadmap-epas-commitments-action-2021-2024> <<https://www.epa.gov/pfas/pfas-strategic-roadmap-epas-commitments-action-2021-2024>> (Accessed: 16 August 2024).
5. Houtz, E.F. and Sedlak, D.L. (2012) ‘Oxidative conversion as a means of detecting precursors to perfluoroalkyl acids in urban runoff’ , *Environmental Science & Technology*, 46(17), pp.9342–9349. [doi:10.1021/es302274g](https://doi.org/10.1021/es302274g) <<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/es302274g>> .
6. Zhang, C. *et al.* (2019) ‘Fate of per- and polyfluoroalkyl ether acids in the total oxidizable precursor assay and implications for the analysis of impacted water’ , *Environmental Science & Technology Letters*, 6(11), pp.662–668. [doi:10.1021/acs.estlett.9b00525](https://doi.org/10.1021/acs.estlett.9b00525) <<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.estlett.9b00525>> .
7. van Hees, P, 2017. Analysis of the unknown pool of PFAS: Total Oxidizable Precursors (TOP), PFOS Precursor (PreFOS), and Telomer Degradation. *Eurofins Environment Testing Sweden AB and Man-Technology-Environment Research Centre*, Örebro University.
8. Ye, F., Tokumura, M., Islam, M. S., Zushi, Y., Oh, J., Masunaga, S. Spatial distribution and importance of potential perfluoroalkyl acid precursors in urban rivers and sewage treatment plant effluent. Case study of Tama River, Japan. *Wat. Res.*, 2014, 67, 77–85.
9. Rehnstam, S., Czeschka, M.-B. and Ahrens, L. (2023) ‘Suspect screening and total oxidizable precursor (TOP) assay as tools for characterization of per- and polyfluoroalkyl substance (pfas)-contaminated groundwater and treated landfill leachate’ , *Chemosphere*, 334, p. 138925.

[doi:10.1016/j.chemosphere.2023.138925](https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2023.138925) <<https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/37187375/>> .

10. K Organtini, H Foddy, N Dreolin, S Adams, K Rosnack, P Hancock. 饮用水中全氟烷基和多氟烷基化合物(PFAS)的超痕量检测, 以符合美国国家环境保护局(US EPA)新提出的临时健康建议水平. 沃特世应用纪要. 720007855ZH <<https://www.waters.com/nextgen/global/library/application-notes/2023/ultra-trace-detection-of-per--and-polyfluoroalkyl-substances-pfas-in-drinking-water-to-meet-new-us-epa-interim-health-advisory-levels.html>> .2023年.

补充资料

化合物列表	ESI	<i>m/z</i>	CV	校准范围 (ng/mL)		R ²	校准 (1/X)	相关内标
PFBA	-ve	212.9	5	1	80	0.994	直链	13C-PFBA
PFPeA	-ve	262.9	5	1	80	0.996	直链	13C5-PFPeA
GenX	-ve	285.0	20	1	80	0.990	直链	n/a
FBSA	-ve	297.9	20	1	80	0.994	直链	13C4-PFHpA
PFBS	-ve	298.9	25	1	80	0.993	直链	13C3-PFBS
PFHxA	-ve	312.9	5	1	80	0.994	直链	13C6-PFHxA
4:2FTS	-ve	326.9	25	1	80	0.995	二阶	13C2-4:2 FTS
PFPeS	-ve	348.9	25	1	80	0.992	直链	13C3-PFHxS
PFHpA	-ve	362.9	5	1	80	0.994	直链	13C4-PFHpA
FHxSA	-ve	398.0	20	1	80	0.994	直链	13C4-PFHpA
ADONA	-ve	376.9	5	1	80	0.992	二阶	n/a
PFHxS	-ve	398.9	25	1	80	0.994	直链	13C3-PFHxS
PFOA	-ve	412.9	5	1	80	0.996	直链	13C8-PFOA
6:2FTS	-ve	426.9	30	1	80	0.998	二阶	13C2-6:2 FTS
PFHpS	-ve	448.9	35	1	80	0.995	直链	13C8-PFOS
PFNA	-ve	462.9	10	1	80	0.997	直链	13C9-PFNA
PFOS	-ve	498.9	40	1	80	0.993	直链	13C8-PFOS
PFDA	-ve	512.9	10	1	80	0.995	直链	13C6-PFDA
8:2FTS	-ve	526.9	35	1	80	0.990	二阶	13C2-8:2 FTS
9Cl-PF3ONS	-ve	530.9	25	1	80	0.995	直链	13C8-PFOS
PFNS	-ve	548.9	40	1	80	0.993	直链	13C8-PFOS
PFUdA	-ve	562.9	5	1	80	0.995	直链	13C7-PFUnDA
N-MeFOSAA	-ve	569.9	25	1	80	0.991	直链	D3-N-MeFOSAA
N-EtFOSAA	-ve	583.9	20	1	80	0.991	直链	D5-N-EtFOSAA
PFDS	-ve	598.9	45	1	80	0.990	直链	13C8-PFOS
PFDaA	-ve	612.9	5	1	80	0.994	直链	13C-PFDaDA
11Cl-PF3OUdS	-ve	630.9	35	1	80	0.996	直链	13C9-PFNA
PFTrDA	-ve	662.9	10	1	80	0.993	直链	13C-PFDaDA
PFTeDA	-ve	712.9	10	1	80	0.992	直链	PFTreDA

表S1.监测的PFAS化合物汇总

特色产品

ACQUITY Premier系统 <

<https://www.waters.com/nextgen/global/products/chromatography/chromatography-systems/acquity-premier-system.html>>

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

MassLynx质谱软件 <<https://www.waters.com/nextgen/global/products/informatics-and-software/mass-spectrometry-software/masslynx-mass-spectrometry-software.html>>

ACQUITY QDa II质谱检测器 <<https://www.waters.com/nextgen/global/products/mass-spectrometry/mass-spectrometry-systems/acquity-qda-ii-mass-detector.html>>

720008648ZH, 2024年12月



© 2025 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](#)