

应用 ICP-MS/MS 测定土壤中的可提取有机氟 (EOF) 的总氟含量

ICP-MS/MS 和 LC-MS/MS 法定量分析土壤中的全氟烷基和多氟烷基化合物 (PFAS) 的总氟含量的差异

作者

董硕飞, 吕美玲
安捷伦科技 (中国) 有限公司

摘要

全氟烷基和多氟烷基化合物 (PFAS) 的生态效应与健康风险在全球范围内备受关注。随着相关研究的深入, 使用 LC-MS/MS 靶标分析法对特定 PFAS 化合物进行定量分析无法满足研究需要。针对 PFAS 的非靶标分析方法 (如 LC/Q-TOF 筛查和 PFAS 总量分析) 的需求日益增加。本文介绍了应用 ICP-MS/MS 测定可提取有机氟 (EOF) 的总氟含量的方法。该方法使用全氟辛酸 (PFOA) 作为标准物质, 以 50% 甲醇-水溶液作为溶剂, 在线添加 Ba 离子溶液和 F 离子在等离子体中生成 $[BaF]^+$ 离子团, 并用 $[BaF]^+$ 离子团的含量来代表 F 离子的含量。初步结果显示, 该方法对 F 的仪器检出限小于 8 ng/g。在对加标土壤样品进行固相萃取法 (SPE) 提取和净化处理后, 采用所开发的方法测定最终洗脱液中的总氟含量, 并采用 LC-MS/MS 法定量分析其中常见的添加的 23 种 PFAS。结果表明, 所测样品中的总氟含量约为 23 种 PFAS 化合物的氟含量的 3 倍 (以氟计), 表明这些土壤样品中除包含所添加的 23 种 PFAS 以外, 还包含大量未知的其他 EOF。该方法可以帮助环境调查人员快速筛查 EOF 含量较高的样品, 有针对性地对高含量样品进行重点定性、定量分析和风险评估, 从而提高环境调查与风险评估中 PFAS 的监测与评估效率。

前言

全氟烷基和多氟烷基化合物 (PFAS) 是合成的有机氟化物, 可以耐受高温且不易降解, 广泛应用于化工、纺织、包装、涂料等领域。现有研究表明, PFAS 可对实验动物产生肝毒性、发育和生殖毒性、遗传和免疫毒性以及致癌性^[1]。已知 PFAS 超过 14000 种, 目前正在使用的 PFAS 超过 4000 种, 而且这个数字还在不断扩大^[2]。然而, 现有的 PFAS 定量分析方法主要基于 LC-MS/MS 仪器, 而且能够定量分析的 PFAS 不足已知此类物质总数的 1%^[3]。因此, 为了更全面地研究 PFAS 的环境行为和健康风险, 通常需要综合定量分析和非靶标分析 (NTA) 的结果。测定样品中的 EOF 可快速了解存在的有机氟化合物的含量。当 EOF 浓度较高时, PFAS 的含量可能也较高, 可以对 PFAS 化合物进行进一步定量分析和评估。

常见的氟元素含量分析方法包括燃烧离子色谱 (CIC) 法、粒子诱导伽马射线发射 (PIGE) 法和仪器中子活化分析 (INAA) 法^[4]。ICP-MS/MS 氟元素分析方法于 2015 年首次见诸报道^[5], 近年来得到进一步发展, 应用于检测水、茶叶、药物中的总氟^[6]。在此基础上, 本研究进一步优化了 ICP-MS/MS 方法, 将其应用于测定土壤中 EOF 的总氟含量。

应用 ICP-MS/MS 定量分析 EOF 中的总氟的基本原理如下: 利用高温等离子体使 EOF 化合物中的高能 C-F 键断裂, 并在线添加 Ba 离子溶液以使 Ba 离子与 F 离子形成 $[^{138}\text{Ba}^{19}\text{F}]^+$ 离子簇, 通过测定 $[^{138}\text{Ba}^{19}\text{F}]^+$ 离子簇来代表 F 离子的量。其他干扰离子簇, 如 $[^{138}\text{Ba}^{18}\text{O}^1\text{H}]^+$ 和 $[^{138}\text{Ba}^{16}\text{O}^1\text{H}_3]^+$ 等, 会随 $[^{138}\text{Ba}^{19}\text{F}]^+$ 一同形成。针对这一问题, 可以使用 NH_3/He 混合气体作为反应池气体, 将 $[^{138}\text{Ba}^{19}\text{F}]^+$ ($m/z = 157$) “质量转移” 至 $[^{138}\text{Ba}^{19}\text{F}(\text{NH}_3)_3]^+$ ($m/z = 208$), 而其他干扰离子簇与 NH_3 不反应或反应非常缓慢, 由此消除这些离子簇的干扰 (见图 1)。

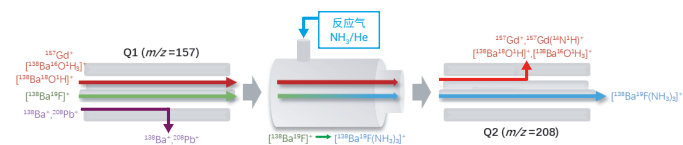


图 1. ICP-MS/MS 在质量转移模式下测定 F 含量的示意图。以 NH_3/He 作为反应池气体, 使 $[^{138}\text{Ba}^{19}\text{F}]^+$ ($m/z = 157$) 反应形成 $[^{138}\text{Ba}^{19}\text{F}(\text{NH}_3)_3]^+$ ($m/z = 208$) 离子簇, 从而间接测定 F

实验部分

试剂和样品

实验中用到的全氟辛酸 (PFOA) 和全氟辛烷磺酸盐 (PFOS) 购自上海安谱世标准技术服务有限公司; 9-氯全氟-3-壬氧基磺酸钾 (6:2 Cl-PFAES, 商品名 F-53B) 和全氟-2-丙氧基丙酸 (HFPO-DA, 商品名 GenX) 购自天津阿尔塔科技有限公司; 17 种 PFAS 标准混合溶液 (17PFAS, 包括 PFBA、PFPeA、PFHxA、PFHpA、PFOA、PFNA、PFDA、PFuDA、PFDoA、PFTrDA、PFTeDA、PFHxDA、PFODA、L-PFBS、L-PFHxS、L-PFOS、L-PFDS、PFCA-MXB) 购自加拿大威林顿实验室公司; 使用 ICP-MS/MS 分析时所用的钡 (Ba, 部件号 5190-8358) 和铋 (Bi, 部件号 5190-8252) 的单元标准溶液, 以及甲醇 (部件号 5190-6896) 来源于安捷伦。使用 LC-MS/MS 定量分析 23 种 PFAS 化合物时, 流动相所用的醋酸铵和乙腈 (部件号 5191-5101-001) 分别由上海安谱实验科技股份有限公司和安捷伦提供。经过 PFAS 加标的工业污染场地的土壤样品由第三方实验室提供。

标准溶液的制备

在用 ICP-MS/MS 定量 EOF 中的总氟含量时, 用 1:1 的纯水-甲醇溶液 (50% MeOH) 作为标准曲线和样品的溶剂。用 PFOA 配制标准曲线工作液, 浓度范围为 0.1–3.5 $\mu\text{g/g}$ (以 F 计)。将钡和铋的单元标准溶液, 用纯水稀释, 配制 Ba-Bi 混合溶液 (100 $\mu\text{g/mL}$ Ba-0.05 $\mu\text{g/mL}$ Bi), 其中 Ba 和 F 在线反应生成 $[^{138}\text{Ba}^{19}\text{F}]^+$ 离子簇, ^{209}Bi 作为内标, 该溶液通过进样三通中的内标管路在线加入到样品中。

土壤样品前处理

取用 4 个工业污染场地的土壤样品, 分别向其中添加含有一定量的 23 种 PFAS 目标化合物的标准溶液。参考 HJ 1334-2023 《土壤和沉积物 全氟辛基磺酸和全氟辛酸及其盐类的测定 同位素稀释/液相色谱-三重四极杆质谱法》^[7], 根据图 2 所示的流程进行 EOF 提取和净化, 然后分别进行 LC-MS/MS 分析^[8]和 ICP-MS/MS (测定 EOF 中的总 F) 分析。

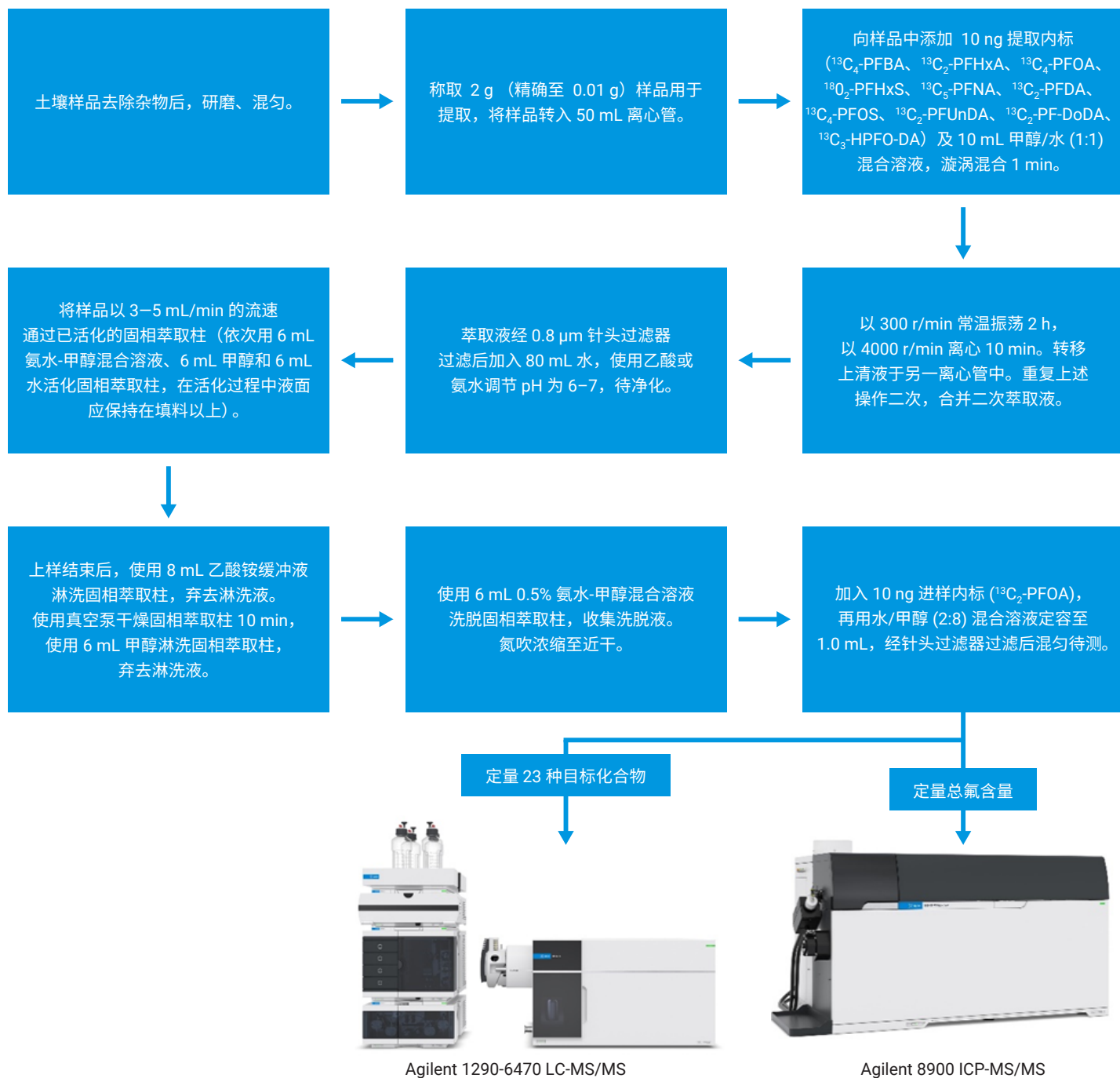


图 2. 土壤样品前处理流程

ICP-MS/MS 仪器设置

采用 Agilent 8900 #100 ICP-MS/MS 系统，配备标准 MicroMist 雾化器、1.5 mm 内径炬管（部件号 G3280-80080）、镍采样锥和截取锥以及 X 透镜。使用蠕动泵进样，针对样品使用 0.76 mm 内径的泵管（部件号 5005-0023），针对 Ba-Bi 混合溶液使用 0.25 mm 内径的泵管（部件号 5005-0021）；两路溶液通过 T 形管组件在线混合，混合比例约为 8:1。

仪器设置旨在保证 50% MeOH 溶液稳定运行，并生成 $[^{138}\text{Ba}^{19}\text{F}]^+$ 离子簇。详细参数列于表 1 中。

表 1. 8900 ICP-MS/MS 仪器参数

参数	数值	单位
RF 功率	1300	W
采样深度	8	mm
雾化气	0.70	L/min
蠕动泵	0.1	rps
雾化室温度	-3	°C
补偿气	0.48	L/min
提取透镜 1	-15	V
提取透镜 2	-135	V
Q1 入口	-40	V
Deflect	-4	V
氦气流量	1	mL/min
第三种气体流量 (NH ₃ /He)	75 (7.5)	% (mL/min)
八极杆偏转电压	-6	V
轴加速	0.2	V
能量歧视	-15	V

由于分析过程中氟的背景信号有累积的趋势，因此需要在样品之间进行较长时间的清洗以降低背景的影响。在样品之间，依次用 2% (v/v) HCl (60 s, 蠕动泵速 0.4 rps)、纯水 (60 s, 蠕动泵速 0.4 rps) 和 50% MeOH 溶液 (40 s, 蠕动泵速 0.4 rps) 进行清洗。另外，需要在分析每个样品前首先分析两次空白溶液 (50% MeOH 溶液)，并将第二次空白分析结果作为本底信号扣除。此外，每隔 3-4 h 进行一次标准曲线校正有助于获得精密度更高的分析数据。表 2 列出了一个测定 EOF 的总 F 含量的典型批处理序列。

表 2. 用 ICP-MS/MS 测定总 F 含量的典型批处理序列

类型	水平	样品名称	备注
Bkgnd		50% MeOH	扣除方法本底空白
CalBlk	1	50% MeOH	标线空白
CalStd	2	PFOA-1	标线浓度 1
CalStd	3	PFOA-2	标线浓度 2
CalStd	4	PFOA-3	标线浓度 3
CalStd	5	PFOA-4	标线浓度 4
CalStd	6	PFOA-5	标线浓度 5
Sample		50% MeOH	作为清洗步骤
Sample		50% MeOH	作为清洗步骤
Sample		50% MeOH	作为清洗步骤
FQBlk		50% MeOH	作为分析空白
Sample		Sample-1	样品 1
Sample		50% MeOH	作为清洗步骤
FQBlk		50% MeOH	作为分析空白
Sample		Sample-2	样品 2
Sample		50% MeOH	作为清洗步骤
FQBlk		50% MeOH	作为分析空白
Sample		Sample-3	样品 3
...		...	

LC-MS/MS 分析方法设置

为了与 ICP-MS/MS 法定量分析 EOF 中的总 F 含量进行对比，采用新近发布的应用报告中的 LC-MS/MS 方法对经过处理的土壤样品中添加的 23 种 PFAS 化合物进行定量分析^[6]。具体色谱和质谱实验条件见附录表 S1、S2 和 S3。

结果和讨论

灵敏度和检出限

在本方法中，PFAS 中 C-F 键的断裂和 $[\text{BaF}]^+$ 离子簇的生成均在等离子体中短时间内完成，等离子体温度影响 $[\text{BaF}]^+$ 和 $[\text{BaOH}]^+$ 离子簇的生成和解离^[9]。使用 NH_3/He 反应气将 $[^{138}\text{Ba}^{19}\text{F}]^+$ ($m/z = 157$) “质量转移”为 $[^{138}\text{Ba}^{19}\text{F}(\text{NH}_3)_3]^+$ ($m/z = 208$)，可大大减少干扰离子簇。仪器参数和状态影响 $[^{138}\text{Ba}^{19}\text{F}(\text{NH}_3)_3]^+$ 信号灵敏度，应用 PFOA 标准溶液建立的标准曲线如图 3(a, b, c) 所示。结果表明，该方法灵敏度范围约为 600-1400 cps/ $\mu\text{g/g}$ ，且校准曲线的 R^2 值大于 0.999，表现出良好的线性；仪器检出限 (DL) 通常在 0.003-0.008 $\mu\text{g/g}$ 范围内，扣除试剂本底空白后的背景等效浓度 (BEC) 通常小于 0.01 $\mu\text{g/g}$ 。灵敏度、DL 和 BEC 会受到仪器状态的影响。如图 3(c, d) 所示，内标元素 Bi 的使用对于 DL 和 BEC 影响较小，主要用于校正样品基体和标准曲线溶液基体之间可能存在的影响 $[^{138}\text{Ba}^{19}\text{F}(\text{NH}_3)_3]^+$ 信号灵敏度的差异。

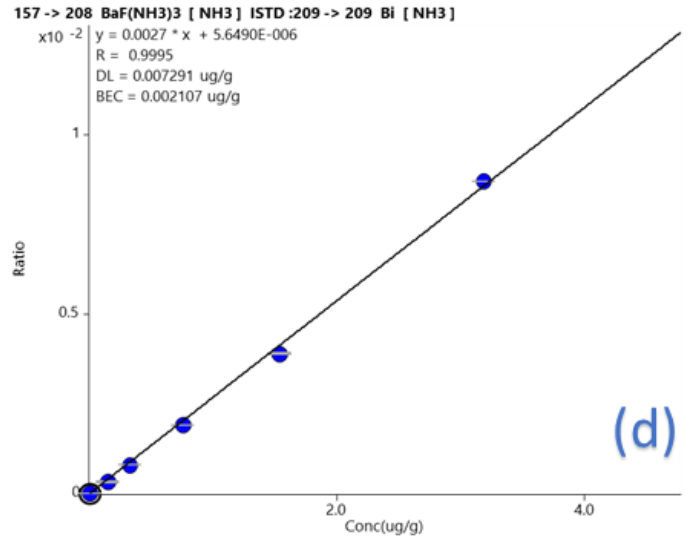
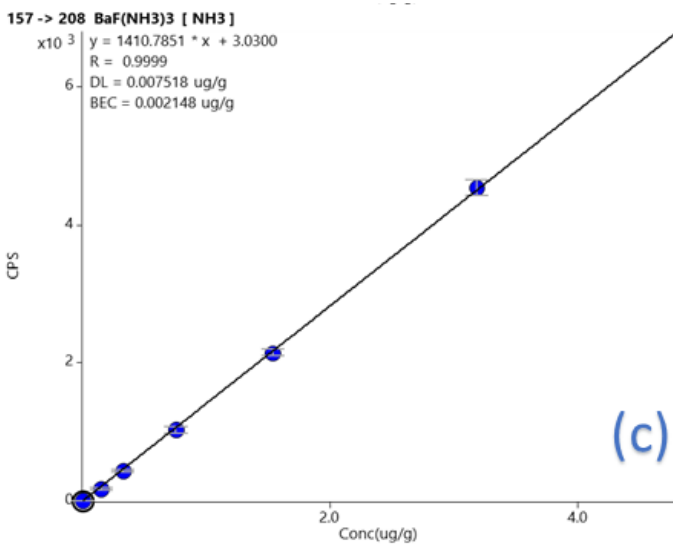
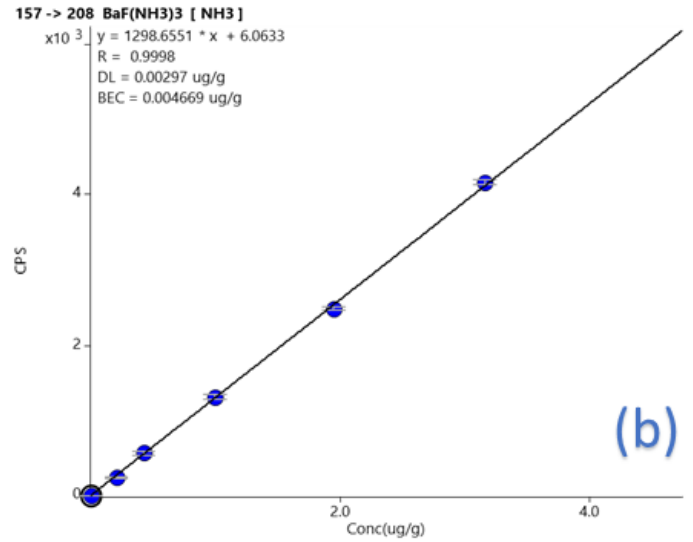
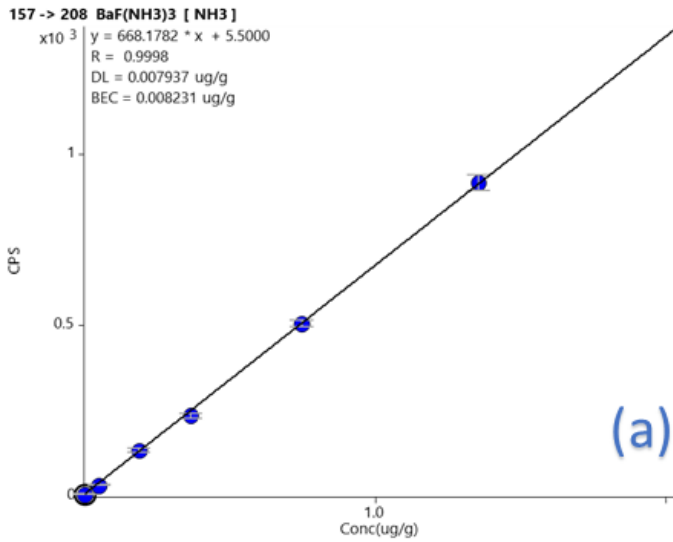


图 3. 使用 ICP-MS/MS 测定 EOF 样品中的总 F 含量的标准曲线。图 3(a, b, c) 展示不同仪器状态下的标准曲线；图 3(c, d) 展示使用内标元素 Bi 对标准曲线的线性影响不显著

ICP-MS/MS 方法的准确度和精密度

为评估 ICP-MS/MS 法测定 EOF 样品中总 F 含量的准确度和精密度，分别用 PFOA、PFOS、6:2 Cl-PFAES、HFPO-DA 和 17PFAS 标准溶液配制 8 个具有不同 F 含量的 PFAS 标准溶液，将这些溶液进样三次，计算 F 实测浓度的平均值和标准偏差 (SD)，并计算回收率。结果列于表 3 中。从表中可以看出，该方法所得 F 的回收率在 91%–111% 之间，表现出良好的准确度。这个结果表明该方法中可以用单一的 PFOA 标准曲线对常见的 PFAS 化合物中的氟元素进行准确的定量。每个分析的样品中 F 实测浓度的相对标准偏差 (RSD) 均小于 10%，其主要受到分析仪器状态的影响。

表 3. ICP-MS/MS 法测定 8 个 PFAS 标准溶液的结果

样品	F 配制浓度 (μg/g)	F 实测浓度 (μg/g)		F 实测浓度 RSD (%)	F 回收率 (%)
		平均值	SD (n = 3)		
PFOA-1	0.158	0.164	0.010	6.1	103.8
PFOA-2	0.338	0.323	0.016	5.0	95.6
PFOS-1	0.220	0.202	0.015	7.4	91.8
PFOS-2	0.471	0.499	0.006	1.2	105.9
6:2 Cl-PFAES	0.397	0.366	0.037	10.0	92.2
HFPO-DA	0.942	0.992	0.087	8.8	105.3
17PFAS-1	0.474	0.455	0.019	4.2	95.9
17PFAS-2	0.768	0.847	0.011	1.3	110.3

土壤样品提取液的 LC-MS/MS 定量分析结果

参照 HJ 1334-2023 方法，土壤样品经过提取后用 Agilent 6470 LC-MS/MS 定量测定 23 种 PFAS 化合物。分析结果列于表 4 中。根据各目标化合物中的 F 含量，可以计算出 4 个加标土壤样品中 23 种 PFAS 化合物的总 F 含量分别为 4288.9 ng/g、4360.3 ng/g、4316.5 ng/g 和 4296.3 ng/g。样品前处理过程中加入的 11 种内标经过同样测定和计算，得到 4 个加标样品中添加的内标化合物的 F 含量范围为 62.9–71.0 ng/g。

表 4. LC-MS/MS 法测定 4 个加标土壤样品中 23 种 PFAS 化合物的结果

目标化合物	化合物浓度				氟含量			
	Soil-1	Soil-2	Soil-3	Soil-4	Soil-1	Soil-2	Soil-3	Soil-4
	ng/g	ng/g	ng/g	ng/g	ng/g	ng/g	ng/g	ng/g
PFBA	4854.0	4906.9	4947.1	4935.4	3016.9	3049.8	3074.8	3067.6
PFPeA	91.3	91.6	89.6	89.1	59.1	59.3	58.0	57.7
PFHxA	75.7	75.1	73.7	73.5	50.4	50.0	49.1	48.9
PFBS	644.1	689.0	660.3	662.8	367.2	392.8	376.4	377.9
HPFO-DA (GenX)	215.9	259.2	193.2	195.6	130.0	156.1	116.4	117.8
PFHpA	75.4	75.8	74.2	69.9	51.1	51.4	50.3	47.5
PFPeS	64.3	66.7	63.8	63.3	38.5	40.0	38.2	37.9
ADONA	49.8	49.3	47.9	45.5	30.1	29.7	28.9	27.4
PFOA	87.5	87.8	87.4	82.0	60.3	60.4	60.2	56.4
PFHxS	80.1	82.8	78.9	77.3	49.4	51.2	48.7	47.7
PFNA	56.5	51.9	52.2	54.2	39.3	36.1	36.3	37.7
PFHpS	55.3	53.3	54.0	53.0	35.1	33.8	34.3	33.7
PFDA	56.7	54.8	53.1	52.8	39.8	38.5	37.3	37.1
PFOS	70.9	69.3	68.4	69.0	45.8	44.8	44.2	44.6
PFUnDA	57.8	57.9	57.1	55.5	40.9	41.0	40.4	39.3
9CL-PF3ONS (F-53B)	57.4	55.9	55.9	54.7	32.8	31.9	31.9	31.2
PFNS	51.4	50.2	50.2	48.5	33.8	33.0	33.0	31.9
PFDoDA	60.5	60.4	58.6	57.0	43.0	43.0	41.7	40.5
PFDS	36.9	37.2	36.8	34.2	24.5	24.7	24.5	22.7
PFTTrDA	43.2	41.5	38.7	38.3	30.9	29.7	27.7	27.4
PFTeDA	57.7	55.1	51.8	48.7	41.5	39.6	37.3	35.0
PFHxDA	31.1	26.1	30.1	31.7	22.5	18.9	21.8	23.0
PFODA	7.9	6.2	7.1	7.5	5.7	4.5	5.2	5.5
PFAS 化合物的氟含量					4288.9	4360.3	4316.5	4296.3
内标的氟含量					65.3	65.2	69.7	71.0
总氟含量					4354.2	4425.5	4386.2	4367.4

土壤样品提取液的 ICP-MS/MS 定量分析结果

使用 ICP-MS/MS 法对上述 4 个加标土壤提取液进行总氟含量测定。提取液经 50% MeOH 溶液稀释 10 倍后上机检测，对三次测定结果取平均值并计算 SD。结果如图 4 所示。从图中可以看出，数据稳定性良好，RSD 小于 2.4%。LC-MS/MS 和 ICP-MS/MS 分析结果对比显示，通过 ICP-MS/MS 法测得的总氟含量约为 23 种得到定量的 PFAS 化合物的总氟含量的 3 倍，表明提取液中有大量含氟化合物未得到定量。这部分未通过 LC-MS/MS 得到定量的 PFAS/EOF 同样可能具有较强的生物毒性，如果在环境健康风险分析中忽略其影响，可能会造成环境健康风险评估结果不够准确。

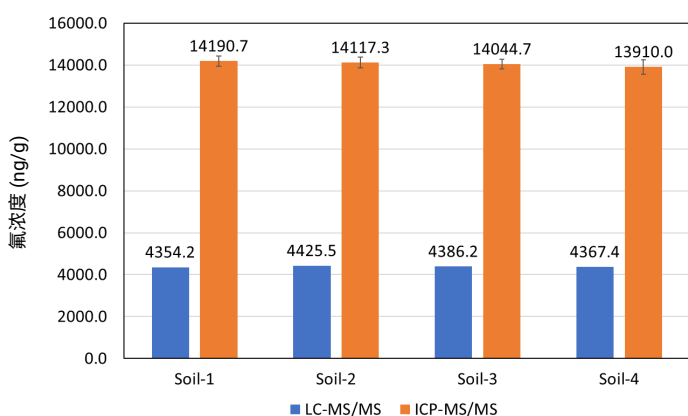


图 4. LC-MS/MS 和 ICP-MS/MS 法测得的经提取土壤样品中 PFAS/EOF 的总氟含量结果对比 (ICP-MS/MS 结果的误差线是 3 次测定结果的 SD)

结论

利用 ICP-MS/MS 能够定量分析全氟/多氟烷基化合物 (PFAS) 中的总氟含量，且分析结果精密度满足环境监测对氟含量测定的需求以及环境科学领域的部分科研需求。污染土壤样品提取液中总氟含量的定量分析结果表明，样品中存在大量未通过 LC-MS/MS 得到定量的 PFAS/EOF。这部分未经定量的 PFAS/EOF 同样可能具有较强的生物毒性，在环境健康风险评估中不容忽视。

ICP-MS/MS 方法可较为便捷地定量分析样品中 PFAS/EOF 的总氟总量，是对现有的 LC-MS/MS 法定量分析 PFAS 化合物含量以及 LC/Q-TOF 法筛查 PFAS 化合物的有效补充。

当前定量分析 PFAS/EOF 中的总氟含量的 ICP-MS/MS 方法还有待进一步完善和验证。结合不同的样品前处理方案，此类 ICP-MS/MS 总氟定量分析方法有望应用于环境、食品、化工等行业污染风险监测中。

参考文献

1. US EPA, 2022, Our Current Understanding of the Human Health and Environmental Risks of PFAS, <https://www.epa.gov/pfas/our-current-understanding-human-health-and-environmental-risks-pfas>
2. U.S. Environmental Protection Agency. Comptox Chemicals Dashboard: Master List of PFAS Substances (Last Updated: August 10th, 2021) https://comptox.epa.gov/dashboard/chemical_lists/pfasmaster
3. Jia S, Marques Dos Santos M, Li C, et al. Recent advances in mass spectrometry analytical techniques for per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS). *Anal Bioanal Chem.* 2022, 414(9): 2795-2807
4. Schultes L, Peaslee GF, Brockman JD, et al. Total Fluorine Measurements in Food Packaging: How Do Current Methods Perform?. *Environ. Sci. Technol. Lett.* 2019, 6 (2), 73-785
5. N. Yamada, 使用 ICP-MS/MS 测定氟的可行性研究, Agilent 8800 和 8900 ICP-MS/MS 应用手册, 2019, 出版号 5991-2802ZHCN
6. Moirana RL, Kivevele T, Mkunda J, et al. Trends towards Effective Analysis of Fluorinated Compounds Using Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry (ICP-MS). *J Anal Methods Chem.* 2021 Feb 2;2021:8837315
7. HJ 1334-2023 《土壤和沉积物 全氟辛基磺酸和全氟辛酸及其盐类的测定 同位素稀释/液相色谱-三重四极杆质谱法》
8. 杨文龙, 朱超飞, 杜兵, 等. 超高效液相色谱串联四极杆质谱法测定地表水中 22 种常见 PFAS, 安捷伦科技公司应用简报, 出版号 5994-8038ZHCN, 2025
9. Zhu Y, Nakano K and Shikamori Y, Analysis of Fluorine in Drinking Water by ICP-QMS/QMS with an Octupole Reaction Cell, *Anal. Sci.*, 2017, 33, 1279-1284

消耗品清单

部件号	产品描述
5190-6896	LC/MS 级甲醇, 标准级
5191-5101-001	InfinityLab 乙腈, 用于 LC/MS, 1 L
5190-8358	钡 (Ba) 标准品, 在 5% HNO ₃ 溶液中含有 10000 µg/mL 的 Ba
5190-8252	铋 (Bi) 标准品, 在 5% HNO ₃ 溶液中含有 1000 µg/mL 的 Bi
G3280-80080	内径 1.5 mm 的一体式石英炬管
5005-0021	0.25 mm 内径的泵管
5005-0023	0.76 mm 内径的泵管
959758-902	ZORBAX RRHD Eclipse Plus C18 色谱柱, 2.1 × 100 mm, 1.8 µm
959941-902	ZORBAX RRHT Eclipse Plus C18 色谱柱, 4.6 × 50 mm, 1.8 µm

附录

表 S1. 液相色谱条件

色谱仪	Agilent 1290 Infinity II 液相色谱系统 (含二元泵、自动进样器和柱温箱)		
色谱柱 (分析柱)	Agilent Eclipse Plus C18, 2.1 × 100 mm, 1.8 µm		
色谱柱 (延迟柱)	Agilent Eclipse Plus C18, 4.6 × 50 mm, 1.8 µm		
流动相	A) 2 mmol/L 乙酸铵水溶液 B) 乙腈		
流速	0.30 mL/min		
柱温	35 °C		
进样量	5.0 µL		
后运行时间	4 min		
梯度	时间 (min)	%A	%B
	0	85	15
	3	70	30
	14	5	95
	16	5	95
平衡时间	4 min		

表 S2. 质谱条件

质谱仪	Agilent 6470 三重四极杆质谱
离子源	安捷伦喷射流电喷雾离子源 (AJS)
电离模式	负离子
毛细管电压	3500 V
喷嘴电压	500 V
雾化器气体 (N ₂) 压力	45 psi
干燥气 (N ₂) 温度	300 °C
干燥气流速	6 L/min
鞘气 (N ₂) 温度	300 °C
鞘气流速	11 L/min
采集模式	dMRM (各化合物的采集参数详见表 S3)

表 S3. 23 种 PFAS 目标化合物和 11 种同位素内标的 dMRM 采集参数

目标化合物	保留时间 (min)	母离子-子离子对 (m/z)	碎裂电压 (V)	碰撞电压 (V)	内标
PFBA	2.85	213.0 → 169.0*/169.0	80	2*/2	¹³ C ₄ -PFBA
PFPeA	5.38	263.0 → 219.0*/219.0	80	2*/2	¹³ C ₂ -PFHxA
PFHxA	6.74	313.0 → 269.0*/269.0	80	2*/2	¹³ C ₂ -PFHxA
PFBS	6.90	299.0 → 80.0*/99.0	180	41*/37	¹⁸ O ₂ -PFHxS
HPFO-DA (GenX)	7.16	329 → 169*/285	61	9*/1	¹³ C ₃ -HPFO-DA
PFHpA	7.88	363.0 → 319.0*/169.0	80	2*/15	¹³ C ₄ -PFOA
PFPeS	8.23	349.0 → 80.0*/99.0	180	40*/30	¹⁸ O ₂ -PFHxS
ADONA	8.29	377.0 → 251.0*/85.0	85	10*/30	¹³ C ₄ -PFOA
PFOA	8.92	413.0 → 369.0*/169.0	90	2*/15	¹³ C ₄ -PFOA
PFHxS	9.37	399.0 → 80.0*/99.0	200	50*/41	¹⁸ O ₂ -PFHxS
PFNA	9.90	463.0 → 419.0*/219.0	90	2*/17	¹³ C ₅ -PFNA
PFHpS	10.39	449.0 → 80.0*/99.0	220	55*/41	¹³ C ₄ -PFOS
PFDA	10.79	513.0 → 469.0*/219.0	100	2*/17	¹³ C ₂ -PFDA
PFOS	11.33	499.0 → 80.0*/99.0	220	65*/49	¹³ C ₄ -PFOS
PFUnDA	11.67	563.0 → 519.0*/269.0	120	5*/20	¹³ C ₂ -PFUnDA
9Cl-PF3ONS	12.04	531.0 → 351.0*/83.0	120	25*/45	¹³ C ₄ -PFOS
PFNS	12.28	549.0 → 80.0*/99.0	240	70*/50	¹³ C ₄ -PFOS
PFDoDA	12.59	613.0 → 569.0*/269.0	120	5*/20	¹³ C ₂ -PFDoDA
PFDS	13.24	599.0 → 80.0*/99.0	240	75*/53	¹³ C ₂ -PFDoDA
PFTTrDA	13.52	663.0 → 619.0*/169.0	140	5*/21	¹³ C ₂ -PFDoDA
PFTeDA	14.17	713.0 → 669.0*/169.0	140	9*/29	¹³ C ₂ -PFDoDA
PFHxDA	14.97	813.0 → 769.0*/169.0	150	10*/30	¹³ C ₂ -PFDoDA
PFODA	15.52	913.0 → 869.0*/269.0	150	10*/29	¹³ C ₂ -PFDoDA
¹³ C ₄ -PFBA	2.85	217.0 → 172.0*/172.0	80	2*/2	
¹³ C ₂ -PFHxA	6.74	315.0 → 270.0*/270.0	80	2*/2	
¹³ C ₄ -PFOA	8.92	417.0 → 372.0*/169.0	90	2*/15	
¹⁸ O ₂ -PFHxS	9.37	403.0 → 84.0*/103.0	200	50*/41	
¹³ C ₅ -PFNA	9.9-	468.0 → 423.0*/219.0	90	2*/17	
¹³ C ₂ -PFDA	10.79	515.0 → 470.0*/219.0	100	2*/17	
¹³ C ₄ -PFOS	11.33	503.0 → 80.0*/80.0	220	65*/49	
¹³ C ₂ -PFUnDA	11.67	565.0 → 520.0*/169.0	120	5*/20	
¹³ C ₂ -PFDoDA	12.59	615.0 → 570.0*/169.0	120	5*/20	
¹³ C ₃ -HPFO-DA	7.16	332 → 287	61	1*	
¹³ C ₂ -PFOA	8.92	415	370*	90	

注：* 指定量离子

查找当地的安捷伦客户中心:

www.agilent.com/chem/contactus-cn

免费专线:

800-820-3278, 400-820-3278 (手机用户)

联系我们:

LSCA-China_800@agilent.com

在线询价:

www.agilent.com/chem/erfq-cn



微信搜一搜

安捷伦视界

www.agilent.com

DE-006981

安捷伦对本资料可能存在的错误或由于提供、展示或使用本资料所造成的间接损失不承担任何责任。

本文中的信息、说明和指标如有变更,恕不另行通知。

© 安捷伦科技(中国)有限公司, 2025
2025年8月18日, 中国出版
5994-8361ZH-CN

