

应用纪要

根据EPA 1633分析全氟烷基和多氟烷基化合物(PFAS)第3部分：土壤和组织分析

Kari L. Organtini, Kenneth J. Rosnack, Chelsea Plummer, Peter Hancock, Oliver Burt

Waters Corporation

摘要

在美国，US EPA方法1633已成为分析非饮用水基质、土壤、生物固体和组织中PFAS的基础方法。该方法包括使用弱阴离子交换(WAX)固相萃取(SPE)进行样品前处理和石墨化炭黑(GCB)净化的步骤。本应用纪要是一系列展示执行EPA 1633方法综合解决方案文档中的第三篇。本文的重点是利用双层双相SPE小柱和LC-MS/MS方法，采用ACQUITY™ Premier BSM FTN LC系统与Xevo™ TQ Absolute串联四极杆质谱仪联用，对土壤和鱼类组织样品进行前处理和分析。

优势

- 按照EPA 1633规程，展示了分析土壤和鱼类组织样品中PFAS的端到端工作流程
- 使用含有WAX和GCB的双层双相SPE小柱，可减少分散GCB操作的碎屑，并降低其危险性，进一步缩短样品前处理时间
- 固体样品和组织样品符合EPA 1633的性能标准，证明了所用工作流程的等效性
- Waters™ ERA认证参比物质轻松通过系统校准，证明工作流程性能良好

简介

US EPA方法1633于2021年8月首次推出，成为分析非饮用水基质、土壤、生物固体和组织中PFAS的基础方法¹。EPA 1633于2024年1月最终定稿，在方法中包含的每种样品基质类型都经过了多实验室验证²。该方法涵盖了40种PFAS，并采用同位素稀释法进行校正和定量。所需的样品前处理因样品类型而略有不同，但所有样品类型均采用弱阴离子交换(WAX)小柱进行固相萃取(SPE)并结合石墨化炭黑(GCB)净化。EPA 1633是为了支持《清洁水法》(CWA)和国防部(DoD)的监测和修复分析样品而创建的，但由于它涵盖的基质和化合物种类繁多，因此适用性预计也非常广泛。

这是系列应用纪要的第三篇，这一系列应用纪要旨在介绍使用全面的沃特世技术工作流程解决样品前处理、分析和EPA 1633方法性能问题。本应用纪要将重点介绍如何制备真实土壤和组织样品，将ACQUITY Premier BSM FTN UPLC系统与Xevo TQ Absolute质谱仪联用，并使用第1部分中建立的LC-MS/MS方法进行分析。³ 将WAX和GCB相结合的样品萃取及净化工作流程用于土壤和鱼类组织分析。

实验

样品前处理

本应用纪要中讨论的样品包括土壤和鱼类组织。使用购自当地市场的鲑鱼作为研究的鱼类组织基质。在进行二次取样之前，使用搅拌器将鱼类组织均质化处理。土壤使用ERA定制的土壤参比物质，类似于目前提供的PFAS土壤CRM（货号603 <<https://www.eraqc.com/pfas-in-soil-soil-era001675?returnurl=%2fsearch%3fq%3d603%26analytessearchonly%3dfalse>>），其中含有40种已知浓度的EPA 1633 PFAS。根据EPA 1633指南和保存时间要求，在样品分析之前冷冻样品。

使用Oasis GCB/WAX双相SPE小柱（P/N：186011112 <<https://www.waters.com/nextgen/global/shop/sample-preparation--filtration/186011112-oasis-gcb-wax-for-pfas-analysis-6cc-vac-cartridge-50-mg-gcb-200-.html>>）用于PFAS分析，其中包含了用于样品净化所需的WAX和GCB吸附剂代替了分散的GCB。在土壤和组织分析中，将GCB装填在WAX吸附剂上方，以便重现EPA 1633方法中在WAX SPE之前使用GCB净化样品的步骤。

完整的样品前处理细节请参见图1和图2，方法直接改编自EPA 1633方法。图1详细列出了用于土壤/固体和组织样品的两种不同的萃取程序。图2详细列出了所有样品类型的SPE规程。如前所述，将分散的GCB步骤整合到SPE小柱中，尽可能减少因使用松散GCB材料而导致的问题，并在不影响方法性能的情况下减少样品前处理步骤。

萃取前，向土壤样品中加标0.25~2 ng/g（样品浓度当量）的所需萃取内标(EIS)，并在萃取后加标0.25~1.0 ng/g（样品浓度当量）的所需非萃取内标(NIS)。萃取前，向组织样品中加标0.625~5 ng/g（样品浓度当量）的所需萃取内标(EIS)，并在萃取后加标0.625~2.5 ng/g（样品浓度当量）的所需非萃取内标(NIS)。单个组分的具体浓度的变化取决于Wellington混标中各组分的浓度。附录表2中列出了各分析物（样品瓶当量）的标准曲线范围，可根据本应用纪要第1部分中采集和展示的数据确定³。所有标准品（混合物）均购自Wellington Laboratories。

土壤/固体	组织
<ul style="list-style-type: none">• 称取<u>5 g</u>样品，加入50 mL试管<ul style="list-style-type: none">• <u>加标</u>提取混合内标（来自Wellington的MPFAC-HIF-ES）• 加入<u>10 mL含0.3%氨水的甲醇溶液</u><ul style="list-style-type: none">• 振摇30分钟，离心，将上清液转移至干净的试管中• 加入<u>15 mL含0.3%氨水的甲醇溶液</u><ul style="list-style-type: none">• 振摇30分钟，离心，转移上清液（与之前的步骤合并）• 加入<u>5 mL含0.3%氨水的甲醇溶液</u><ul style="list-style-type: none">• 振摇5分钟，离心，转移上清液（与之前的步骤合并）• 在氮气下<u>浓缩</u>至7 mL• 用水<u>复溶</u>至50 mL（最多）• 检查pH并调节至<ph>6左右</ph>• 继续执行<u>SPE</u>步骤	<ul style="list-style-type: none">• 称取<u>2 g</u>样品，加入15 mL试管<ul style="list-style-type: none">• <u>加标</u>提取混合内标（来自Wellington的MPFAC-HIF-ES）• 加入<u>10 mL含0.05 M KOH的甲醇溶液</u><ul style="list-style-type: none">• 轻轻振摇16小时，离心，将上清液转移至干净的试管中• 加入<u>10 mL乙腈</u><ul style="list-style-type: none">• 超声处理30分钟，离心，取上清液（与之前的步骤合并）• 加入<u>5 mL含0.05 M KOH的甲醇溶液</u><ul style="list-style-type: none">• 振摇5分钟，离心，转移上清液（与之前的步骤合并）• 加入<u>1 mL水</u><ul style="list-style-type: none">• 在氮气下<u>浓缩</u>至2.5 mL• 用水<u>复溶</u>至50 mL（最多）• 检查pH并调节至<ph>6左右</ph>• 继续执行<u>SPE</u>步骤

图1.土壤和组织萃取规程的完整方法细节。改编自EPA方法1633。

1.

- 用玻璃棉将SPE小柱填充到柱体的一半高度
- 活化SPE小柱
 - 15 mL含1%(v/v)氢氧化铵的甲醇溶液
 - 5 mL 0.3 M甲酸

2.

- 以5 mL/min的流速上样
- 用10 mL试剂用水清洗小柱，务必用此溶液冲洗储液瓶
- 用5 mL的0.1 M甲酸:甲醇(1:1)清洗，务必用此溶液冲洗储液瓶
- 干燥小柱15 s

3.

- 将收集管安装到萃取装置上
- 用5 mL含1%(v/v)氨水的甲醇溶液冲洗储液瓶。转移至小柱并洗脱
- 向每个样品中加入25 μ L乙酸
- 在每个样品中加标非萃取内标（来自Wellington的MPFAC-HIF-IS）

图2.土壤和组织SPE规程的完整方法细节。改编自EPA方法1633。

液相色谱条件

液相色谱系统：

配备FTN的ACQUITY Premier BSM

样品瓶：

700 μ L聚丙烯螺口带盖瓶(P/N: 186005219)

分析柱：

ACQUITY Premier BEH™ C₁₈ 2.1 × 50 mm, 1.7 μ m (P/N: 186009452)

隔离柱：

Atlantis Premier BEH C18 AX 2.1 × 50 mm, 5.0 μ m (P/N: 186009407)

柱温：

35 °C

样品温度： 10 °C

PFAS方法包： PFAS安装套件，带OASIS™ WAX 150 mg (P/N: 176004548)

进样体积： 2 μL

流速： 0.3 mL/min

流动相A： 2 mM乙酸铵水溶液

流动相B： 2 mM乙酸铵乙腈溶液

梯度表

时间 (min)	%A	%B	曲线
0	95	5	初始
0.5	75	25	6
3	50	50	6
6.5	15	85	6
7	5	95	6
8.5	5	95	6
9	95	5	6
11	95	5	6

MS条件

质谱系统： Xevo TQ Absolute质谱仪

电离模式： ESI-

毛细管电压： 0.5 kV

离子源温度:	100 °C
脱溶剂气温度:	350 °C
脱溶剂气流速:	900 L/h
锥孔气流速:	150 L/h
MRM方法:	有关完整MRM方法的详细信息，请参见附录

数据管理

软件: waters_connect™定量分析软件

结果与讨论

土壤和组织样品中的回收率

EPA 1633是一种基于性能的方法，只要满足方法中列出的全部性能标准就允许修改。本研究中提出的唯一改进是使用双层双相SPE小柱，将原本分散的GCB净化步骤整合到WAX SPE小柱中。GCB较难操作且难以准确测量，因此，使用双层小柱可省去繁琐的GCB分散步骤。更重要的是，将GCB净化步骤整合到SPE萃取中，可以在样品前处理过程中为实验室节省宝贵的时间。此外，较少的前处理步骤还能够减少引入意外PFAS样品污染的机会。本研究使用了一种在WAX上堆叠GCB的小柱，用于重现EPA 1633的工作流程，其中GCB净化步骤在将样品上样至WAX小柱之前进行。

为证明该方法的等效性，必须确定的重要性能标准之一是目标分析物（天然存在的化合物）和萃取内标(EIS)的回收率可接受限值（请参阅该文档中的表7）¹。表1列出了双层双相SPE小柱在土壤和鱼类组织中每种EIS的回收性能。表1中报告的数据为每种基质类型3次重复萃取的平均回收率和%RSD。在萃取的土壤和组织样品中，所有EIS的平均回收率分别为81%和85%，平均RSD分别为2.8%和9.2%。

图3直接比较了每种样品类型的EIS平均回收率与EPA 1633表7中允许的回收率。本研究中分析的土壤和鱼类组织化合物中所有PFAS的结果均轻松满足各自回收率的可接受限值，并且在所有情况下均明显高于最低回收率，表明

双层GCB/WAX SPE小柱与使用分散GCB等效，且完全符合预期目标。

化合物	土壤		鱼类组织	
	平均回收率 (%)	%RSD	平均回收率 (%)	%RSD
¹³ C ₄ -PFBA	93.9	1.6	79.8	13.0
¹³ C ₅ -PFPeA	91.4	2.3	80.5	13.4
¹³ C ₅ -PFHxA	89.1	2.7	79.5	14.8
¹³ C ₄ -PFHpA	93.1	1.8	89.2	12.4
¹³ C ₈ -PFOA	92.4	1.1	81.9	14.7
¹³ C ₉ -PFNA	92.3	2.5	77.0	9.3
¹³ C ₆ -PFDA	88.7	0.5	77.8	5.7
¹³ C ₇ -PFUnDA	90.3	1.6	87.1	6.8
¹³ C-PFDoDA	83.0	2.1	87.4	5.3
¹³ C ₂ -PFTreDA	64.6	14.8	95.2	8.2
¹³ C ₃ -PFBS	89.1	11.4	81.3	16.1
¹³ C ₃ -PFHxS	88.8	5.6	108.8	12.7
¹³ C ₆ -PFOS	88.0	2.1	80.3	8.4
¹³ C ₂ -4:2 FTS	89.0	5.7	82.5	19.2
¹³ C ₂ -6:2 FTS	84.9	2.0	129.6	13.7
¹³ C ₂ -8:2 FTS	85.2	0.9	133.3	14.4
¹³ C ₆ -FOSA	93.7	4.3	92.9	4.9
¹³ C ₃ -GenX	89.3	4.5	81.0	12.7
D ₅ -N-EtFOSAA	88.2	1.0	141.5	4.8
D ₃ -N-MeFOSAA	88.7	1.3	152.7	7.6
d ₃ -NMeFOSA	58.5	4.8	70.3	6.7
d ₅ -NEtFOSA	51.9	2.1	26.7	6.6
d ₇ -NMeFOSE	57.6	10.6	66.5	5.3
d ₉ -NEtFOSE	52.2	10.3	63.2	5.0

表1. 使用双层双相SPE小柱萃取土壤和鱼类组织中的萃取内标(E/S)得到的平均回收率($n=3$)。

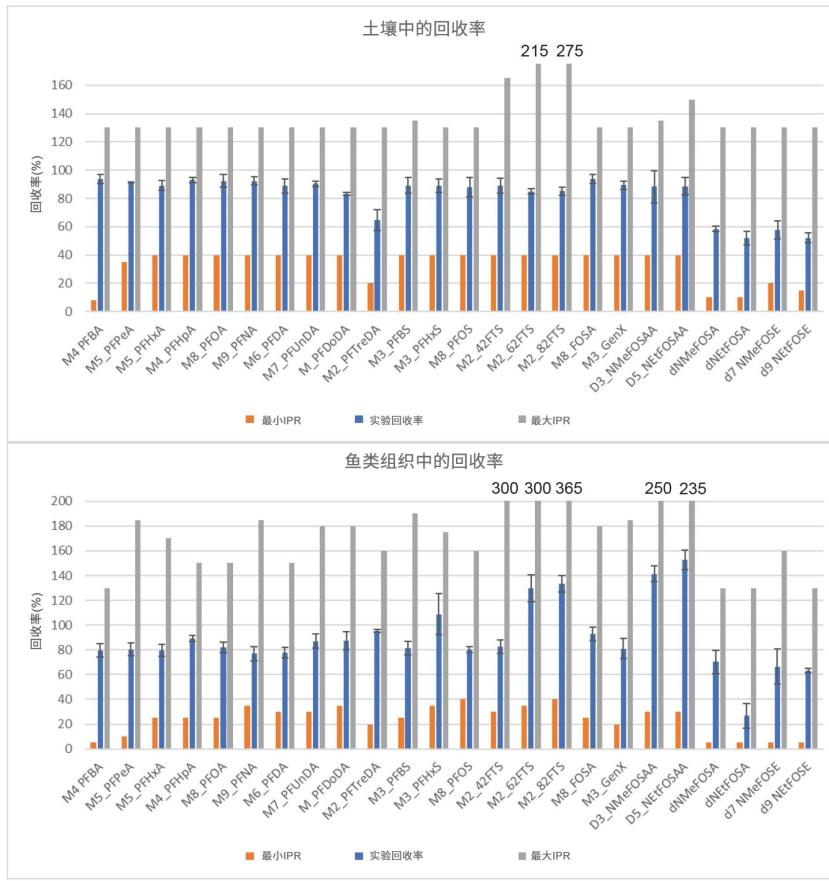


图3.土壤（上图）和鱼类组织（下图）中萃取内标(E/S)的平均回收率。实验值（蓝色）与EPA 1633方法允许的最低回收率（橙色）和最高回收率（灰色）进行了比较。每种样品基质重复3次。超出图中范围的条柱带有标记。

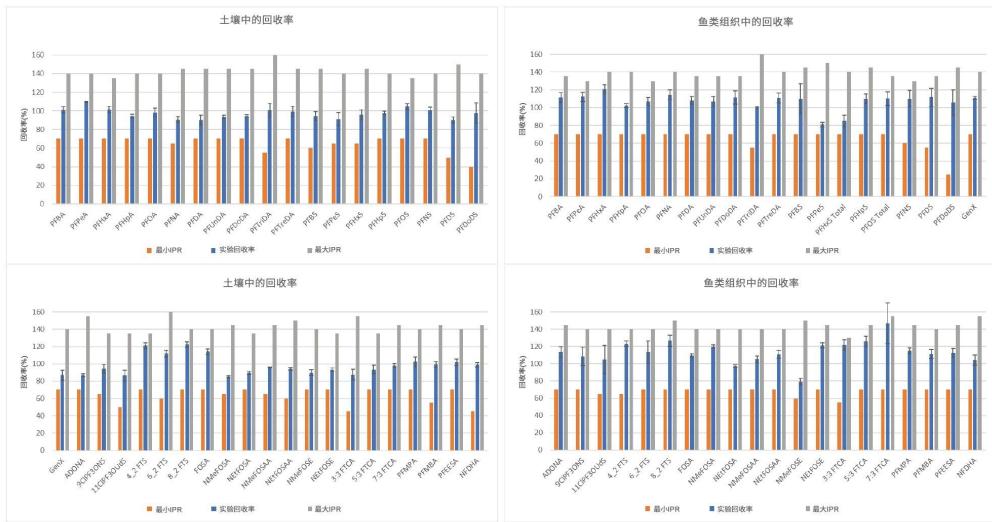


图4.土壤（左图）和鱼类组织（右图）中目标PFAS分析物的平均回收率。实验值（蓝色）与EPA 1633方法允许的最低回收率（橙色）和最高回收率（灰色）进行了比较。每种样品基质重复3次。超出图中范围的条柱带有标记。

土壤样品认证参比物质分析

分析准确度对于定量客户样品中的PFAS非常重要。本研究对沃特世ERA的定制认证参比物质(CRM)进行了处理，以展示工作流程的准确性。分析的参比物质为代表性土壤基质中包含的所有40种EPA 1633 PFAS化合物，用以评估在不含PFAS的已知样品中的方法性能。图5显示了土壤CRM三次重复萃取和分析的平均定量结果。红色虚点线和虚划线表示CRM指定浓度（蓝色实线）土20%的范围，灰色实线表示样品分析过程中测得的平均实验定量值。EPA 1633中所有40种目标PFAS的定量结果均在浓度范围的±20%以内，平均正确度为97%，正确度范围为85%~120%。这表明，使用沃特世解决方案进行样品前处理、分析和数据处理工作流程的准确性值得信赖。

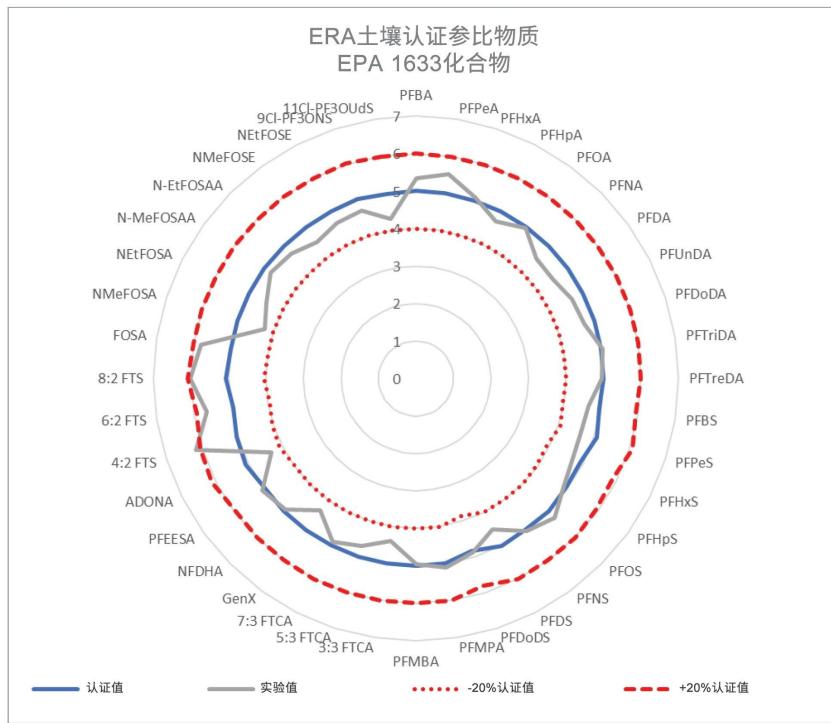


图5.定制Waters ERA PFAS在土壤CRM中所有40种EPA 1633目标分析物的定量值。红线表示CRM认证值±20%的范围。蓝线表示认证值。灰色实线表示平均实验定量值($n=3$)。

结论

本研究按照EPA 1633规程对土壤和鱼类组织样品进行了样品前处理和分析。采用含有WAX和GCB的Oasis GCB/WAX双层SPE小柱进行样品萃取和净化，取代了使用分散GCB进行的两步萃取和净化过程。这款小柱可提供更出色的用户体验，并缩短了样品前处理所用的时间。所有回收率均在可接受标准范围内，土壤和鱼类组织的平均EIS回收率分别为81%和85%。土壤和组织的平均RSD分别为2.8%和9.2%。这表明双层双相SPE小柱是适合替代EPA 1633中多步萃取和净化方法的单步方法。此外，使用相同方法处理和分析Waters ERA土壤参比物质也能够轻松落在认证参比物质范围内，表明方法准确度具有较高的可信度。所展示数据表明，用于PFAS SPE分析的Oasis GCB/WAX小柱与LC-MS/MS系统联用，可轻松满足EPA 1633中对固体和组织分析的所有要求。

参考资料

1. US Environmental Protection Agency. Analysis of Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS) in Aqueous, Solid, Biosolids, and Tissue Samples by LC-MS/MS. January 2024.
2. US Environmental Protection Agency. Clean Water Act Analytical Methods: CWA Analytical Methods for Per- and Polyfluorinated Alkyl Substances (PFAS). <https://www.epa.gov/cwa-methods/cwa-analytical-methods-and-polyfluorinated-alkyl-substances-pfas#documents> <<https://www.epa.gov/cwa-methods/cwa-analytical-methods-and-polyfluorinated-alkyl-substances-pfas#documents>> Accessed 31 Jan, 2024.
3. K Organini, K Rosnack, P Hancock. 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年

附录

化合物	母离子	碎片离子	CV	CE	软传输	内标	内标的类型
PFBA	213.0	169	10	10	否	¹³ C ₃ -PFBA	-
PFPeA	262.9	219	10	5	否	¹³ C ₅ -PFPeA	-
PFHxA	312.9	269	5	10	否	¹³ C ₅ -PFHxA	-
		119	5	20			
PFHpA	362.9	319	15	10	否	¹³ C ₄ -PFHpA	-
		169	15	15			
PFOA	412.9	369	10	10	否	¹³ C ₈ -PFOA	-
		169	10	15			
PFNA	462.9	419	10	10	否	¹³ C ₉ -PFNA	-
		219	10	15			
PFDA	512.9	468.9	15	9	否	¹³ C ₈ -PFDA	-
		219	15	15			
PFUnDA	562.9	518.9	25	10	否	¹³ C ₇ -PFUnDA	-
		269	25	20			
PFDoDA	612.9	568.9	30	10	否	¹³ C-PFDoDA	-
		169	30	25			
PFTriDA	662.9	618.9	5	10	否	¹³ C-PFDoDA + ¹³ C ₂ -PFTreDA	-
		169	5	30			
PFTreDA	712.9	668.9	10	25	否	¹³ C ₂ -PFTreDA	-
		169	10	15			
PFBS	298.9	80.1	15	30	否	¹³ C ₃ -PFBS	-
		99.1	15	30			
PFPeS	348.9	79.9	10	30	否	¹³ C ₃ -PFHxS	-
		98.9	10	30			
PFHxS	398.9	80.1	10	35	否	¹³ C ₃ -PFHxS	-
		99.1	10	30			
PFHpS	448.9	80.1	15	35	否	¹³ C ₈ -PFOS	-
		99.1	15	35			
PFOS	498.9	80.1	15	40	否	¹³ C ₈ -PFOS	-
		99.1	15	40			
PFNS	548.9	80.1	20	40	否	¹³ C ₈ -PFOS	-
		99.1	20	40			
PFDS	598.9	80.1	46	46	否	¹³ C ₈ -PFOS	-
		99.1	46	46			
PFDoDS	699.1	80	40	55	否	¹³ C ₈ -PFOS	-
		99	40	55			
GenX (HFPO-DA)	285.0	169	5	7	是	¹³ C ₃ -HFPO-DA	-
		119	5	35			
ADONA	376.9	251	10	10	否	¹³ C ₃ -HFPO-DA	-
		85	10	25			
9CI-PF3ONS	530.9	350.9	15	25	否	¹³ C ₃ -HFPO-DA	-
		82.9	15	25			
11CI-PF3OUdS	630.9	450.9	30	30	否	¹³ C ₃ -HFPO-DA	-
		82.9	30	30			
4:2 FTS	326.9	306.9	15	15	否	¹³ C ₂ -4:2 FTS	-
		80.9	15	35			
6:2 FTS	426.9	407	10	20	否	¹³ C ₂ -6:2 FTS	-
		80.1	12	32			

化合物	母离子	碎片离子	CV	CE	软传输	内标	内标的类型
8:2 FTS	526.9	506.8	15	25	否	¹³ C ₂ -8:2 FTS	-
		80.9	15	37			
FOSA	497.9	78	40	30	否	¹³ C ₈ -FOSA	-
N-MeFOSA	511.9	168.9	40	30	否	d ₃ NMeFOSA	-
		218.9	40	25			
N-EtFOSA	525.9	168.9	5	25	否	d ₅ NEtFOSA	-
		218.9	5	25			
N-MeFOSAA	569.9	418.9	35	25	否	d ₃ -N-MeFOSAA	-
		219.1	35	20			
N-EtFOSAA	584.0	418.9	15	20	否	d ₅ -N-EtFOSAA	-
		525.9	15	20			
N-MeFOSE	616.0	59	15	15	否	d ₇ -NMeFOSE	-
N-EtFOSE	630.0	59	15	15	否	d ₉ -NEtFOSE	-
3:3 FTCA	241.0	116.9	5	40	否	¹³ C ₅ -PFPeA	-
		176.9	5	10			
5:3 FTCA	340.9	216.9	5	25	否	¹³ C ₅ -PFHxA	-
		237	5	10			
7:3 FTCA	440.9	316.9	10	22	否	¹³ C ₅ -PFHxA	-
		337	10	17			
PFMPA	228.9	84.9	23	10	否	¹³ C ₅ -PFPeA	
PFMBA	278.9	84.9	10	10	否	¹³ C ₅ -PFHxA	
PFEESA	314.9	82.9	15	20	否	¹³ C ₅ -PFHxA	-
		134.9	15	20			
NFDHA	295.0	84.9	5	10	否	¹³ C ₅ -PFHxA	-
		200.9	5	10			
¹³ C ₄ -PFBA	216.8	171.9	10	10	否	¹³ C ₃ -PFBA	萃取内标
¹³ C ₅ -PFPeA	267.9	223	10	5	否	¹³ C ₂ -PFHxA	萃取内标
¹³ C ₅ -PFHxA	317.9	272.9	10	5	否	¹³ C ₂ -PFHxA	萃取内标
		119.9	10	20			
¹³ C ₄ -PFHpA	366.9	321.9	15	10	否	¹³ C ₂ -PFHxA	萃取内标
		169	15	15			
¹³ C ₈ -PFOA	420.9	375.9	5	15	否	¹³ C ₄ -PFOA	萃取内标
		172	5	10			
¹³ C ₉ -PFNA	471.9	426.9	10	10	否	¹³ C ₅ -PFNA	萃取内标
		223	10	15			
¹³ C ₆ -PFDA	519	473.9	5	10	否	¹³ C ₂ -PFDA	萃取内标
		219	5	15			
¹³ C ₇ -PFUnDA	569.9	524.9	5	10	否	¹³ C ₂ -PFDA	萃取内标
		274	5	15			
¹³ C-PFDoDA	614.9	569.9	10	10	否	¹³ C ₂ -PFDA	萃取内标
		169	10	25			
¹³ C ₂ -PFTreDA	714.9	169	25	35	否	¹³ C ₂ -PFDA	萃取内标
		669.9	25	10			
¹³ C ₃ -PFBS	301.9	80.1	10	30	否	18O ₂ -PFHxS	萃取内标
		99.1	10	25			
¹³ C ₃ -PFHxS	401.9	80.1	10	40	否	18O ₂ -PFHxS	萃取内标
		99.1	10	35			
¹³ C ₈ -PFOS	506.9	80.1	15	40	否	¹³ C ₄ -PFOS	萃取内标
		99.1	15	40			

化合物	母离子	碎片离子	CV	CE	软传输	内标	内标的类型
¹³ C ₃ -GenX	287	169	5	12	是	¹³ C ₂ -PFHxA	萃取内标
		119	5	12			
¹³ C ₂ -4:2 FTS	328.9	308.9	40	15	否	¹⁸ O ₂ -PFHxS	萃取内标
		81	40	25			
¹³ C ₂ -6:2 FTS	428.9	409	10	20	否	¹⁸ O ₂ -PFHxS	萃取内标
		80.9	10	27			
¹³ C ₂ -8:2 FTS	528.9	508.9	10	20	否	¹⁸ O ₂ -PFHxS	萃取内标
		81	10	35			
¹³ C ₈ -FOSA	505.9	78.1	35	25	否	¹³ C ₄ -PFOS	萃取内标
d ₃ NMeFOSA	514.9	168.9	40	30	否	¹³ C ₄ -PFOS	萃取内标
d ₅ NEtFOSA	531	168.9	5	25	否	¹³ C ₄ -PFOS	萃取内标
D ₅ -N-EtFOSAA	589	418.9	30	20	否	¹³ C ₄ -PFOS	萃取内标
		506.9	30	15			
D ₃ -N-MeFOSAA	572.9	418.9	35	20	否	¹³ C ₄ -PFOS	萃取内标
		482.7	35	15			
d ₇ -NMeFOSE	623	58.9	15	15	否	¹³ C ₄ -PFOS	萃取内标
d ₉ -NEtFOSE	639	58.9	15	15	否	¹³ C ₄ -PFOS	萃取内标
¹³ C ₃ -PFBA	216	172	10	10	否	-	非萃取内标
¹³ C ₂ -PFHxA	314.9	119.9	10	20	否	-	非萃取内标
		270	10	5			
¹³ C ₄ -PFOA	417	172	10	20	否	-	非萃取内标
¹³ C ₅ -PFNA	468	423	10	10	否	-	非萃取内标
¹³ C ₂ -PFDA	515	470	20	10	否	-	非萃取内标
¹⁸ O ₂ -PFHxS	403	83.9	10	40	否	-	非萃取内标
¹³ C ₄ -PFOS	503	80.2	15	40	否	-	非萃取内标
		99.1	15	40			

附表1. 使用Xevo TQ Absolute MS对水样中的EPA 1633化合物进行PFAS分析所用的质谱方法条件。

化合物	标准曲线样品1 (ng/mL)	标准曲线样品2 (ng/mL)	标准曲线样品3 (ng/mL)	标准曲线样品4 (ng/mL)	标准曲线样品5 (ng/mL)	标准曲线样品6 (ng/mL)	标准曲线样品7 (ng/mL)	标准曲线样品8 (ng/mL)
PFBA	0.02	0.04	0.20	0.40	1.00	2.00	4.0	10.0
PFPeA	0.01	0.02	0.10	0.20	0.50	1.00	2.0	5.0
PFHxA	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
PFHpA	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
PFOA	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
PFNA	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
PFDA	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
PFUnDA	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
PFDoDA	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
PFTriDA	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
PFTreDA	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
PFBS	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
PFPeS	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
PFHxS	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
PFHpS	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
PFOS	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
PFNS	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
PFDS	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
PFDoDS	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
GenX	0.01	0.02	0.10	0.20	0.50	1.00	2.0	5.0
ADONA	0.01	0.02	0.10	0.20	0.50	1.00	2.0	5.0
9CIPF3ONS	0.01	0.02	0.10	0.20	0.50	1.00	2.0	5.0
11CIPF3OUdS	0.01	0.02	0.10	0.20	0.50	1.00	2.0	5.0
4_2 FTS	0.02	0.04	0.20	0.40	1.00	2.00	4.0	10.0
6_2 FTS	0.02	0.04	0.20	0.40	1.00	2.00	4.0	10.0
8_2 FTS	0.02	0.04	0.20	0.40	1.00	2.00	4.0	10.0
FOSA	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
NMeFOSA	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
NEtFOSA	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
NMeFOSAA	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
NEtFOSAA	0.005	0.01	0.05	0.10	0.25	0.50	1.0	2.5
NMeFOSE	0.05	0.10	0.50	1.00	2.50	5.00	10.0	25.0
NEtFOSE	0.05	0.10	0.50	1.00	2.50	5.00	10.0	25.0
3:3 FTCA	0.02	0.04	0.20	0.40	1.00	2.00	4.0	10.0
5:3 FTCA	0.10	0.20	1.00	2.00	5.00	10.0	20.0	50.0

化合物	标准曲线样品1 (ng/mL)	标准曲线样品2 (ng/mL)	标准曲线样品3 (ng/mL)	标准曲线样品4 (ng/mL)	标准曲线样品5 (ng/mL)	标准曲线样品6 (ng/mL)	标准曲线样品7 (ng/mL)	标准曲线样品8 (ng/mL)
7:3 FTCA	0.10	0.20	1.00	2.00	5.00	10.0	20.0	50.0
PFMPA	0.01	0.02	0.10	0.20	0.50	1.00	2.0	5.0
PFMBA	0.01	0.02	0.10	0.20	0.50	1.00	2.0	5.0
PFEESA	0.01	0.02	0.10	0.20	0.50	1.00	2.0	5.0
NFDHA	0.01	0.02	0.10	0.20	0.50	1.00	2.0	5.0
M4 PFBA	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0
M5_PFPeA	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
M5_PFHxA	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50
M4_PFHxA	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50
M8_PFOA	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50
M9_PFNA	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25
M6_PFDA	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25
M7_PFUuDA	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25
M_PFDODA	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25
M2_PFTreDA	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25
M3_PFBs	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50
M3_PFHxS	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50
M8_PFOS	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50
M2_42FTS	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
M2_62FTS	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
M2_82FTS	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
M8_FOSA	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
M3_GenX	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0
D3_NMeFOSAA	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
D5_NEtFOSAA	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
dNMeFOSA	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50
dNEtFOSA	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50
d7 NMeFOSE	5.0	5.0	5.0	5.0	5.0	5.0	5.0	5.0
d9 NEtFOSE	5.0	5.0	5.0	5.0	5.0	5.0	5.0	5.0
M3_PFBa_NIS	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
M2_PFHxA_NIS	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50
M4_PFOA_NIS	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50
M5_PFNDA_NIS	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25
M2_PFDA_NIS	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25
18O2_PFHxS_NIS	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50
M4_PFOS_NIS	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50

附表2. 使用Xevo TQ Absolute MS对水样中的EPA 1633化合物进行PFAS分析所用的标准曲线范围。

特色产品

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

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

waters_connect定量软件平台 <https://www.waters.com/nextgen/global/products/informatics-and-software/waters_connect-for-quantitation.html>

720008230ZH, 2024年2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](#)