



## 赛默飞色谱及质谱客户解决方案系列

从样品到结果 -PFAS 多维度全流程解决方案



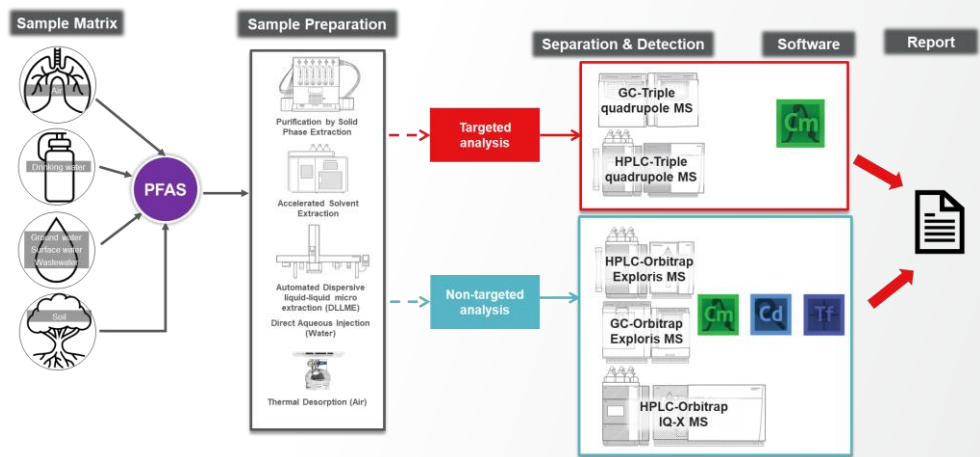
前言

全氟和多氟烷基物质（Per- and Polyfluoroalkyl Substances, PFAS）是一类人工合成的含氟有机化合物，其分子结构中的碳-氟键（C-F）具有极强的化学稳定性，赋予其疏水、疏油、耐高温和抗腐蚀等特性。自20世纪40年代问世以来，PFAS被广泛应用于工业制造和消费品领域，涵盖不粘涂层、消防泡沫、纺织品、食品包装、电子元件等。然而，PFAS的化学稳定性导致其在环境中极难降解，具有持久性、生物累积性和毒性。近30年的科学研究揭示了PFAS对人体健康的潜在危害，包括免疫系统损伤、生殖问题、癌症风险增加等。

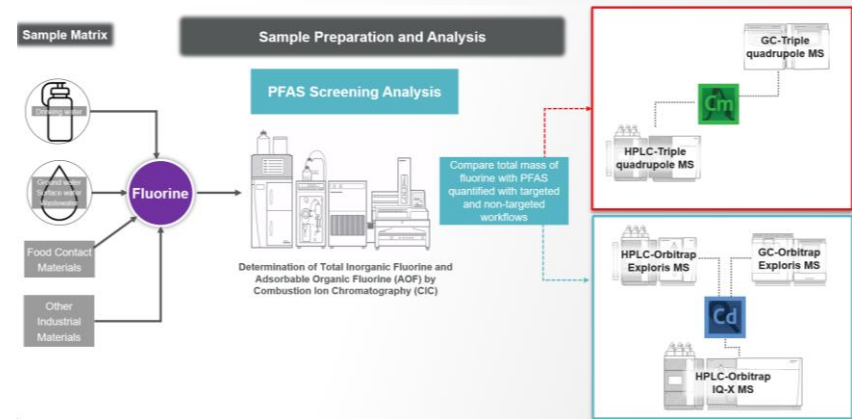
在全球范围内，对PFAS危害的防护受到了高度重视，欧盟、美国等多个国家都陆续出台相关法规和标准，对PFAS的禁用以及监测筛查做出了明确的规定。我国对于PFAS的管控规范可追溯到2013年发布的《中国严格限制的有毒化学品名录》，到2022年，生态环境部发布将PFOS类、PFOA类、PFHxS类等全氟物质列入《重点管控新污染物清单（2023年版）》，除规定用途外，禁止生产加工和使用；再到2024年发布的新污染物生态环境监测标准体系表（2024年版），其中包含11项PFAS标准，2项已发布，9项拟制订。此外，监管部门也发布了各项PFAS检测标准，涉及环境、食品、纺织品、工业制品等多个领域，包括使用固相萃取、液相色谱质谱联用、气相色谱质谱联用以及燃烧离子色谱法等方法对PFAS的检测限度进行了明确的规定。

由于PFAS的化合物种类繁多，包括各类同系物和同源系列物质，以及环境介质中存在的各种前体物质和随着迁移产生的转化产物，虽然目前已发现的PFAS化合物种类已达上万种，但仍是冰山一角；此外，投氟化碳链的长度，可以区分为短链和长链PFAS，短链PFAS通常作为长链PFAS的替代品或降解产物，已在工业中广泛应用，但仍普遍存在毒性和难去除等问题，所以也愈来愈受到关注。因此，由于PFAS的结构复杂性，种类多样性，受基质干扰影响大，对其痕量监测和筛查分析带来了挑战。

赛默飞世尔科技（以下简称“赛默飞”）作为赋能科技进步的全球领导者，在新污染监测方向，具有全面的产品和解决方案，提供符合新质生产力的先进仪器和技术，打造从样品制备到数据解析的一站式平台，覆盖监测、筛查、科研创新及标准制定全场景，结合“样品前处理-靶向定量-非靶筛查-总氟监控”带来端到端的PFAS多维度全流程解决方案。



赛默飞PFAS样品前处理-靶向分析-非靶向筛查解决方案 workflow



赛默飞燃烧离子色谱（C-IC）总有机氟测定，深度筛查PFAS workflow



# 目录

覆盖多介质的自动化前处理：高效净化，消除交叉污染 .....	1
基于 TSQ 三重四级杆质谱平台的 PFAS 超灵敏高效分析 .....	2
Orbitrap 静电场轨道阱技术及产品 .....	3
一机多能 - 基于 Orbitrap 高分辨质谱的新污染物筛查优势 .....	4
C-IC 燃烧离子色谱法，发现更多未知 PFAS .....	5
PFAS 全流程分析专用耗材 .....	6
聚焦于 PFAS 的一站式解决方案 .....	7
赛默飞 PFAS 应用方案矩阵 .....	9
» 应用方案：样品前处理、靶向分析、定量	
• 水质	
分散液液微萃取（DLLME）用于饮用水中 PFAS 的自动化样品前处理 .....	10
TriPlus RSH EQUan 850 系统和 Orbitrap Exploris 120 质谱仪简化水样中新污染物定量 .....	12
AutoTrace 280 自动化固相萃取结合 LC-MS/MS 定量分析 PFAS（EPA 方法 533） .....	13
使用自动化固相萃取和 LC-MS/MS 技术测定饮用水中的 PFAS（EPA 方法 533） .....	14
使用自动固相萃取和 LC-MS/MS 测定饮用水中的 PFAS（EPA 方法 537.1） .....	15
• 土壤、固体	
LC-MS/MS 结合半自动固相萃取净化技术分析土壤样品中的全氟和多氟烷基物质（PFAS） .....	16
从土壤中提取和分析多氟及全氟烷基物质（PFAS） .....	18
• 空气	
TD-GC-MS/MS 分析室内空气中的 PFAS .....	19
热脱附 - 气相色谱质谱法分析空气中的痕量气态全氟烷基和多氟烷基化合物 .....	20
TD-GC-MS/MS 高通量分析环境空气中的中性和离子型全氟及多氟烷基物质（PFAS） .....	21
» 应用方案：靶向分析、定量	
• 环境基质	
基于 TSQ LCMSMS 平台同时分析环境水、土壤中 80 多种 PFAS .....	22
直接进样饮用水进行 54 种 PFAS 化合物的 LC-MS/MS 分析 .....	24
基于 LC-Orbitrap 高分辨质谱联用技术的 EPA 方法 537.1 二次验证研究 .....	25
使用 LC-MS/MS 遵循 EPA 方法 1633 对水样中全氟和多氟烷基物质（PFAS）的定量分析 .....	26
使用 LC-MS/MS 直接分析地下水、地表水和废水中的特定全氟及多氟烷基物质（PFAS） .....	27
赛默飞液质联用系统 TSQ Altis 同时分析检测 17 种全氟化合物 .....	28
• 其他复杂基质	
三重四级杆液质联用测定纺织染整助剂中的 27 种全氟化合物（PFCs） .....	29
使用 AEI 源 -TSQ 9610 三重四级杆气质联用仪测定纺织品中 PFCs .....	30
粒径减小技术对食品接触纸包装材料中 16 种 PFAS 提取和回收率的影响 .....	31
使用 Orbitrap Exploris 120 高分辨率质谱仪检测和定量动物组织中的 PFAS .....	32
HPLC 结合复合模式色谱柱检测极性有机酸 .....	33
离子色谱法直接检测药物中的三氟乙酸 .....	34
离子色谱法测定药物中的三氟甲基磺酸 .....	35
» 应用方案：靶向筛查	
Orbitrap Exploris LC/MS 进行 400 多种新污染物筛查 .....	36
» 应用方案：靶向 / 非靶向筛查同时定量	
自动化在线 SPE 结合 Orbitrap Exploris LC/MS 快速同时筛查定量 300 多种新污染物 .....	38
使用 HRAM Orbitrap 技术与 MS/MS 通过 EPA 方法 537 分析多氟烷基物质的比较 .....	40
通过 Orbitrap Exploris LC 对药品包装和医疗器械中的 PFAS 进行综合筛查 .....	41
基于 SPME Arrow 与 Orbitrap Exploris GC 的环境样品中挥发性 PFAS 分析 .....	42
» 应用方案：非靶向筛查	
用于 PFAS 高置信度识别的综合性非靶向工作流程 .....	43
气质联用结合热脱附技术筛查水成膜泡沫 (AFFF) 使用过程中释放的挥发性 PFAS .....	46
基于高分辨质谱（HRAM）的全氟和多氟烷基物质（PFAS）非靶向分析综合软件工作流程 .....	47
» 应用方案：总有机氟测定	
通过燃烧 - 离子色谱法实现废水中 PFAS 化合物的增强筛查 .....	48
利用 Cindion 燃烧离子色谱系统进行总有机氟分析 .....	49
» 应用方案：数据处理与软件应用	
借助合适的设备和软件，“永久化学品”无需永久分析 .....	50



覆盖多介质的自动化前处理：高效净化，消除交叉污染



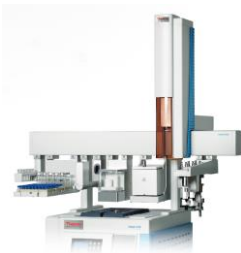
- Dionex™ AutoTrace™ 280 PFAS 自动固相萃取仪
- 管路及样品接触部件PEEK材质，降低本底污染风险
  - 符合标准要求，优于标准限值
  - 正压代替真空，精确的一致性运行
  - 显著节约成本



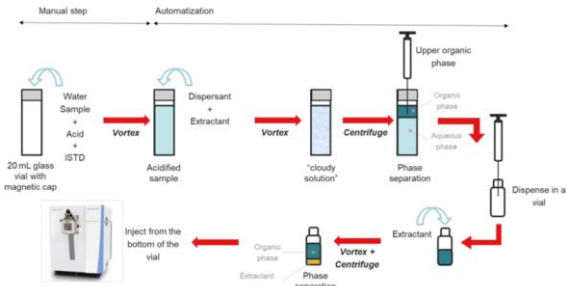
- 赛默飞Extrema™ ASE™加速溶剂萃取仪
- 简化提取和蒸发过程
  - 合并步骤
  - 提高实验室生产力
  - 从样品到进样小瓶的完整工作流程



- 赛默飞TriPlus™ RSH Equan 850 online SPE
- 在线样品固相萃取
  - 大体积进样（20ml）与标准进样量自动切换
  - 自动化、高通量LC-MS解决方案
  - 增加实验灵活性



- 赛默飞TriPlus™ RSH SMART SPME固相微萃取
- 无溶剂萃取和浓缩技术
  - 减少操作人员差异，降低溶剂消耗，减少运行成本
  - 简化样品制备，提高分析效率和样品通量
  - 出色的峰面积重现性



分散液液微萃取（DLLME）样品前处理工作流程

- 样品量少（15 mL）：便于运输与储存
- 成本低：溶剂用量少且无需SPE柱
- 自动化保障重现性，减少交叉污染风险
- 最终浓缩因子达500倍
- 高通量：单样处理时间仅9分钟，
- 兼容多仪器：支持LC-MS或GC-MS联用



# 基于TSQ三重四级杆质谱平台的PFAS超灵敏高效分析



TSQ Altis Plus 三重四级杆液质联用仪



TSQ 9610 三重四级杆气质联用仪

- ✓ 超快扫描速度，超高灵敏度，正负离子快速切换，轻松实现直接进样环境样品中痕量 PFAS 的定量分析
- ✓ 真空锁技术，实现无需停止真空即可直接更换、维护离子源、色谱柱，提升样品通量，提高实验效率
- ✓ Timed-SRM 自动优化化合物检测以获得最大灵敏度，并允许在确保性能的情况下向方法中加入更多化合物
- ✓ 参与 EPA 等国内外监管机构 PFAS 监测标准制定深度合作，提供稳定可靠的定性定量解决方案



**Chromeleon CDS**  
提供企业级仪器控制和数据处理，以及满足任意监管要求的能力  
提供包括PFAS及各类新污染物监测方法包，导入即用



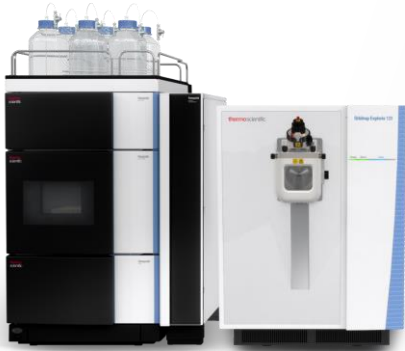
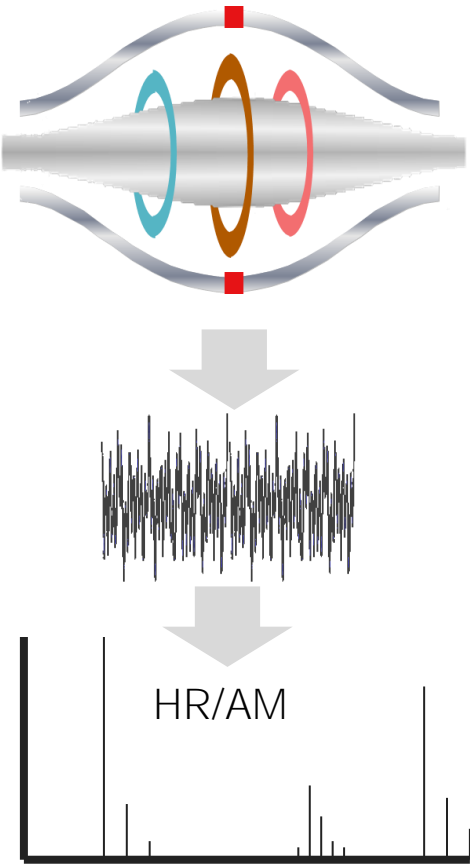
**TraceFinder 软件**  
适用于各类应用的综合定量和靶向筛查工作流程—从方法开发到报告生成



**AppsLab 方法库**  
一个全面的知识库，包括应用方法、数据集和应用文档



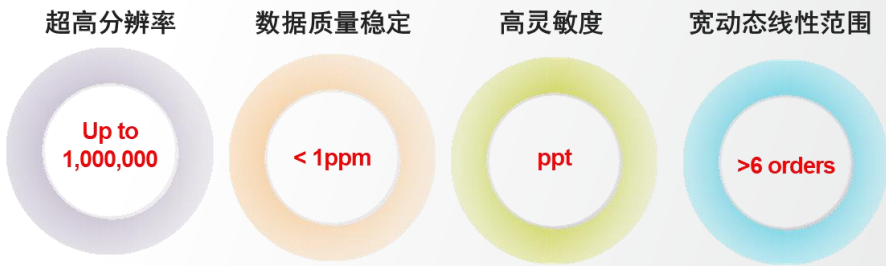
Orbitrap静电场轨道阱技术及产品



Exploris 240  
超高分辨液质联用仪



Exploris GC  
超高分辨气质联用仪



- 
- ✓ >24万 at  $m/z$  200
  - ✓ 分辨率与灵敏度兼得

精准定量

- ✓ 媲美高端三重四极杆
- ✓ FS/tSIM/SRM



可靠定性



深度覆盖



- ✓ 质量数偏差<1 ppm
- ✓ 每张质谱图均符合
- ✓ 所有复杂基质均符合

极高通量

- ✓ 质量轴稳定
- ✓ 无需内标实时校正
- ✓ 无需频繁校正
- ✓ 正负离子同时扫描

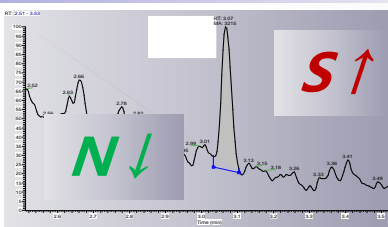




一机多能-基于Orbitrap高分辨质谱的新污染物筛查优势

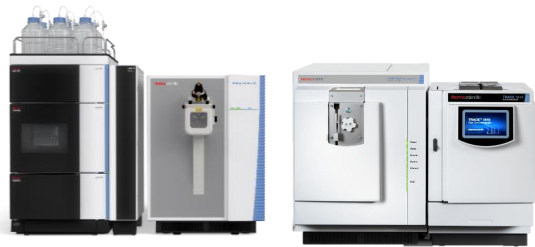
PFAS筛查面临的主要技术挑战

- 环境浓度极低
- 种类繁多，性质各异，
- 样品类型复杂，干扰大
- 未知物确证和鉴定



靶向筛查+非靶向筛查+未知物鉴定+准确定量，尽在Orbitrap

全新Orbitrap Exploris



- 可靠鉴定
- 深度覆盖
- 精准定量

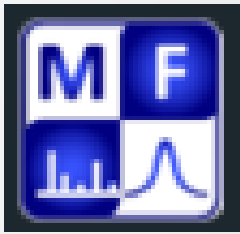
强大的分析软件



TraceFinder



Compound Discoverer

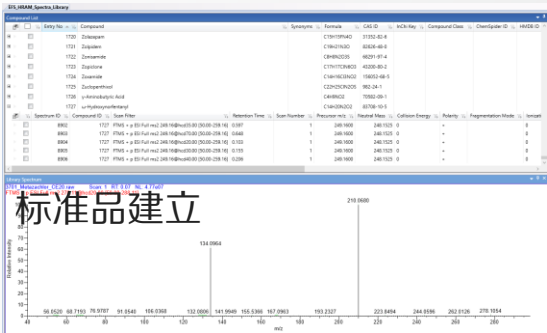


MassFrontier

丰富多样的数据采集模式

- 数据依赖扫描(DDA)
- 数据非依赖扫描(DIA)
- 智能化采集模式-AcquireX
- 平行反应检测(PRM)
- .....

专业的数据库，>32000化合物



Orbitrap，一切改变从科技创新开始。您要着手改变,Or继续等？



# C-IC燃烧离子色谱法，发现更多未知PFAS



- Combustion IC燃烧离子色谱法与质谱方法互补，在定量已知 PFAS 同时，提供非靶向筛查方法，鉴定样品中是否存在未知PFAS
- 经过标准验证-美国 EPA Method 1621可吸附有机氟（AOF）测定法

- ✓ Cindion燃烧模块-全peek管路，确保无氟溶出，提供更低的系统空白
- ✓ 燃烧效率高，保证样品充分燃烧，重复性好
- ✓ 可直接进样，也可通过吸附和萃取模块自动化样品富集，进行可吸附有机氟（AOF）和可萃取有机氟（EOF）测定
- ✓ 同时搭配ASAP自动进样器，自动切换，可同时完成样品中游离氟的检测
- ✓ 全自动化过程，人工干预少，空白低，测定结果准确性高
- ✓ 整套系统由赛默飞单一供应商提供，由Chromeleon色谱数据系统统一控制



# PFAS全流程分析专用耗材



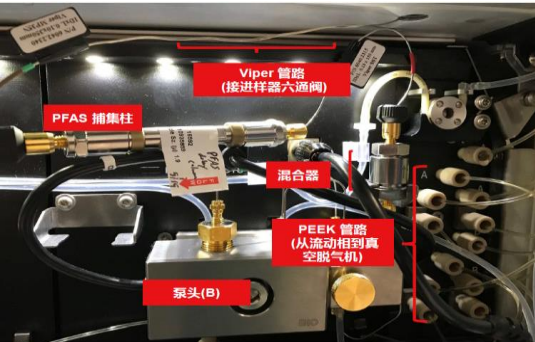
- **HyperSep SPE产品**适用于PFAS样品萃取浓缩，最大程度减少背景污染
- 适用于标准方法：HJ 1333-2023，HJ 1334-2023、EPA 1633、EPA537.1、EPA533
- 提供包括聚合物WAX、HLD（DVB）、GCB 和双层固定相选项
- 满足从饮用水、地下水、地表水、废水、土壤、食品及其他复杂基质中实现萃取



- **适用于不同工作流程的色谱柱**
- Accucore™ C18捕集柱：有助于将背景污染物与样品分析物区分开来
- 液相分析柱：Acclaim™ 120 C18 对PFAS具有出色的峰形、分离度；  
Accucore™ RP-MS 用于少量或洁净样品
- 气相分析柱：TraceGOLD™ TG-200MS为含氟化合物提供了独特的选择性，更适用于靶向分析；  
TraceGOLD™ TG-5SilMS 筛查和未知物鉴定的理想选择



- **PFAS分析专用样品瓶套装**
- 采用不含卤素材料制成，全氟化合物（PFAS）分析专用
- 确保对 PFAS 分析无污染或背景干扰
- 符合监管标准要求
- 多种密封方式选择：螺口瓶套装和卡口瓶套装，适用于单次进样和重复进样

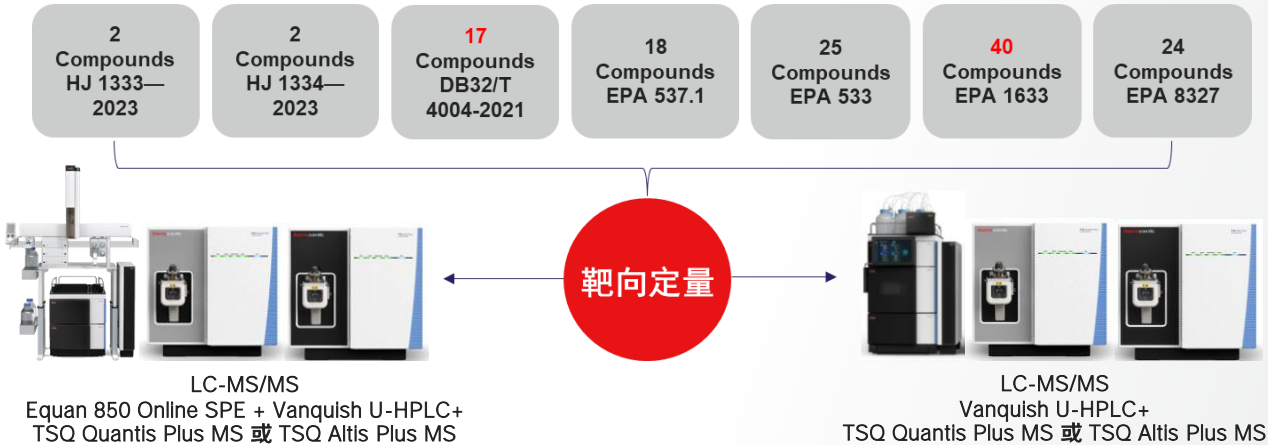


- **PFAS-free Kit和捕集柱**，消除样品制备和仪器的背景干扰
- 包含无氟管材及相应的接头，以及一个 PFAS “延迟” 柱
- 从流动相到真空脱气机管材升级为 PEEK 材质
- PFAS 捕集柱（延迟柱）安装在泵和进样阀之间，消除来自泵、脱气机和流动相中的背景干扰
- 美国 EPA Method 1633 推荐液相配置

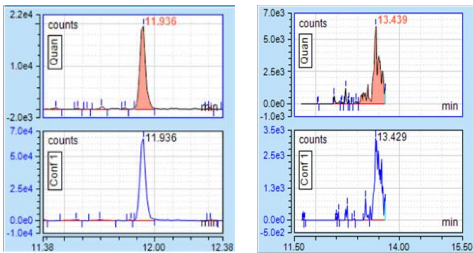


# 聚焦于PFAS的一站式解决方案

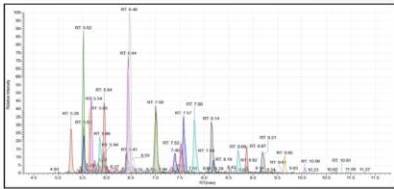
## ● 靶向分析-TSQ三重四级杆液质联用方案



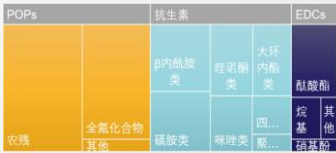
- ✓ 自动化在线SPE，便捷高效，减少误差
- ✓ 同时检测54种 PFAS，PFOA和PFOS等化合物均可实现高灵敏度0.02ng/L痕量分析
- ✓ 可扩展应用于药物和有机污染物
- ✓ 直接进样，无需富集，简单可靠；
- ✓ 同时检测>80种 PFAS，广泛覆盖目前国内外标准中化合物种类，结果优于所有标准限量要求
- ✓ 高通量扩展—30分钟同时分析包含PFAS在内的390种新污染物



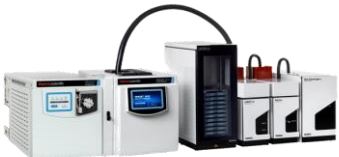
PFOA和PFOS定量限谱图



80多种全氟化合物色谱图

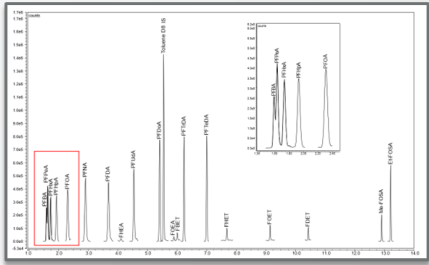


## ● 靶向分析-TSQ三重四级杆气质联用方案



TD热脱附+TSQ 9610 GC-MSMS

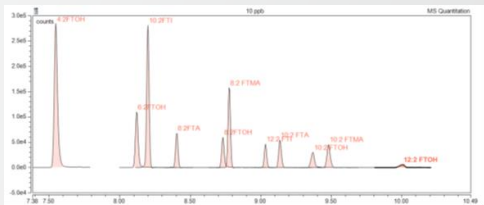
- ✓ TD热脱附结合TSQ 9610三重四级杆气质，14分钟内同时分析19种中性和离子型PFAS，实现ppt级别高灵敏度检测
- ✓ 符合HJ 1392-2024，ASTM D8591-24等国内外标准



- ✓ TSQ 9610-AEI 源测定纺织品中全氟烷基乙醇类、全氟烷基丙烯酸酯类以及氟调聚物磺类PFAS，检出限低至0.01ng/mL
- ✓ 10分钟同时分析10种PFAS，符合GB/T 31126.2-2024，EN 17681-2:2022标准
- ✓ 方法可扩展至塑料，食品接触材料等样品的检测



TSQ 9610 GC-MSMS





# 聚焦于PFAS的一站式解决方案

## Orbitrap高分辨质谱用于未知 PFAS 发现



**Compound Discoverer**  
专业的非靶筛查和鉴定软件

高分辨数据库

利用特征碎片查找具有特定结构特征的全氟及类似物

利用特征中性丢失查找具有特定结构特征的全氟及类似物

利用母体结构查找全氟降解/代谢产物

利用质量亏损查找全氟化合物

利用分子网络查找全氟化合物

Search mzCloud

一个不断更新的数据库，纯标准品建立的多级高分辨数据库，化合物数量>30000

Search ChemSpider

ChemSpider收录81 million化合物结构，针对不同样品可提取适合数据库进行鉴定分析。

Search mzVault

mzCloud数据库本地化，支持自建数据库导入和搜索，EFS相关化合物1600多种。

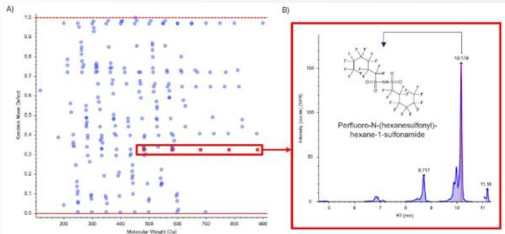
Search Mass Lists

本地列表，全氟及类似化合物4000多个

- ✓ CD软件自带多个未知物查找功能，最大限度解析样品信息
- ✓ CD软件自带非靶向筛查流程，多个数据库相互补充，增加鉴定全面性和准确性



Vanquish U-HPLC + Orbitrap Exploris LC/MS 120/240



## ➤ Orbitrap Exploris LC/MS 高通量筛查方案

- ✓ 高效筛查—同时实现>400种新污染物的靶向筛查，全氟化合物数量>80种
- ✓ CD软件整合文献分析方法、PFAS数据库、正交判别的自定义节点及多样化可视化工具为PFAS非靶向筛查提供简化途径

## ➤ Orbitrap Exploris GC/MS 非靶向筛查方案

- ✓ 全扫描（Full Scan）采集模式，非靶向分析的同时兼顾靶向定量分析，且具有数据回顾性分析能力，对未知样品的鉴定提供更有价值的信息
- ✓ 提供包含超过1700张 EI/CI 谱图的 PFAS 高分辨谱库
- ✓ 检测线低至0.1ng/L，满足各种复杂基质中低水平检测的需求



Orbitrap Exploris GC/MS

## • C-IC燃烧离子色谱测定AOF方案

- ✓ 更先进的 C-IC 工作流程获得更优的结果：MDL：1.7 μg/L、重现性：4.5%RSD、准确度：82–101%，全面优于EPA Method 1633方法标准
- ✓ 高通量—半自动吸附模块，一次同时处理六个水样中的PFAS吸附
- ✓ Chromeleon CDS 统一控制，与 PFAS 的质谱分析数据完全兼容



Cindion™ 燃烧离子色谱+吸附模块



赛默飞PFAS应用方案矩阵

样品基质		应用技术	方案名称	主要仪器
饮用水 非饮用水 土壤 空气 纺织品 包装材料 生物组织 药物		样品前处理 靶向分析 定量 靶向非靶向筛查 总有机氟测定	点击标题跳转相应页面	
●		●	<a href="#">分散液液微萃取（DLLME）用于饮用水中PFAS的自动化样品前处理</a>	TriPlus RSH SMART
●●		●●	<a href="#">TriPlus RSH EQuan 850 系统和 Orbitrap Exploris 120 质谱仪简化水样中新污染物定量</a>	EQuan 850
●		●●	<a href="#">AutoTrace 280自动化固相萃取结合LC-MS/MS定量分析PFAS（EPA 方法 533）</a>	AutoTrace 280 PFAS
●		●●	<a href="#">使用自动化固相萃取和LC-MS/MS技术测定饮用水中的PFAS（EPA 方法 533）</a>	AutoTrace 280 PFAS
●		●●	<a href="#">使用自动固相萃取和LC-MS/MS测定饮用水中的PFAS（EPA 方法 537.1）</a>	AutoTrace 280 PFAS
	●	●●	<a href="#">LC-MS/MS结合半自动固相萃取净化技术分析土壤样品中的全氟和多氟烷基物质（PFAS）</a>	AutoTrace 280 PFAS
	●	●●	<a href="#">从土壤中提取和分析多氟及全氟烷基物质（PFAS）</a>	Extrema ASE
	●	●●	<a href="#">TD-GC-MS/MS分析室内空气中的PFAS</a>	TD-TSQ 9610
	●	●●	<a href="#">热脱附-气相色谱质谱法分析空气中的痕量气态全氟烷基和多氟烷基化合物</a>	TD-ISQ 7610
	●	●●	<a href="#">TD-GC-MS/MS高通量分析环境空气中的中性和离子型全氟及多氟烷基物质（PFAS）</a>	TD-TSQ 9610
●●●●		●	<a href="#">基于TSQ LCMSMS平台同时分析环境水、土壤中80多种PFAS</a>	TSQ Quantis/Altis Plus
●		●	<a href="#">直接进样饮用水进行54种PFAS化合物的LC-MS/MS分析</a>	TSQ Altis Plus
●		●	<a href="#">基于LC-Orbitrap高分辨质谱联用技术的EPA方法537.1二次验证研究</a>	LC-Orbitrap
●		●	<a href="#">使用LC-MS/MS遵循EPA方法1633对水样中全氟和多氟烷基物质（PFAS）的定量分析</a>	TSQ Quantis Plus
●		●	<a href="#">使用LC-MS/MS直接分析地下水、地表水和废水中的特定全氟及多氟烷基物质（PFAS）</a>	TSQ Altis Plus
●		●	<a href="#">赛默飞液质联用系统TSQ Altis同时分析检测17种全氟化合物</a>	TSQ Altis Plus
	●	●	<a href="#">粒径减小技术对食品接触纸包装材料中16种PFAS提取和回收率的影响</a>	LC-Orbitrap
	●	●	<a href="#">使用Orbitrap Exploris 120高分辨率质谱仪检测和定量动物组织中的PFAS</a>	LC-Orbitrap
	●	●	<a href="#">三重四极杆液质联用测定纺织染整助剂中的27种全氟化合物（PFCs）</a>	TSQ Quantis Plus
	●	●	<a href="#">使用AEI源-TSQ 9610三重四极杆气质联用仪测定纺织品中PFCs</a>	TSQ 9610
	●	●	<a href="#">HPLC结合复合模式色谱柱检测极性有机酸</a>	Vanquish UHPLC
	●	●	<a href="#">离子色谱法直接检测药物中的三氟乙酸</a>	Inuvion/Integrion/ICS6000
	●	●	<a href="#">离子色谱法测定药物中的三氟甲基磺酸</a>	Inuvion/Integrion/ICS6000
●●●●	●●●●●●	●●	<a href="#">Orbitrap Exploris LC/MS进行400多种新污染物筛查</a>	LC-Orbitrap
●●		●●	<a href="#">自动化在线SPE结合Orbitrap Exploris LC/MS快速同时筛查定量300多种新污染物</a>	EQuan 850/ LC-Orbitrap
●		●●	<a href="#">使用HRAM Orbitrap技术与MS/MS通过EPA方法537分析多氟烷基物质的比较</a>	LC-Orbitrap
	●	●●	<a href="#">通过Orbitrap Exploris LC对药品包装和医疗器械中的PFAS进行综合筛查</a>	LC-Orbitrap
●		●●●	<a href="#">基于SPME Arrow与Orbitrap Exploris GC的环境样品中挥发性PFAS定量分析</a>	SPME Arrow/ GC-Orbitrap
●●●		●	<a href="#">用于 PFAS 高置信度识别的综合性非靶向工作流程</a>	LC-Orbitrap
●●●●	●●●●●●	●	<a href="#">基于高分辨质谱（HRAM）的全氟和多氟烷基物质（PFAS）非靶向分析综合软件工作流程</a>	LC-Orbitrap
	●	●	<a href="#">气质联用结合热脱附技术筛查水成膜泡沫(AFFF)使用过程中释放的挥发性PFAS</a>	TD-ISQ 7610
●		●	<a href="#">通过燃烧-离子色谱法实现废水中PFAS化合物的增强筛查</a>	Cindion C-IC
	●	●	<a href="#">利用Cindion燃烧离子色谱系统进行总有机氟分析</a>	Cindion C-IC
		●●●●	<a href="#">借助合适的设备和软件，“永久化学品”无需永久分析</a>	



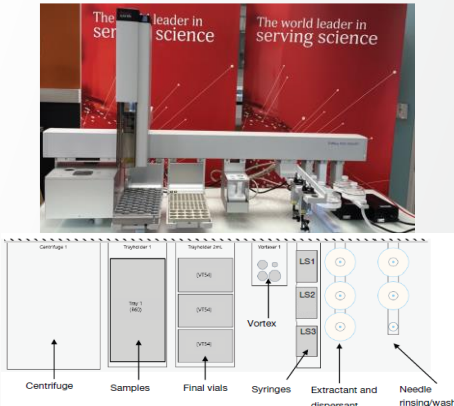
样品前处理

分散液液微萃取-赛默飞TriPlus™ RSH SMART液体处理工作站

分散液液微萃取（DLLME）用于饮用水中PFAS的自动化样品前处理

PFAS萃取与富集最常用的方法是基于混合模式弱阴离子交换填料的固相萃取（SPE）。萃取可通过手动或自动加载柱离线完成，也可通过在线萃取柱实现。SPE的优势在于通过不同化学相互作用高效提取各类PFAS化合物。其缺点在于需特别注意可能由萃取柱、溶剂和管路（自动化或手动操作中）引入的污染源。此外，SPE因每个样品需单独使用萃取柱、溶剂消耗高且操作繁琐，导致分析成本较高。分散液液微萃取（DLLME）使用极少量萃取溶剂，是一种更环保的替代方法。该技术已广泛用于从不同基质中同步萃取与富集多种有机和无机污染物，从而缩短整体分析时间。此外，其易于自动化的特性可提升重现性并减少人为误差。本方案基于LC-MS开发，但相同流程亦可应用于GC-MS。

- ✓ 高通量：高效自动化处理样品，提升生产力并减少人工操作，单样品处理仅9分钟
- ✓ 成本低：溶剂用量少且无需SPE柱
- ✓ 兼容性：支持多种样品瓶类型与尺寸，适用于环境、食品饮料等不同基质
- ✓ 精准进样：确保结果重现性，减少残留并保持样品完整性。
- ✓ 用户友好界面：Chromeleon CDS软件管理流程, 直观操作软件降低学习成本
- ✓ 无缝集成：与GC、LC、MS等分析仪器兼容



图片（上）和原理图（下）独立的TriPlus RSH SMART自动进样器，用于PFAS的自动提取和预浓缩工作流程

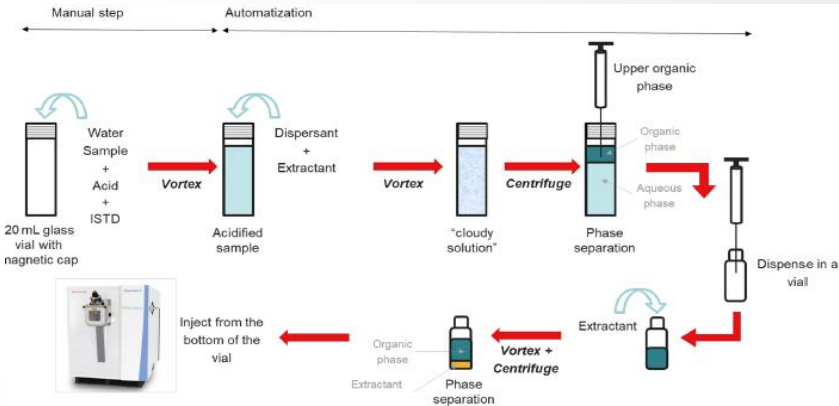
仪器和耗材

硬件组件	部件编号
TriPlus RSH SMART（扩展X轴长度，配置液体进样功能，含1个液体进样工具（0.5–100 μL注射器，57 mm）、1个托盘支架、3个54 × 2 mL样品瓶托盘）	1R77010-2004
自动工具更换站（ATC）	1R77010-1019
组合离心机	1R77010-1193
3 × 100 mL溶剂瓶溶剂站	1R77010-1031
涡旋混合模块	1R77010-1033
大型清洗站	1R77010-1030
托盘支架	1R77010-1021
10/20 mL样品瓶铝制托盘	1R77010-1025
大体积液体进样工具（57 mm针头，250–1000 μL）	1R77010-1009
1 mL FN GT LC针（22 G，57 mm，PTFE针头柱塞）	365K2811-SM
100 μL FN GT针（23 G，侧孔，57 mm，PTFE针头柱塞）	365H2181-SM
台面安装标准支架	1R77010-1111

耗材名称	部件编号
Thermo Scientific™ SureSTART™ 20 mL玻璃螺纹顶空瓶	6ASV20-1
Thermo Scientific™ SureSTART™ 18 mm精密磁性螺纹盖	6PMSC18-ST2
Thermo Scientific™ SureSTART™ 全回收玻璃螺纹微量瓶（<2 mL样品）	6PSV9-TR1
9 mm开顶短螺纹盖（6 mm孔，磁性）	6PMSC9ST1
Thermo Scientific™ SureSTART™ 9 mm螺纹盖	6ASC9ST1G

仪器
Thermo Scientific™ Vanquish™ Flex HPLC 系统
Thermo Scientific™ Orbitrap Exploris™ 240高分辨质谱

前处理步骤



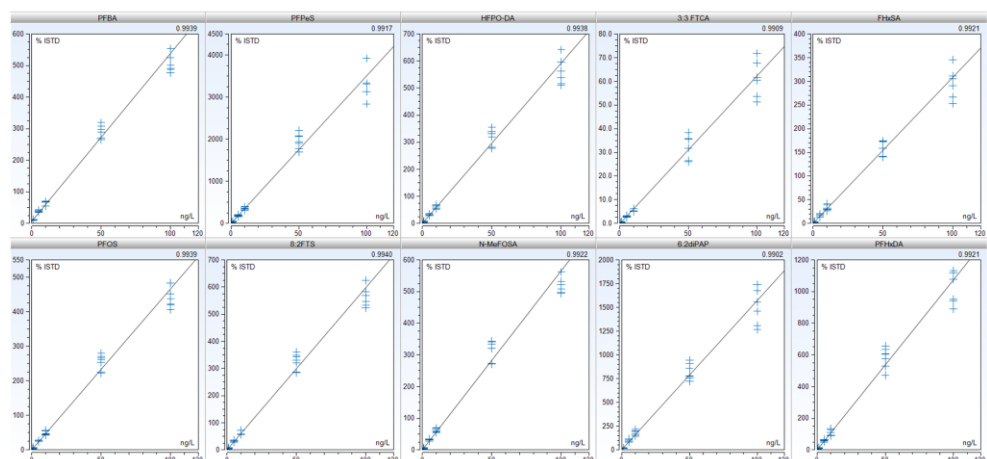
样品准备工作流程和自动化DLLME步骤



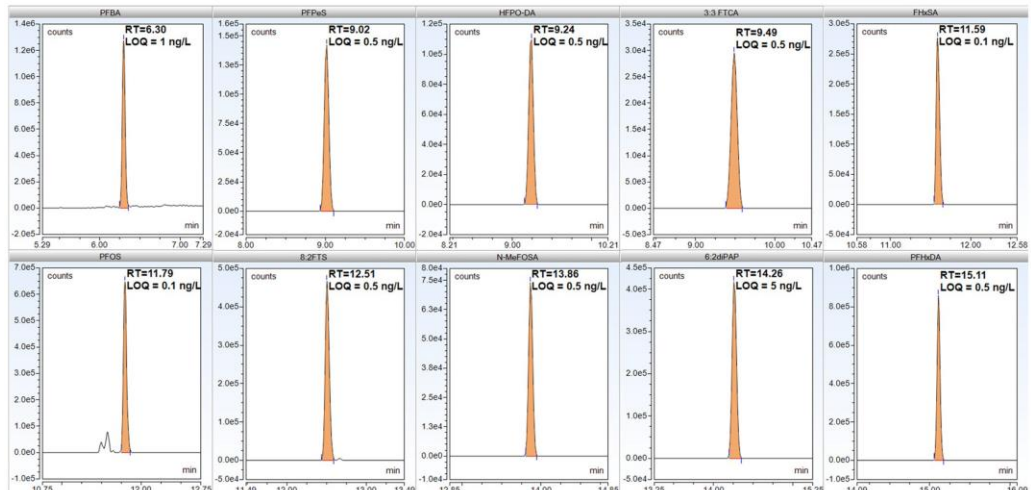
# 样品前处理

## 分散液液微萃取-赛默飞TriPlus™ RSH SMART液体处理工作站

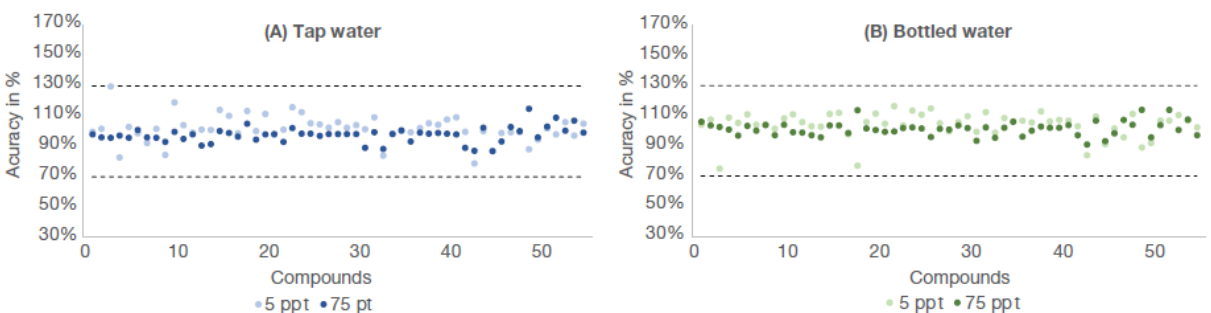
### 结果与数据



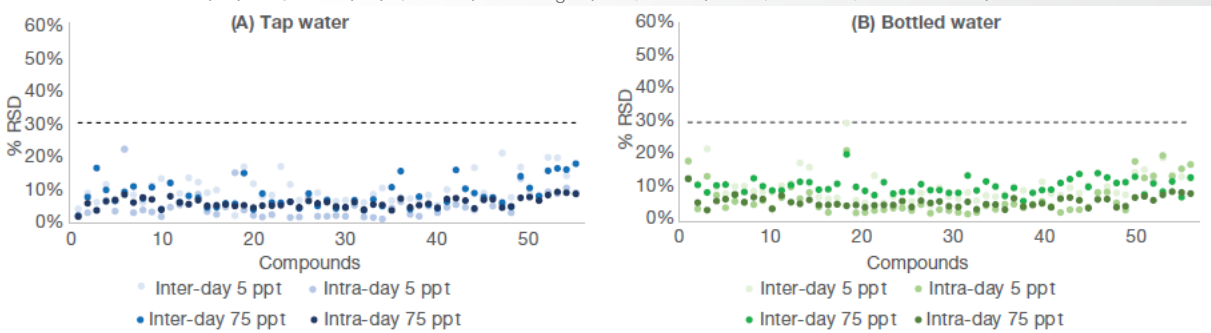
不同类别PFAS化合物的校准曲线示例（3天校准曲线叠加结果，每天至少两个重复）



LOQ水平下的部分色谱图



加标 (A) 自来水与 (B) 瓶装水 (5和75 ng/L) 的准确度 (n=10, 接受标准: 70~130%)



加标样品的日间 (3天, n=10) 与日内 (n=6) 精密度 (接受标准: RSD <30%)



# 样品前处理+靶向分析

## TriPlus RSH EQuan 850在线固相萃取-水质

### TriPlus RSH EQuan 850 系统和 Orbitrap Exploris 120 质谱仪简化水样中新污染物定量

在本方案中，展示了一种快速简化的工作流程，用于通过在 TriPlus RSH EQuan 850 系统上进行在线 SPE 并结合使用 Orbitrap Exploris 120 质谱仪进行痕量定量，分析环境水样中的各种新污染物。展示了一种针对农药验证的多残留方法，并讨论了另外两个分析其他新污染物的应用，全氟和多氟烷基物质 (PFAS) 和非法药物。作为讨论将 SPE 在线集成到工作流程中优势的一部分，提供了一些指标来展示这些方法的定量能力——例如精密度、定量限和基质效应。

- ✓ 与手动 SPE 相比，通过应用在线 SPE 流程，为研究人员显著节省了时间、劳动力和耗材。
- ✓ 在减少复杂环境样品基质带来的基质效应并确保强大重现性的同时，实现了卓越的样品通量。
- ✓ 显著的灵活性，可有效分析农药、非法药物和 PFAS，并具有在不断发展的环境污染物领域中开发其他分析方法的潜力。

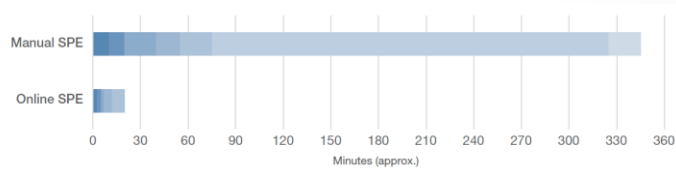


TriPlus RSH EQuan 850-Orbitrap Exploris 120

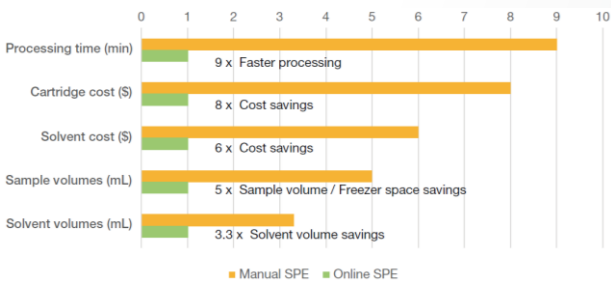
#### 仪器和耗材

- TriPlus RSH EQuan 850 系统
- SPE柱：HLB Direct Connect HP 色谱柱 (2.1 mm × 30 mm, 20 μm)
- 赛默飞世尔科技™ Vanquish™ 四元加载泵，赛默飞世尔科技™ Vanquish™ 二元洗脱泵
- 分析柱：Hypersil GOLD™ C8 色谱柱 (2.1 mm × 50 mm, 1.9 μm)，Accucore™ aQ 极性封端 C18 色谱柱 (2.1 mm × 150 mm, 2.6 μm)
- Orbitrap Exploris 120 质谱仪 (EASY-IC™ 加热电喷雾离子源)
- 软件：TraceFinder™ 5.1 软件

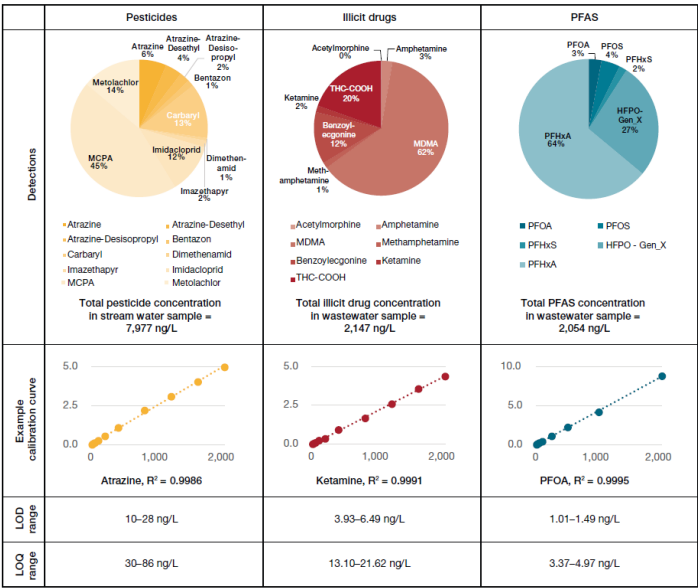
#### 结果与数据



通过手动 SPE 过程与使用 TriPlus RSH EQuan 850 系统的在线 SPE 处理一个样品所需时间的估算



使用 TriPlus RSH EQuan 850 系统的在线 SPE 柱（按值 1 缩放）相对于处理手动 SPE 小柱的效率



各种新污染物的方法性能



# 样品前处理+靶向分析

## Dionex AutoTrace 280 PFAS固相萃取-水质

### AutoTrace 280自动化固相萃取结合LC-MS/MS定量分析PFAS（EPA 方法 533）

本方案通过自动化离线固相萃取结合Thermo Scientific™ TSQ Quantis™ Plus质谱仪的LC-MS/MS技术，遵循EPA Method 533，在250 mL饮用水样品中以2 ng/L（万亿分之一）的灵敏度，可靠测量PFAS（特别是美国EPA在《国家主要饮用水法规》（NPDWR）中管制的六种PFAS）

- ✓ Dionex AutoTrace 280 PFAS自动化SPE精准处理250mL水样，满足ng/L至亚ng/L级PFAS监测需求
- ✓ Vanquish Flex UHPLC系统与TSQ Quantis Plus质谱仪组合，MRL进一步降低至1 ng/L以下
- ✓ Chromeleon CDS内置标准模版，可系统性确保EPA Method 533全流程合规兼容性

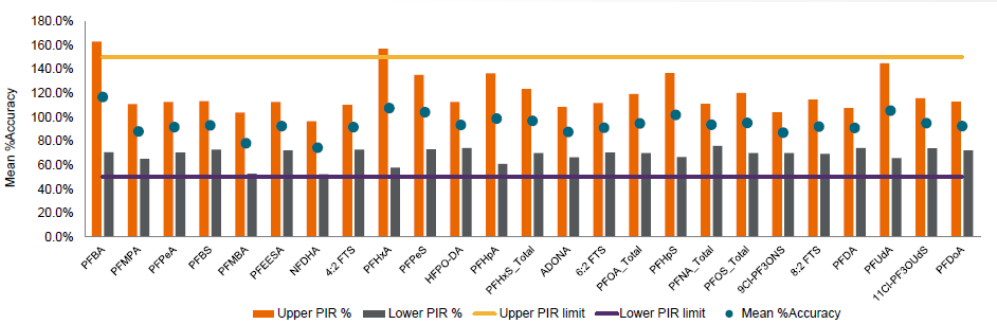


Dionex AutoTrace 280 PFAS固相萃取（左），Vanquish UHPLC + TSQ Quantis Plus（右）

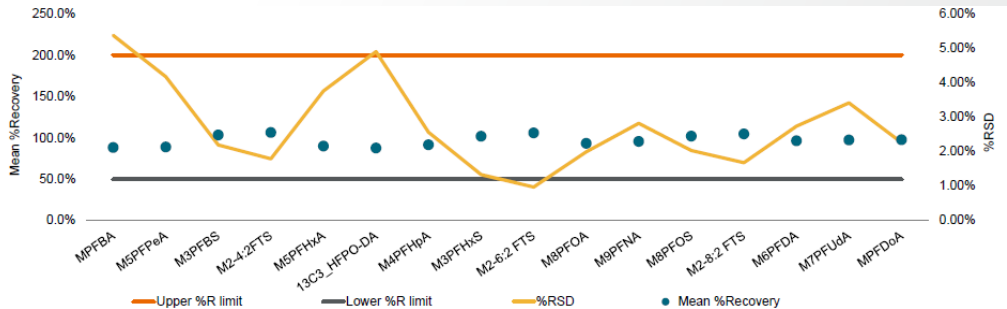
#### 仪器和耗材（所有产品由赛默飞提供）

项目	产品名称及型号	部件号
PFAS延迟柱	Hypersil GOLD™ 3.0×50 mm, 1.9 μm	25002-054630
分析柱	Acclaim™ 120 C18 2.1×50 mm, 2.2 μm	068981
SPE柱（WAX）	PFAS WAX柱（500 mg/6 mL，30支/盒）	5610-2152
收集管	Corning™ Falcon™聚丙烯圆底管（14 mL带盖）	14-959-11B
进样瓶	聚丙烯进样瓶（1.5 mL，螺纹口）	6ESV9-1PP
进样瓶盖	聚丙烯瓶盖（9 mm螺纹）	C5000-50

#### 结果与数据



EPA方法533中目标PFAS在2 ng/L时的MRL确认数据图表



同位素稀释类似物在MRL样品中的平均回收率和%RSD图



# 样品前处理+靶向分析

## Dionex AutoTrace 280 PFAS固相萃取-水质

### 使用自动化固相萃取和LC-MS/MS技术测定饮用水中的PFAS（EPA 方法 533）

本方案展示一种基于PFAS惰性材料的自动化固相萃取-液相色谱串联质谱（SPE-LC-MS/MS）系统，采用赛默飞 Dionex™ AutoTrace™ PFAS自动化固相萃取（SPE）系统，开发了一种基于自动化SPE系统和LC-MS/MS的分析方法，用于测定25种PFAS化合物，符合美国EPA Method 533指南。实验证明，自动化SPE系统可高效测定大体积水样中的PFAS，节省时间、溶剂和人力，同时确保分析实验室的高重现性和生产力。

- ✓ 采用PFAS惰性材料的AutoTrace系统避免了污染，显著提升了分析效率与重现性
- ✓ 低背景、高灵敏度（LCMRL低至2 ng/L）
- ✓ 良好的校准线性（ $r^2 \geq 0.99$ ）、精密度（ $RSD \leq 20\%$ ）和准确度（回收率70–130%）



Dionex AutoTrace 280 PFAS固相萃取（左），Vanquish UHPLC + TSQ Quantis Plus LCMS/MS（右）

#### 推荐仪器和耗材

- Dionex™ AutoTrace™ 280 PFAS（部件号22136-60101，产品型号AT280 PFAS，萃取柱）
- 赛默飞世尔科技™ Vanquish™ Flex超高效液相色谱系统
- 赛默飞世尔科技™ TSQ Quantis Plus 三重四极杆质谱仪
- Organomation Associates™ OA-SYS™加热系统
- 聚丙烯收集瓶，Fisher Scientific（部件号50-809-216）
- SPE萃取柱（0.5 g，6 mL），Dionex™ SolEx™ WAX萃取柱（部件号088115）
- Vanquish™系统（配备PFC-free套件，部件号80100-62142）
- 色谱柱：Acclaim™ 120 C18（2.1 × 150 mm，2.2 μm，部件号071399）
- 色谱柱：Hypersil™ BDS C18（2.1 × 50 mm，5 μm，部件号28105-052130）

#### 自动化固相萃取流程



#### 结果与数据

Number	Analytes	Fortification levels (ng/L)	LCMRL (ng/L)
1	PFBA	1.0, 2.0, 4.0, 6.0, 10, 14, 20	8.6
2	PFMPA	1.0, 2.0, 4.0, 6.0, 10, 14, 20	4.5
3	PFPeA	1.0, 2.0, 4.0, 6.0, 10, 14, 20	3.9
4	PFBS	1.0, 2.0, 4.0, 6.0, 10, 14, 20	3.2
5	PFMBA	1.0, 2.0, 4.0, 6.0, 10, 14, 20	3.9
6	PFEESA	1.0, 2.0, 4.0, 6.0, 10, 14, 20	3.4
7	NFDHA	1.0, 2.0, 4.0, 6.0, 10, 14, 20	5.7
8	4:2 FTS	1.0, 2.0, 4.0, 6.0, 10, 14, 20	7.0
9	PFHxA	1.0, 2.0, 4.0, 6.0, 10, 14, 20	3.2
10	PFPeS	1.0, 2.0, 4.0, 6.0, 10, 14, 20	2.6
11	HFPO-DA	1.0, 2.0, 4.0, 6.0, 10, 14, 20	7.4
12	PFHpA	1.0, 2.0, 4.0, 6.0, 10, 14, 20	3.4
13	PFHxS	1.0, 2.0, 4.0, 6.0, 10, 14, 20	6.5
14	ADONA	1.0, 2.0, 4.0, 6.0, 10, 14, 20	1.6
15	6:2 FTS	1.0, 2.0, 4.0, 6.0, 10, 14, 20, 40	5.7
16	PFOA	1.0, 2.0, 4.0, 6.0, 10, 14, 20	3.9
17	PFHpS	1.0, 2.0, 4.0, 6.0, 10, 14, 20, 40	5.8
18	PFNA	1.0, 2.0, 4.0, 6.0, 10, 14, 20	2.8
19	PFOS	1.0, 2.0, 4.0, 6.0, 10, 14, 20	5.2
20	<sup>13</sup> Cl-PF <sub>3</sub> ONS	1.0, 2.0, 4.0, 6.0, 10, 14, 20	2.9
21	8:2 FTS	1.0, 2.0, 4.0, 6.0, 10, 14, 20, 40	9.5
22	PFDA	1.0, 2.0, 4.0, 6.0, 10, 14, 20	2.1
23	PFUnA	1.0, 2.0, 4.0, 6.0, 10, 14, 20	4.1
24	<sup>11</sup> Cl-PF <sub>3</sub> OUdS	1.0, 2.0, 4.0, 6.0, 10, 14, 20	2.4
25	PFDoA	1.0, 2.0, 4.0, 6.0, 10, 14, 20, 40	4.8

最低浓度最小报告水平

Target Analyte	Reagent water spike at 10 ng/L (Low)		Reagent water spike at 80 ng/L (High)	
	Mean %R	RSD	Mean %R	RSD
PFBA	119	4.5%	94.4	4.1%
PFMPA	106	9.2%	97.8	4.7%
PFPeA	100	5.8%	95.4	8.0%
PFBS	85.9	14%	96.2	9.5%
PFMBA	103	11%	96.3	5.1%
PFEESA	109	3.8%	91.9	4.5%
NFDHA	118	11%	104	2.3%
4:2 FTS	108	14%	95.8	2.4%
PFHxA	110	6.0%	96.0	4.2%
PFPeS	97.6	5.0%	109	7.2%
HFPO-DA	102	18%	100	14%
PFHpA	100	6.7%	90.5	6.2%
PFHxS	111	16%	96.5	8.4%
ADONA	104	1.5%	91.9	5.1%
6:2 FTS	99.0	3.0%	93.8	6.0%
PFOA	123	9.9%	99.9	4.0%
PFHpS	108	12%	105	10%
PFNA	105	3.2%	95.5	3.8%
PFOS	93.4	8.1%	101	8.4%
<sup>13</sup> Cl-PF <sub>3</sub> ONS	107	10%	94.3	6.5%
8:2 FTS	116	14%	107	4.4%
PFDA	106	4.6%	95.9	1.8%
PFUnA	107	9.2%	95.6	1.2%
<sup>11</sup> Cl-PF <sub>3</sub> OUdS	95.1	6.8%	78.9	9.9%
PFDoA	97.9	6.9%	91.4	2.4%

试剂水在不同的加标水平的精密度（RSD）和准确度（%REC）



# 样品前处理+靶向分析

## Dionex AutoTrace 280 PFAS固相萃取-水质

### 使用自动固相萃取和LC-MS/MS测定饮用水中的PFAS（EPA 方法 537.1）

本方案展示通过AutoTrace 280 PFAS系统和LC-MS/MS实现了饮用水中18种PFAS的高效、可靠检测。改进的SPE系统避免了PFAS污染，LC系统隔离柱降低了背景干扰。LCMRL和MDL符合EPA方法537.1要求，加标回收率和精密度验证了方法的可靠性。

- ✓ 溶剂、试剂、容器及SPE仪器的干扰低于MRL的1/3
- ✓ 所有分析物在15分钟内检出，峰不对称因子为0.8–1.2
- ✓ 最低浓度最小报告水平（LCMRL）范围为0.20–3.5 ng/L，方法检测限（MDL）为0.30–2.5 ng/L
- ✓ 加标（16 ng/L和80 ng/L）的回收率为84.1%–123%，相对标准偏差（RSD）<10%

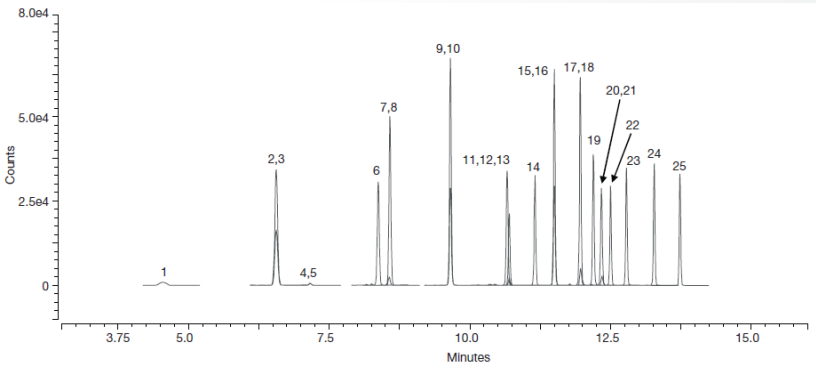


Dionex AutoTrace 280 PFAS固相萃取（左），Vanquish UHPLC + TSQ Quantis Plus LCMS/MS（右）

#### 推荐仪器和耗材

- Dionex AutoTrace 280 PFAS系统
- Thermo Scientific™ Vanquish™ Flex Duo UHPLC系统，配备PFC-free套件（货号80100-62142）
- Thermo Scientific™ TSQ Quantis Plus三重四极杆质谱仪
- SPE柱：0.5 g，6 mL，含苯乙烯-二乙烯基苯（SDVB）聚合物
- 色谱柱：Accucore™ RP-MS色谱柱（2.1 × 100 mm，2.6 μm，货号17626-102130）
- 色谱柱：Hypersil™ BDS C18色谱柱（2.1 × 50 mm，5 μm，货号28105-052130）

#### 结果与数据



4 μg/L标准溶液中PFAS的LC-MS/MS色谱图

Analyte	AutoTrace LCMRL (ng/L) <sup>a</sup>	AutoTrace DL (ng/L) <sup>b</sup>
PFBS	0.30	0.59
PFHxA	0.63	0.44
HFPO-DA	2.2	1.8
PFHpA	0.38	0.42
PFHxS	0.68	0.49
ADONA	0.20	0.30
PFOA	0.59	0.41
PFNA	0.23	0.38
PFOS	0.89	1.2
9Cl-PF3ONS	1.1	0.77
PFDA	0.72	0.75
PFUnA	1.2	0.79
NMeFOSAA	1.5	1.1
11Cl-PF3OUdS	2.1	0.62
NEtFOSAA	3.5	2.5
PFDoA	1.6	0.99
PFTtA	2.6	0.71
PFTA	2.5	0.86

计算得出的最低浓度最小报告限和方法检出限结果

Analyte	Fortified conc. (ng/L)	Mean recovery (%)	RSD (%)	Fortified conc. (ng/L)	Mean recovery (%)	RSD (%)
PFBS	16.0	107	3.3	80.0	98.3	3.6
PFHxA	16.0	108	2.3	80.0	106	2.6
HFPO-DA	16.0	84.1	7.5	80.0	88.6	6.3
PFHpA	16.0	113	2.7	80.0	117	1.3
PFHxS	16.0	120	3.4	80.0	123	2.1
ADONA	16.0	117	2.5	80.0	121	1.1
PFOA	16.0	113	2.5	80.0	119	1.6
PFNA	16.0	114	2.9	80.0	118	2.1
PFOS	16.0	113	4.5	80.0	117	2.9
9Cl-PF3ONS	16.0	96.1	4.1	80.0	103	2.6
PFDA	16.0	105	3.2	80.0	111	2.1
PFUnA	16.0	96.8	5.0	80.0	103	3.1
NMeFOSAA	16.0	103	5.2	80.0	110	5.2
11Cl-PF3OUdS	16.0	88.5	5.5	80.0	97.1	4.8
NEtFOSAA	16.0	100	9.9	80.0	104	2.3
PFDoA	16.0	89.8	4.4	80.0	97.3	3.4
PFTtA	16.0	89.6	3.8	80.0	95.8	3.7
PFTA	16.0	89.0	4.8	80.0	98.1	3.3

加标饮用水中全氟烷基和多氟烷基物质（PFAS）的精密度和准确度（n = 6）

15 参考资料：AN-U.S. EPA Method 537.1Determination of per- and polyfluorinated alkyl substances (PFAS) in drinking water using automated solid-phase extraction and LC-MSMS



# 样品前处理+靶向分析

## Dionex AutoTrace 280 PFAS固相萃取-土壤

LC-MS/MS结合半自动固相萃取净化技术分析土壤样品中的全氟和多氟烷基物质（PFAS）

本方案通过Dionex AutoTrace 280 PFAS SPE仪实现了EPA Method 1633中土壤样品固相萃取（SPE）净化步骤的自动化。该工作流程结合Vanquish Flex二元UHPLC、TSQ Altis Plus三重四极杆质谱仪及Chromeleon色谱数据系统，实现了可重复且精准的样品定量，满足水样和固体样品的法规要求。

- ✓ TSQ Altis Plus质谱仪：适用于多种基质中PFAS高灵敏度靶向检测的三重四极杆质谱仪
- ✓ Dionex AutoTrace 280 PFAS固相萃取仪：兼容EPA Method 1633中规定的SPE洗脱方法，且对40种指定PFAS分析物无污染
- ✓ Chromeleon色谱数据系统：为标准方法提供灵活且全面的方法报告解决方案



Dionex AutoTrace 280 PFAS固相萃取（左），Vanquish UHPLC + TSQ Altis Plus LCMS/MS（右）

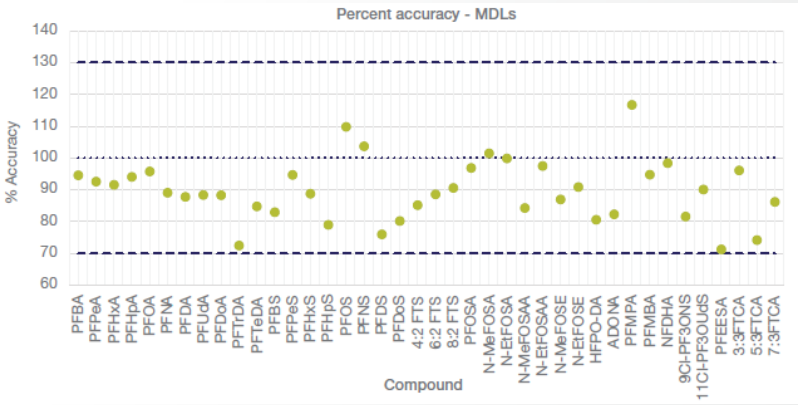
### 仪器和耗材

项目	产品	货号
PFAS延迟柱	赛默飞世尔科技Hypersil GOLD™, 4.6 × 50 mm, 1.9 μm	25002-054630
分析柱	赛默飞世尔科技Acclaim™ 120 C18, 2.1 × 50 mm, 2.2 μm	068981
保护柱*	赛默飞世尔科技Acclaim™ 120 C18, 2.1 × 10 mm, 5 μm	069689
保护柱套件*	赛默飞世尔科技Acclaim™保护柱套件（支架与连接器）V-2	069707
强溶剂环	强溶剂环	6036.22
Dionex AutoTrace 280 PFAS收集瓶	圆底聚丙烯培养管	187261

### 自动化固相萃取流程



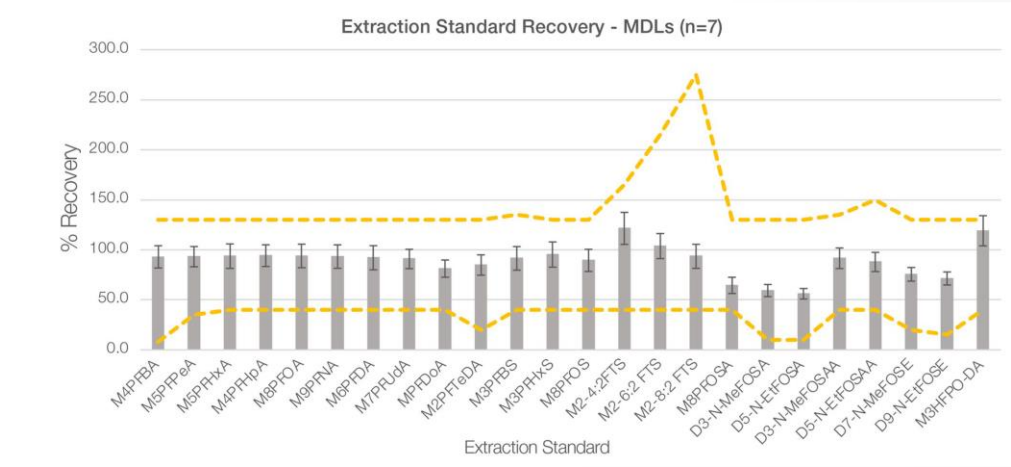
### 结果与数据



基于方法检测限（MDL）样本集（n=7）计算的PFAS分析物的百分比准确度



样品前处理+靶向分析  
Dionex AutoTrace 280 PFAS固相萃取-土壤



从MDL样本集中提取的PFAS替代回收率的平均百分比（n=7）

Surrogate Recovery Report: M8PFOA							
Sequence Details							
Sequence Name:					Created On:		
Directory:		PFAS_Soil			Created By:		
Data Vault:		ChromeleonLocal			Updated On:		
No. of Injections:					Updated By:		
Calibration Source:					cynthia.grim		
Injection Name	Analysis_Type	Spike Amount ng/mL MS Quantitation	Rec. Amt. ng/mL MS Quantitation	Recovered % MS Quantitation	Valid Range MS Quantitation	Outside Limit? MS Quantitation	Manually Integrated? MS Quantitation
MDL 2	Minimum Detection Limit (MDL)	2.5	3.00	119.3	70 - 130		
MDL 4	Minimum Detection Limit (MDL)	2.5	2.25	89.3	70 - 130		
MDL 1	Minimum Detection Limit (MDL)	2.4	2.35	96.2	70 - 130		
MDL 5	Minimum Detection Limit (MDL)	2.5	2.14	86.2	70 - 130		
MDL 7	Minimum Detection Limit (MDL)	2.5	2.25	91.0	70 - 130		
MDL 6	Minimum Detection Limit (MDL)	2.5	2.13	85.3	70 - 130		
MDL 3	Minimum Detection Limit (MDL)	2.4	2.20	89.9	70 - 130		
Number of failed tests:						0	
This page is automatically repeated for all surrogates							

报告模板编辑器中的替代回收率页示例



# 样品前处理+靶向分析

## 加速溶剂萃取结合LC-MS/MS液质联用-土壤

### 从土壤中提取和分析多氟及全氟烷基物质（PFAS）

本方案证明了加速溶剂萃取法适用于从土壤中提取链长范围（C<sub>4</sub>-C<sub>14</sub>）、极性及其官能团多样的PFAS。方法应用于实际土壤样品，结合TSQ Quantis™三重四极杆质谱仪的高灵敏度，检出多种PFAS（1–50 ng/g）。

- ✓ Extrema ASE加速溶剂萃取，所有目标PFAS化合物的回收率为70–130%
- ✓ 适用于从土壤中不同极性及官能团的PFAS，且在宽浓度范围内表现优异
- ✓ TSQ液质平台无与伦比的扫描速度，保证良好峰形和优异的灵敏度、重现性

#### 推荐仪器、软件和耗材

- Thermo Scientific™ Vanquish™ LC（所有Teflon™管线替换为PEEK材质）
- Thermo Scientific™ TSQ Quantis™三重四极杆质谱
- Thermo Scientific™ Extrema™ ASE 加速溶剂萃取仪
- SPE柱：苯乙烯-二乙烯基苯（SDVB）聚合物（500 mg，6 mL）

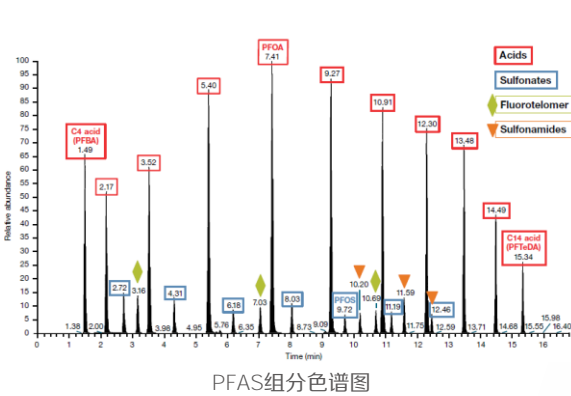


Vanquish UHPLC + TSQ Quantis LCMSMS

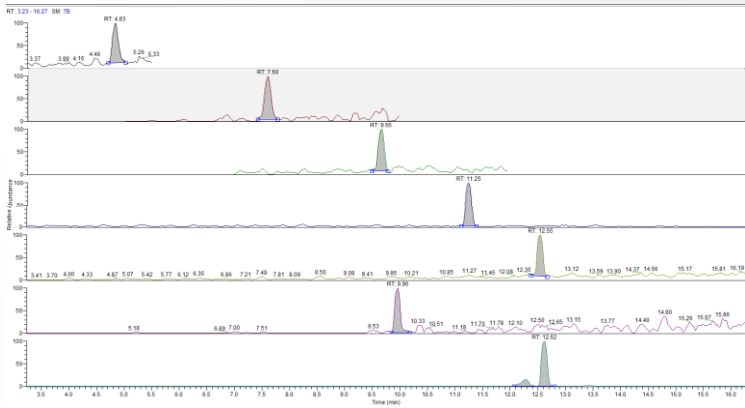


Extrema ASE

#### 结果与数据



PFAS组分色谱图



在土壤样本中发现的含量可观的天然分析物

Compound	Recovery (%)	Compound	Recovery (%)
<sup>13</sup> C <sub>4</sub> -PFBA	71	<sup>13</sup> C <sub>3</sub> -PFBS	98
<sup>13</sup> C <sub>6</sub> -PFPeA	93	<sup>13</sup> C <sub>6</sub> -PFHxS	95
<sup>13</sup> C <sub>6</sub> -PFHxA	97	<sup>13</sup> C <sub>8</sub> -PFOS	91
<sup>13</sup> C <sub>4</sub> -PFHpA	96	<sup>13</sup> C <sub>3</sub> -HFPODA	56
<sup>13</sup> C <sub>8</sub> -PFDA	94	<sup>2</sup> H <sub>3</sub> -NMEFOSAA	93
<sup>13</sup> C <sub>9</sub> -PFNA	104	<sup>2</sup> H <sub>3</sub> -NETFOSAA	90
<sup>13</sup> C <sub>6</sub> -PFDA	99	<sup>13</sup> C <sub>6</sub> -FOSA	92
<sup>13</sup> C <sub>7</sub> -PFUnA	95	<sup>13</sup> C <sub>2</sub> -4:2FTS	110
<sup>13</sup> C <sub>2</sub> -PFDoA	97	<sup>13</sup> C <sub>2</sub> -6:2FTS	93
<sup>13</sup> C <sub>2</sub> -PFTrDA	108	<sup>13</sup> C <sub>2</sub> -8:2FTS	98

PFAS同位素内标物的回收率

Spike level batch	1 ng/g spike		20 ng/g spike	400 ng/g spike	Spike level batch	1 ng/g spike		20 ng/g spike	400 ng/g spike
Units	ng/g	ng/g	ng/g	ng/g	Units	ng/g	ng/g	ng/g	ng/g
PFBA	0.01	0.01	0.05	0.05	NETFOSAA	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.
PFPeA	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.	FOSA	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.
PFHxA	0.01	0.01	0.03	0.04	PFBS	n.d.	n.d.	0.01	n.d.
PFHpA	n.d.	n.d.	0.02	0.01	PFPeS	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.
PFDA	0.01	0.01	0.04	0.04	PFHxS	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.
PFNA	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.	PFHpS	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.
PFDA	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.	PFOS	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.
PFUnA	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.	PFNS	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.
PFDoA	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.	PFDS	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.
PFTEDA	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.	4:2FTS	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.
PFTEDA	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.	6:2FTS	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.
NMEFOSAA	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.	8:2FTS	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.

空白中PFAS的检出量



# 样品前处理+靶向分析

## 热脱附-气相色谱质谱法-空气

### TD-GC-MS/MS分析室内空气中的PFAS

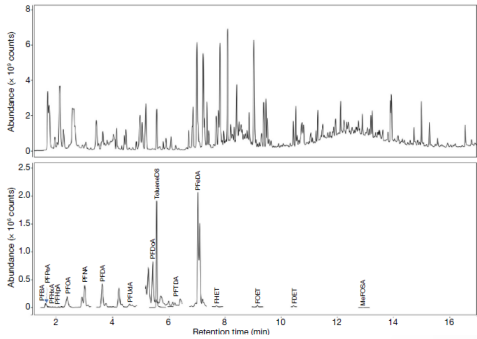
本应用旨在提出一种方法，通过热脱附结合气相色谱-质谱联用技术（TD-GC-MS/MS），对室内空气中四类不同官能团的19种全氟及多氟烷基化合物（PFAS）进行同步分析，包括：全氟烷基羧酸/羧酸盐（PFCAs）、氟调聚醇（FTOHs）、氟调聚羧酸（FTCAs）和全氟辛烷磺酰胺（FOSAs）。此外，还通过Markes International™微型舱/热萃取器（ $\mu$ -CTE™）评估了某常见消费品中PFAS的释放速率

- ✓ TD100-xr与Chromeleon色谱数据系统（CDS）的完全集成化仪器控制
- ✓ 热脱附（TD）采样技术结合配备AEI源的TSQ 9610三重四极杆质谱仪，实现了高灵敏度分析（基于20 L采样体积计算的平均方法检测限（MDL）为780 pg/m<sup>3</sup>）
- ✓  $\mu$ -CTE（微型舱/热萃取器）是分析固体样品的理想工具，显著降低单样品成本，同时提升实验室操作的安全性及便捷性

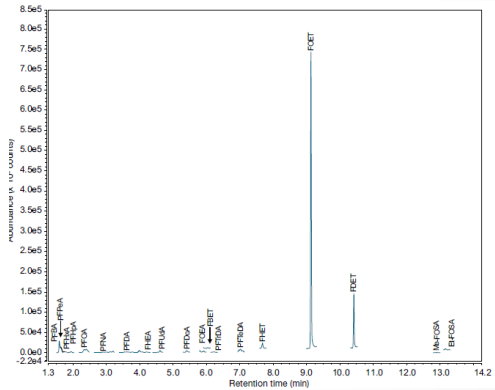
#### 仪器、软件和耗材

- Markes International™ TD100-xr™ Advanced热脱附仪（配备电子流量控制及内部标准添加/干吹扫（ISDP）附件）
- TRACE™ 1610气相色谱仪
- TSQ™ 9610三重四极杆质谱仪（配备AEI源）
- 色谱柱：TraceGOLD™ TG-200MS毛细管柱（30 m × 0.25 mm × 1.0  $\mu$ m）
- 软件：Chromeleon CDS 7.3

#### 结果与数据



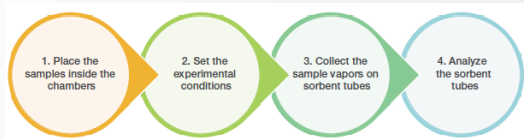
工作场所室内空气样品的全扫描（上图）与t-SRM（下图）采集对比



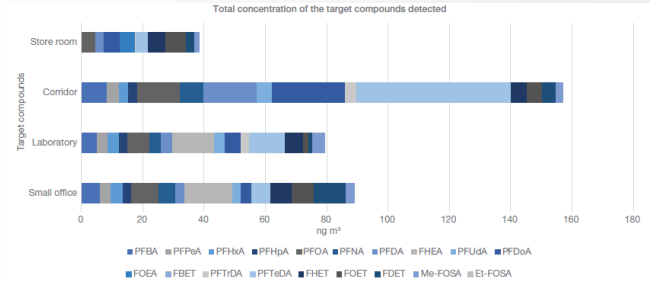
常温下儿童防水外套样品的SRM色谱图。尽管存在其他PFAS，但排放量最高的显然是FTOH 8:2（FOET，全氟辛基碘酸酯）和FTOH 10:2（FDET，全氟癸基碘酸酯）



TD100-xr热脱附仪结合TSQ9610 GCMSMS联用系统



$\mu$ -CTE采样流程（用于儿童防水外套采样）



每个独立工作空间中检测到的每种目标化合物的总浓度。走廊空气中定量测得的PFTeDA（全氟三丁胺）浓度（50 ng/m<sup>3</sup>）对该环境中检测到的总浓度贡献很大

Compound	RT (min)	Amount (ng/g)	Emission rate (ng/g/min)
Perfluoroalkyl carboxylic acids (PFCAs)			
Perfluoro-n-butanolic acid (PFBA)	1.59	0.045	0.002
Perfluoro-n-pentanoic acid (PFPeA)	1.63	0.008	0.000
Perfluoro-n-hexanoic acid (PFHxA)	1.73	ND	ND
Perfluoro-n-heptanoic acid (PFHpA)	1.93	ND	ND
Perfluoro-n-octanoic acid (PFOA)	2.33	0.034	0.001
Perfluoro-n-nonanoic acid (PFNA)	2.89	ND	ND
Perfluoro-n-decanoic acid (PFDA)	3.66	ND	ND
Perfluoro-n-undecanoic acid (PFUdA)	4.60	ND	ND
Perfluoro-n-dodecanoic acid (PFDoA)	5.40	0.006	0.000
Perfluoro-n-tridecanoic acid (PFTrDA)	6.22	ND	ND
Perfluoro-n-tetradecanoic acid (PFTeDA)	6.96	ND	ND
Fluorotelomer carboxylic acids (FTCAs)			
2-Perfluorohexyl ethanol acid (8:2) (FHEA)	3.97	ND	ND
2-Perfluorooctyl ethanol acid (8:2) (FOEA)	5.90	0.126	0.004
Fluorotelomer alcohols (FTOHs)			
2-Perfluorobutyl ethanol (4:2) (FBET)	6.01	ND	ND
2-Perfluorohexyl ethanol (6:2) (FHET)	7.67	ND	ND
2-Perfluorooctyl ethanol (8:2) (FOET)	9.13	3.943	0.131
2-Perfluorodecyl ethanol (10:2) (FDET)	10.41	0.814	0.027
Perfluorooctanesulfonamides (FOSAs)			
N-Methylperfluoro-1-octanesulfonamide Me-(FOSA)	12.88	0.042	0.001
N-Ethylperfluoro-1-octanesulfonamide Et-(FOSA)	13.19	ND	ND

从儿童防水外套中检测到的PFAS及其计算得出的浓度和排放率

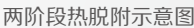


## 热脱附-气相色谱质谱法分析空气中的痕量气态全氟烷基和多氟烷基化合物

- ✓ 证明了 TD-GC-MS 方法和系统在监测痕量 PFAS 浓度的能力
- ✓ 定量再收集和重复分析，对于二阶热脱附验证分析物的回收率有很大帮助
- ✓ 通过检查系统对 PFAS 浓度的贡献（背景或化学反应），发现该化合物在解吸过程中是否有损失



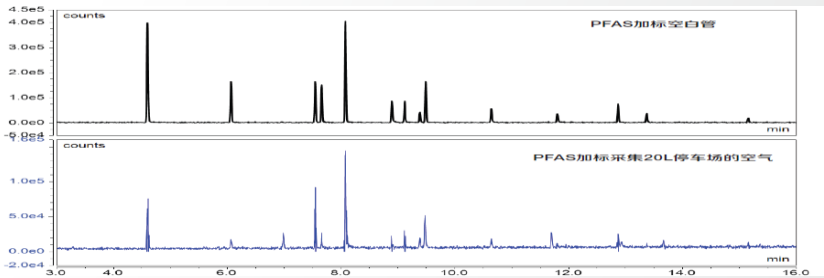
- Markes International™ TD100-xr™ 热脱附仪
- TRACE™ 1610气相色谱仪
- ISQ 7610 气相色谱质谱联用仪
- 色谱柱: TG-200ms 30 m×0.25 mm×1.0 μm PN: 26084-2960
- 软件: Chromeleon CDS

[illegible]

化合物	管内质量	m/z	%RSD (n=5)
全氣烷基羧酸			
PFBA + PFPeA	2 ng/μL	131	4.13
PFHxA			4.19
PFHpA			4.14
PFOA			3.12
PFNA			3.70
PFDA			3.23
PFUdA			4.35
PFDoA			3.55
PFTiDA	12.5 ng/μL	95	3.45
PFTeDA			3.73
含氮調聚物醇			
4:2 FTOH	12.5 ng/μL	95	1.79
6:2 FTOH			2.29
8:2 FTOH			2.45
10:2 FTOH			3.45
含氮調聚物丙烯酸酯			
8:2 FTAcR	16.6 ng/μL	131	2.45
全氣辛烷碳酸酐和全氣辛烷碳酸酐之醇			
N-MeFOSE	16.6 ng/μL	131	1.37
N-MeFOSE			5.80

化合物	平均值	%RSD
<b>全氣烴基羧酸</b>		
PFBA + PFPeA	81.73	2.98
PFHxA	134.16	3.78
PFHpA	109.76	6.53
PFOA	151.53	5.43
PFNA	144.02	1.26
PFDA	102.97	3.09
PFUdA	86.31	4.99
PFDoA	99.03	1.38
PFTrDA	123.45	11.04
PFTeDA	125.14	1.34
<b>含氣調聚物醇</b>		
4:2 FTOH	79.25	4.44
6:2 FTOH	97.59	12.32
8:2 FTOH	111.76	5.36
10:2 FTOH	117.84	1.02
<b>含氣調聚物內烯酸酯</b>		
8:2 FTAc	146.20	4.80
<b>全氣烴基磺胺酸和全氣烴基磺胺酸乙酯</b>		
N-MeFOSA	73.94	12.90
N-MeFOSE	120.60	8.51

两根加标管采集20 L 停车场空气的平均回收率数据



### 加标的非采样管与其中一个 20 L 停车场空气采样加标管的对比示例



# 样品前处理+靶向分析

## 热脱附-气相色谱质谱法-空气

### TD-GC-MS/MS高通量分析环境空气中的中性和离子型全氟及多氟烷基物质（PFAS）

本方案旨在展示一种高通量方法，通过热脱附结合气相色谱-质谱联用技术（TD-GC-MS/MS）同时分析空气中的中性（如FTOH、FOSA）和离子型（如PFCA、FTCA）全氟及多氟烷基物质（PFAS），包括环境空气中19种目标PFAS

- ✓ TD100-xr Advanced结合TRACE 1610 GC和TSQ 9610质谱仪可  
同时分析中性和离子型PFAS
- ✓ 色谱分离时间<14分钟，通量高
- ✓ 定量线性优异（ $R^2 > 0.990$ ），检测限低至31.2 pg/m<sup>3</sup>
- ✓ 样本回收功能支持靶向与非靶向分析



TD100-xr热脱附仪结合TSQ9610 GCMSMS联用系统

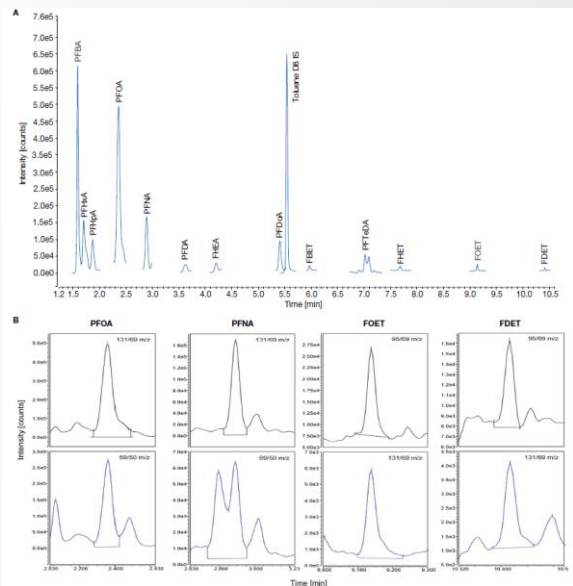
#### 仪器、软件和耗材

- 热脱附仪：Markes International™ TD100-xr™ Advanced，配备电子流量控制和内部标准自动加样（ISDP）模块
- 气相色谱：赛默飞世尔TRACE™ 1610 GC
- 质谱仪：赛默飞世尔TSQ™ 9610三重四极杆质谱仪（AEI源）
- 色谱柱：TraceGOLD™ TG-200MS毛细管柱（30 m × 0.25 mm × 1.0 μm）
- 软件：Chromeleon CDS 7.3

#### 结果与数据

Compound	RT (min)	Quantitation ion (m/z)	Calibration range (pg/μL)	R <sup>2</sup>	Peak area %RSD (n=7)	Calculated MDL (pg)	Calculated MDL (pg/m <sup>3</sup> )
Perfluoroalkyl carboxylic acids (PFCAs)							
Perfluoro- <i>n</i> -butanoic acid (PFBA)	1.59	131/69	10-2000	0.9985	4.52	5	10
Perfluoro- <i>n</i> -pentanoic acid (PFPeA)	1.64	131/69	10-2000	0.9966	3.8	2	4
Perfluoro- <i>n</i> -hexanoic acid (PFHxA)	1.73	131/69	10-2000	0.9970	3.25	23	46
Perfluoro- <i>n</i> -heptanoic acid (PFHpA)	1.93	131/69	10-2000	0.9981	2.42	3	6
Perfluoro- <i>n</i> -octanoic acid (PFOA)	2.31	131/69	10-2000	0.9986	2	2	4
Perfluoro- <i>n</i> -nonanoic acid (PFNA)	2.9	131/69	10-2000	0.9983	1.48	46	95
Perfluoro- <i>n</i> -decanoic acid (PFDA)	3.67	131/69	10-2000	0.9978	2.48	27	54
Perfluoro- <i>n</i> -undecanoic acid (PFUdA)	4.52	131/69	10-2000	0.9974	3.67	4	8
Perfluoro- <i>n</i> -dodecanoic acid (PFDoA)	5.39	131/69	10-2000	0.9975	2.71	21	42
Perfluoro- <i>n</i> -tridecanoic acid (PFTriDA)	6.22	131/69	10-2000	0.9974	3	3	6
Perfluoro- <i>n</i> -tetradecanoic acid (PFTeDA)	6.98	131/69	10-2000	0.9975	3.01	2	4
Fluorotelomer carboxylic acids (FTCAs)							
2-Perfluorohexyl ethanoic acid (6:2) (FHEA)	3.97	131/69	100-5000	0.9953	5.75	64	128
2-Perfluorooctyl ethanoic acid (8:2) (FOEA)	5.9	131/69	100-5000	0.9983	2.65	62	104
Fluorotelomer alcohols (FTOHs)							
2-Perfluorobutyl ethanol (4:2) (FBET)	6.01	95/69	10-5000	0.9951	4.1	13	26
2-Perfluorohexyl ethanol (6:2) (FHEt)	7.67	95/69	10-5000	0.9971	2.61	18	36
2-Perfluorooctyl ethanol (8:2) (FOET)	9.12	95/69	10-5000	0.9963	3.99	4	8
2-Perfluorodecyl ethanol (10:2) (FDEt)	10.41	95/69	10-5000	0.9937	4.08	6	12
Perfluorooctanesulfonamides (FOSAs)							
<i>N</i> -Methylperfluoro-1-octanesulfonamide Me-(FOSA)	12.87	94/30	10-5000	0.9953	0.83	1	2
<i>N</i> -Ethylperfluoro-1-octanesulfonamide Et-(FOSA)	13.18	108/80	10-5000	0.9953	5.29	1	2

目标化合物列表以及保留时间（RT）、定量离子、相关系数（ $R^2$ ）、峰面积相对标准偏差（%RSD,  $n = 7$ ）和计算得出的方法检出限（MDLs）



在轻度工业场所采集的环境空气中XIC（提取离子色谱图）（A）以及部分检测到的化合物的SRM转换（B）



# 靶向分析

## LC-MS/MS液质联用-新污染物高通量靶向定量

基于TSQ LCMSMS平台同时分析环境水、土壤中80多种PFAS

- ✓ 本方案采用一根色谱柱，两种色谱条件，一针进样15min，可实现近400种新污染物的定量分析，其中 PFAS 超过 80 种
- ✓ 无与伦比的扫描速度（600SRM/S），低浓度水平下，正负离子同时检测，保证良好峰形和优异的灵敏度、重现性
- ✓ 方法操作简单、灵敏度高、专属性强，通量高，可以快速定量环境中的新污染物
- ✓ 各组分在曲线范围内线性关系良好，相关系数（r<sup>2</sup>）均大于0.99，检出限为0.005~1ng/mL，定量下限为0.01~3ng/mL
- ✓ 环境水直接进样分析，适用基质：饮用水、地表水、地下水、生活污水、工业废水、土壤

### 仪器、软件和耗材

- Thermo Scientific™ Vanquish Flex UHPLC
- Thermo Scientific™ TSQ Altis Plus/Quantis Plus LCMSMS ( HESI)源
- Trap 柱：C18 2.2 um, 2.1\*50 mm
- 分析柱：C18 2.2 um, 2.1\*150 mm
- Tracefinder 5.2 软件



Vanquish UHPLC + TSQ plus LCMSMS

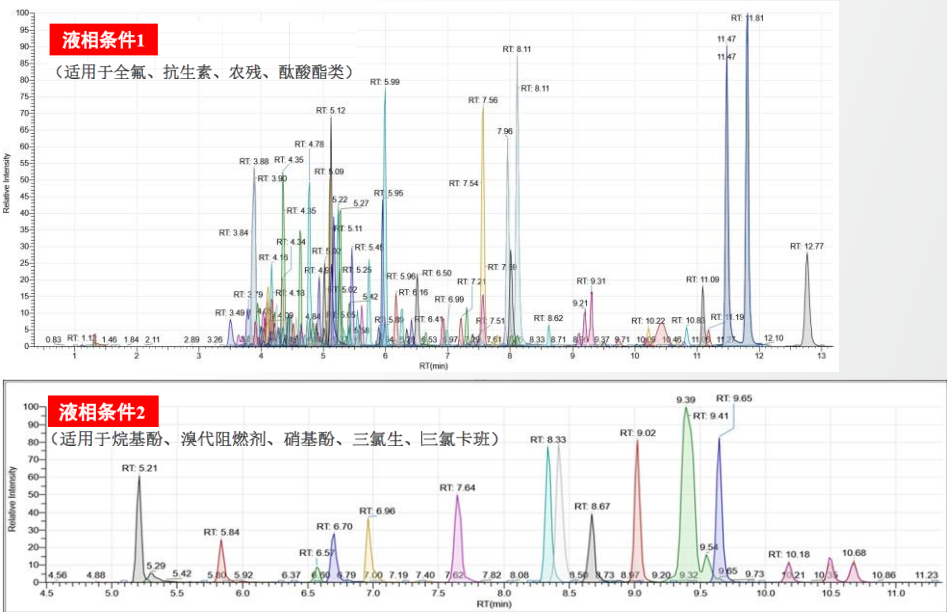
### 监测项目来源

- 《关于持久性有机污染物的斯德哥尔摩公约
- 《重点管控新污染物清单（2023年版）》
- 《第一批化学物质环境风险优先评估计划》
- 《优先控制化学品名录（第一批）》
- 《优先控制化学品名录（第二批）》
- 《生态环境部和地方标准》

LC-MS/MS

89种POPs	PFOS类、PFOA类、PFHxS类、五氯苯酚
42种EDCs	烷基酚类、硝基酚类、酞酸酯类、尼古丁、三氯生、三氯卡班、四溴双酚A、六溴环十二烷、十氯酮
130种抗生素	喹诺酮类、咪唑类、聚醚类、磺胺类、四环素类、大环内酯类、β内酰胺类
35种阻燃剂	溴代、磷系阻燃剂
89种其他	苯氧羧酸类除草剂、氨基甲酸酯类农药、有机磷三唑类农药、磺酰脲类除草剂、丙烯酸酯、三聚氰胺、可替宁

### 结果数据



总离子流图

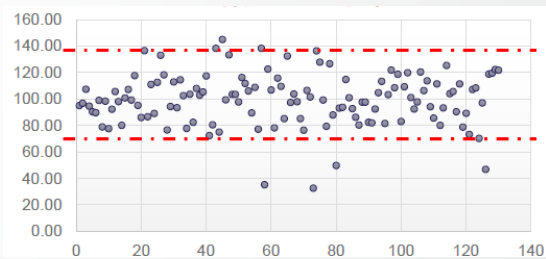
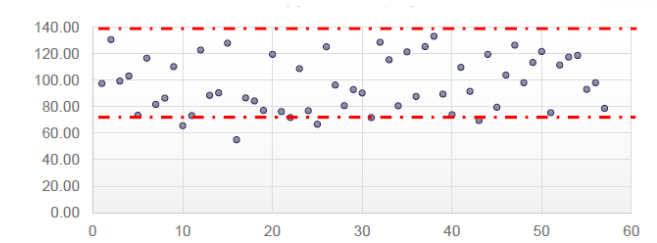


# 靶向分析

## LC-MS/MS液质联用-新污染物高通量靶向定量

Compound	Linear equation	Linear range/ (ng/mL)	r2	LOD/ (ng/mL)	LOQ/ (ng/mL)
全氟辛酸	Y=2.429e5X-1.205e4	0.05~10.0	0.9999	0.010	0.050
全氟丁烷磺酸	Y=2.252e5X+9.485e2	0.01~10.0	0.9999	0.005	0.010
全氟辛烷磺酸	Y=1.223e5X+5.994e4	0.05~10.0	0.9986	0.010	0.050
全氟辛基磺酰氟	Y=6.317e3X+2.758e3	0.05~10.0	0.9987	0.010	0.050
全氟辛烷磺酸钾	Y=1.189e5X+4.799e4	0.05~10.0	0.9994	0.010	0.050
诺氟沙星	Y=1.515e3X-5.846e2	0.50~100	0.9980	0.100	0.500
环丙沙星	Y=9.191X-1.757	0.20~100	0.9963	0.100	0.200
恩诺沙星	Y=4.49e3X-2.152e3	0.50~100	0.9914	0.100	0.500
磺胺嘧啶	Y=5.284e3X+1.23e1	0.05~100	0.9982	0.010	0.050
磺胺噻唑	Y=5.146e3X+1.809e2	0.05~100	0.9964	0.010	0.050
磺胺二甲嘧啶	Y=9.612e3X+1.144e3	0.10~100	0.9972	0.050	0.100
克百威	Y=5.949e3X+1.885e1	0.01~50	0.9992	0.005	0.010
涕灭威	Y=3.436e3X-4.535e2	0.01~50	0.9964	0.005	0.010
四环素	Y=5.808e4X+3.484e3	0.50~50	0.9915	0.100	0.500
土霉素	Y=1.801e4X+3.864e3	0.10~100	0.9986	0.050	0.100
头孢他美酯	Y=3.656e3X-5.722e4	0.01~50	0.9997	0.050	0.100
头孢匹林纳	Y=8.746e3X+3.471e3	0.50~50	0.9965	0.100	0.500
头孢拉定	Y=1.741e4X-4.344e3	0.10~100	0.9985	0.100	0.500
四溴双酚 A	Y=6.616e3X+1.204e3	0.05~100	0.9920	0.010	0.050
壬基酚	Y=1.373e4X+2.461e2	0.10~100	0.9977	0.050	0.100

部分化合物的线性方程、线性范围、相关系数、检出限及定量下限



57种全氟回收率（左），130种抗生素回收率（右）  
91%的回收率在70%~130%之间



## LC-MS/MS液质联用-生活饮用水

本方案通过Thermo Scientific™ TSQ Altis™ Plus三重四极杆质谱仪，验证直接进样法对水样中全氟及多氟烷基化合物（PFAS）的定量检测能力，确保符合现行法规报告要求，通过直接进样100 µL水样，结合TSQ Altis Plus质谱仪的高灵敏度，成功实现54种PFAS在ng/L级别的定量分析。优化后的工作流程（包括延迟柱、定制进样程序和专用耗材）有效解决了污染与溶解度问题，显著提升了实验室通量。

- ✓ 简单、可重复且稳健的样品前处理：通过将样品与流动相稀释后直接进样，减少了传统SPE浓缩方法所需的人力、误差和潜在污染风险
- ✓ 完整的PFAS工作流程解决方案，通过梯度洗脱实现了4至20碳链PFAS的分离
- ✓ 专用仪器设置与样品处理程序：针对灵敏度、污染和残留问题进行了优化设计
- ✓ 灵敏度与线性：LOQ为0.1–5 ng/L，线性范围0.1–100 ng/L， $R^2 > 0.99$

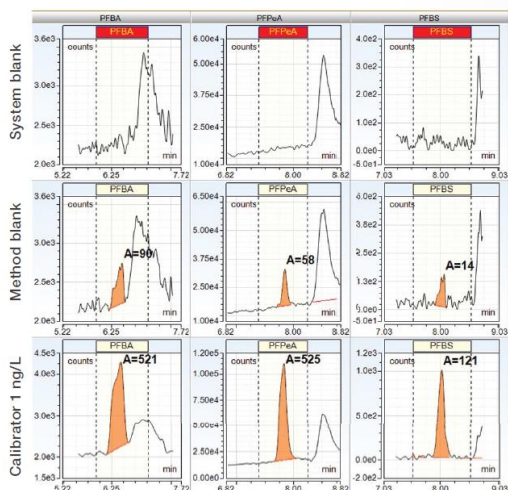


Vanguard UHPLC + TSQ Altis Plus LCMSMS

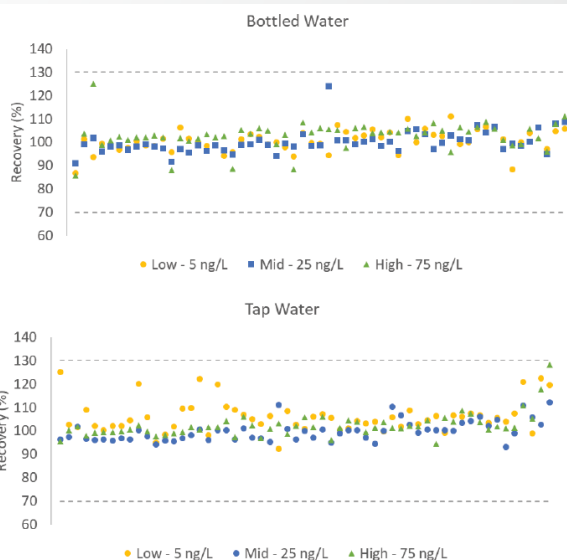
- Thermo Scientific™ Vanquish™ Flex二元超高效液相色谱系统
- Thermo Scientific™ TSQ Altis™ Plus三重四极杆质谱仪 (HESI)
- 延迟柱: Acclaim™ 120 C18, 50×2.1 mm, 2.2 μm
- 分析柱: Acclaim™ 120 C18, 150×2.1 mm, 3 μm
- 软件: Chromeleon CDS 7.3.2

[illegible]

5ng/L标准品中54种化合物的色谱图



系统空白、方法空白和1ng/L校准标准品的色谱图（部分）



在加标瓶装水(A)和自来水(B)中分析的所有54种PFAS的平均回收率( $n=7$ ), 分为低(5 ng/L)、中(25 ng/L)和高(75 ng/L)水平



# 靶向分析

## Orbitrap Exploris LC/MS高分辨液质-生活饮用水

### 基于LC-Orbitrap高分辨质谱联用技术的EPA方法537.1二次验证研究

本方案展示通过使用Orbitrap™高分辨率质谱技术替代传统的三重四极杆质谱仪，验证EPA方法537.1在饮用水基质中全氟及多氟烷基化合物（PFAS）分析的方法性能。验证了Orbitrap质谱仪在PRM模式下执行EPA方法537.1的稳健性与重现性，其选择性、特异性及定量性能优异，适用于超低浓度PFAS分析。

- ✓ 低系统背景：所有方法空白中污染物水平均显著低于0.1 ng/L
- ✓ 精密度与准确度：7份加标LFB（25 ng/L）的分析结果显示，所有化合物RSD <20%，回收率偏差±30%
- ✓ 基质加标验证：自来水加标25 ng/L的分析结果显示，RSD <30%
- ✓ 在0.1–40 ng/L范围内，所有化合物的校准曲线线性良好（ $R^2 > 0.995$ ），残差小于标称值的30%

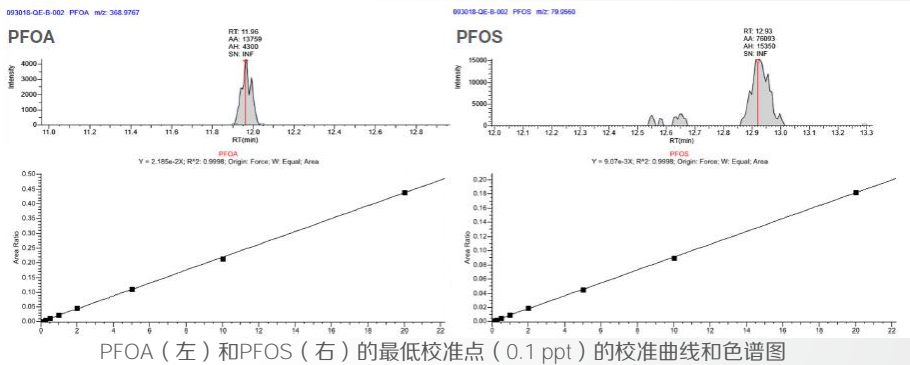


Vanquish UHPLC + Orbitrap Exploris LC/MS 120

#### 推荐仪器、软件和耗材

- Thermo Scientific™ Vanquish 超高效液相色谱
- Orbitrap Exploris LC/MS 120超高分辨质谱仪（HESI源）
- Dionex™ AutoTrace™280 固相萃取仪
- 色谱柱：Atlantis™ dC18 2.1 x 150 mm column packed with 5.0 μm particles
- 隔离柱：Thermo Scientific™ Hypersil™ C18, 5 μm, 2.1 x 50 mm
- 软件：Thermo Scientific™ TraceFinder 色谱数据系统

#### 结果与数据



PFOA（左）和PFOS（右）的最低校准点（0.1 ppt）的校准曲线和色谱图

Extract	11CL-PF3OUdS (ng/L)	9Cl-PF3ONS (ng/L)	ADONA (ng/L)	GenX (ng/L)	NEtFOSAA (ng/L)	NMeFOSAA (ng/L)	PFBS (ng/L)	PFDA (ng/L)	PFDoA (ng/L)
Method blank -1	0	0.002	0.004	0	0	0	0	0	0.005
Method blank -2	0	0.003	0.074	0	0.035	0.009	0.001	0	0.01
Method blank -3	0	0.005	0.111	0	0	0.011	0.002	0	0.025
Method blank -4	0	0.007	0.129	0	0	0.013	0	0	0.04

Extract	PFHpA (ng/L)	PFHxA (ng/L)	PFHxS (ng/L)	PFNA (ng/L)	PFOA (ng/L)	PFOS (ng/L)	PFTA (ng/L)	PFTDA (ng/L)	PFUnA (ng/L)
Method blank -1	0.003	0.038	0	0	0.019	0.052	0.008	0	0.009
Method blank -2	0.005	0.039	0.001	0.007	0.024	0.055	0.013	0.009	0.011
Method blank -3	0	0.04	0	0	0.025	0.059	0.029	0.013	0.023
Method blank -4	0	0.054	0	0	0.031	0.069	0.036	0.016	0.059

提取方法空白中的低系统背景

Analyte	DL (ng/L)	LCMRL (ng/L)
PFBS	0.42	2.5
PFHxA	0.22	0.71
GenX	0.34	1.1
PFHpA	0.18	1.3
PFHxS	0.17	0.38
ADONA	0.15	0.25
PFOA	0.16	0.73
PFOS	0.11	0.5
PFNA	0.3	0.58

Analyte	DL (ng/L)	LCMRL (ng/L)
9Cl-PF3ONS	0.14	0.29
PFDA	0.26	0.34
NMeFOSAA	0.24	0.44
PFUnA	0.45	0.64
NEtFOSAA	0.21	0.34
11CL-PF3OUdS	0.33	0.43
PFDoA	0.78	2.5
PFTDA	0.13	0.58
PFTA	0.1	0.56

最低浓度方法检测限（LCMRL）和计算检测限总结



# 靶向分析

## LC-MS/MS液质联用-非饮用水

### 使用LC-MS/MS遵循EPA方法1633对水样中全氟和多氟烷基物质（PFAS）的定量分析

本方案通过LC-MS/MS在Thermo Scientific™ TSQ Quantis™ Plus质谱仪上，对500 mL水样中的40种全氟和多氟烷基物质（PFAS）进行测量，达到或低于美国环保署草案方法1633中报告的方法检测限（MDL）

- ✓ TDCA与支链PFOS的分离度超过2分钟（EPA方法1633第三版要求相差至少1分钟）
- ✓ 所有化合物校准结果 $R^2 > 0.997$ ，计算各分析物的相对标准误差（RSE），大部分RSE < 10%，6种原生PFAS的RSE在10%-16%之间
- ✓ 遵循方法1633，水样的MDL优于EPA标准。中水平加标样品的回收率在70%-130%，RSD < 20%

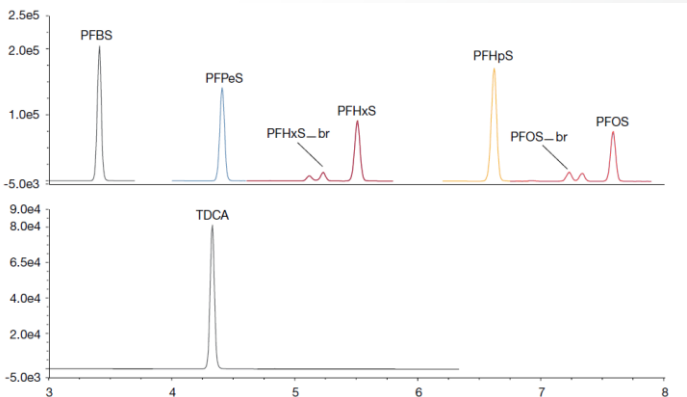


Vanquish UHPLC + TSQ Quantis Plus LCMSMS

#### 仪器、软件和耗材

- Thermo Scientific™ Vanquish Flex Binary UHPLC系统配备PFAS升级套件
- Thermo Scientific™ TSQ Quantis Plus质谱仪（HESI）
- 延迟柱：Thermo Scientific™ Hypersil GOLD™, 3.0 × 50 mm, 1.9 μm
- 分析柱：Thermo Scientific™ Acclaim™ 120 C18, 2.1 × 50 mm, 2.2 μm
- 软件：Thermo Scientific™ Chromeleon CDS 7.2

#### 结果与数据



PFAS分离的色谱图，包括顶层的全氟辛烷磺酸，与底层的胆汁酸TDCA分析的对比

Analyte	Spiked conc. (ng/L)	Mean %Recovery (N=5)	%RSD (N=5)	Analyte	Spiked conc. (ng/L)	Mean %Recovery (N=5)	%RSD (N=5)
PFBA	50.0	91.2%	3.4	6:2 FTS	50.0	232.9%*	52.4
PFPeA	25.0	92.4%	2.8	8:2 FTS	50.0	89.5%	1.4
PFHxA	12.5	91.3%	3.7	PFOSA	12.5	85.9%	3.9
PFHpA	12.5	88.5%	3.1	N-MeFOSA	12.5	85.6%	4.2
PFOA	12.5	89.8%	3.3	N-EtFOSA	12.5	83.2%	3.8
PFNA	12.5	87.8%	4.7	N-MeFOSAA_branched	3.0	94.4%	10.5
PFDA	12.5	89.0%	1.9	N-MeFOSAA	9.5	90.5%	3.2
PFUdA	12.5	87.0%	3.5	N-EtFOSAA_branched	2.8	87.7%	5.2
PFDoA	12.5	93.3%	3.3	N-EtFOSAA	9.7	87.0%	2.4
PFTriDA	12.5	88.0%	3.2	N-MeFOSE	125.0	90.5%	3.7
PFTeDA	12.5	93.6%	2.5	N-EtFOSE	125.0	92.6%	3.1
PFBS	12.5	86.8%	5.5	HFPO-DA	50.0	94.1%	2.0
PFPeS	12.5	92.7%	3.4	ADONA	50.0	102.5%	4.5
PFHxS_branched	2.4	86.6%	5.4	PFEESA	25.0	93.4%	3.3
PFHxS	10.1	86.9%	5.7	PFMPA	25.0	84.3%	3.4
PFHpS	12.5	82.7%	1.6	PFMBA	25.0	89.9%	3.1
PFOS_branched	2.6	85.8%	4.6	NFDHA	25.0	97.3%	1.7
PFOS	9.9	87.8%	2.3	9Cl-PF3ONS	50.0	97.1%	1.5
PFNS	12.5	90.0%	5.8	11Cl-PF3OUdS	50.0	110.5%	6.1
PFDS	12.5	92.4%	1.9	3:3FTCA	62.5	86.2%	5.3
PFDoS	12.5	116.8%	6.6	5:3FTCA	312.5	71.8%	2.8
4:2 FTS	50.0	97.6%	4.1	7:3FTCA	312.5	101.7%	2.4

加标水样中天然PFAS的精密度和回收率

参考资料：AN-002348-Quantitation of per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS) in aqueous samples by LC-MS-MS following EPA Draft Method 1633



# 靶向分析

## LC-MS/MS液质联用-非饮用水

### 使用LC-MS/MS直接分析地下水、地表水和废水中的特定全氟及多氟烷基物质（PFAS）

本方案旨在通过直接分析方法验证非饮用水基质中低浓度（ng/L）PFAS的分析性能，方法在多种水基质中回收率良好，精密度高（RSD <20%），适用于非饮用水中PFAS的直接分析。

- ✓ TSQ Altis质谱仪 的灵敏度满足EPA 8327和ASTM D7979-17的低浓度检测要求
- ✓ 方法的定量下限（LLOQ）显著优于ASTM D7979-17的要求
- ✓ Accucore RP-MS色谱柱 在复杂基质中表现出优异的分​​离能力

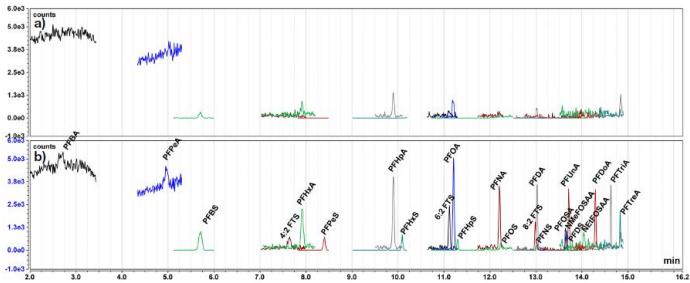
#### 仪器、软件和耗材

- Thermo Scientific™ Vanquish™ Flex二元超高效液相色谱仪，配备PFC-Free套件
- Thermo Scientific™ TSQ Altis™三重四极杆质谱仪，配备HESI离子源
- 分析柱：Accucore™ RP-MS（2.6 μm, 2.1 × 100 mm, P/N 17626-102130）
- 隔离柱：Hypersil™ BDS C18（5 μm, 2.1 × 50 mm, P/N 28105-052130）
- 软件：Chromeleon CDS 7.2.9



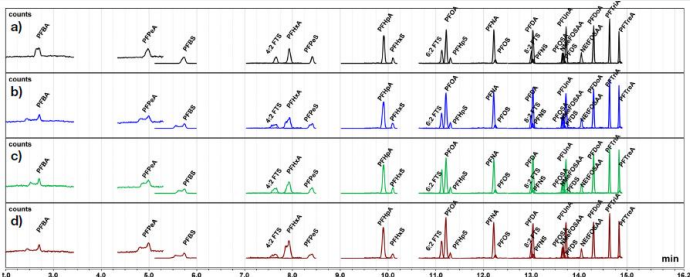
Vanquish UHPLC + TSQ Altis Plus LCMSMS

#### 结果与数据



PFAS叠加色谱图：a)方法空白样品和b)报告限量检查样品加标为10 ng/L

Compound	Recoveries %							
	Reagent water		Ground water		Surface water		Waste water	
	Low level	High level	Low level	High level	Low level	High level	Low level	High level
PFBA	77%	78%	71%	75%	74%	74%	58%	75%
PFPeA	84%	80%	104%	80%	115%	81%	88%	78%
PFBS	87%	81%	95%	81%	95%	79%	72%	77%
PFFtA	82%	81%	83%	79%	86%	80%	77%	74%
4:2 FTS	81%	82%	90%	78%	87%	79%	76%	91%
PFFeS	80%	80%	82%	79%	85%	78%	80%	83%
PFFhA	84%	81%	88%	80%	89%	80%	74%	81%
PFFhS	81%	81%	87%	78%	94%	81%	85%	85%
6:2 FTS	84%	82%	85%	80%	87%	94%	78%	79%
PFOA	83%	80%	88%	82%	123%	83%	83%	86%
PFFhP	81%	81%	84%	76%	83%	78%	79%	86%
PFNA	79%	81%	84%	80%	86%	80%	79%	82%
PFOS	91%	82%	91%	78%	93%	81%	79%	90%
8:2 FTS	85%	80%	81%	75%	76%	79%	78%	83%
PFNS	85%	75%	89%	79%	81%	76%	72%	78%
PFDA	80%	81%	86%	78%	85%	79%	74%	83%
NMeFOSAA	77%	81%	80%	77%	86%	81%	82%	84%
PFOSA	76%	76%	87%	75%	91%	75%	79%	81%
PFDS	82%	78%	89%	77%	85%	79%	72%	81%
PFOUnA	76%	76%	80%	81%	75%	78%	75%	83%
NEtFOSAA	82%	79%	89%	77%	89%	81%	80%	85%
PFDaA	79%	82%	83%	78%	85%	82%	79%	85%
PFTtA	87%	86%	89%	79%	92%	91%	87%	89%
PFTtA	109%	103%	112%	91%	113%	119%	100%	110%



24种PFAS在60ng/L浓度下的现场样品叠加色谱图：a)试剂水；b)地下水；c)地表水；和d)废水

PFAS在不同水质基质中的回收率，低水平和高水平分别为60和200 ng/L



# 靶向分析

## LC-MS/MS液质联用-非饮用水

### 赛默飞液质联用系统TSQ Altis同时分析检测17种全氟化合物

本方案基于赛默飞新一代三重四极杆液质联用平台TSQ Altis建立了水中17种全氟化合物的同时分析检测方法。结果表明：环境水样直接进样10uL，17种全氟化合物检出限均能较好满足环境法规限值的要求，各化合物线性关系良好，线性相关系数均>0.99。在20 pg/mL浓度水平下连续进样6针，RSD均小于5.1%。

- ✓ 方法灵敏度和重现性结果良好
- ✓ 环境基质水样直接进样分析，选择性高，干扰小，稳定性好

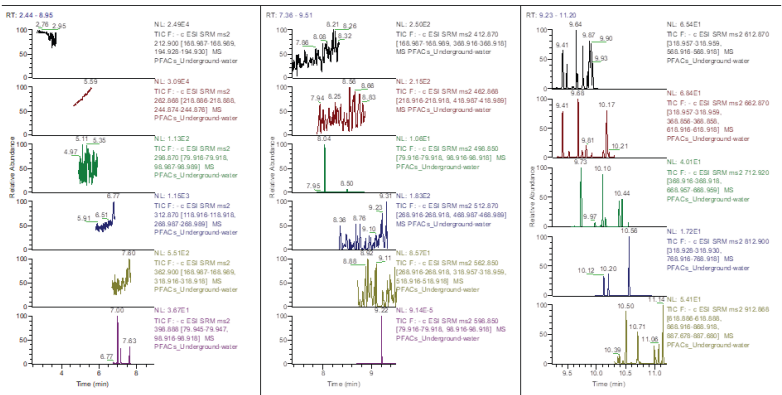
#### 仪器、软件和耗材

- Thermo Scientific™ Vanquish超高效液相色谱仪
- Thermo Scientific™ TSQ Altis™三重四极杆质谱仪，配备HESI离子源
- Trap柱：Thermo Scientific Accucore C18，50\*2.1mm，2.6 μm
- 分析柱：Thermo Scientific Accucore aQ (100 × 2.1 mm, 2.6μm)
- 软件：TraceFinder

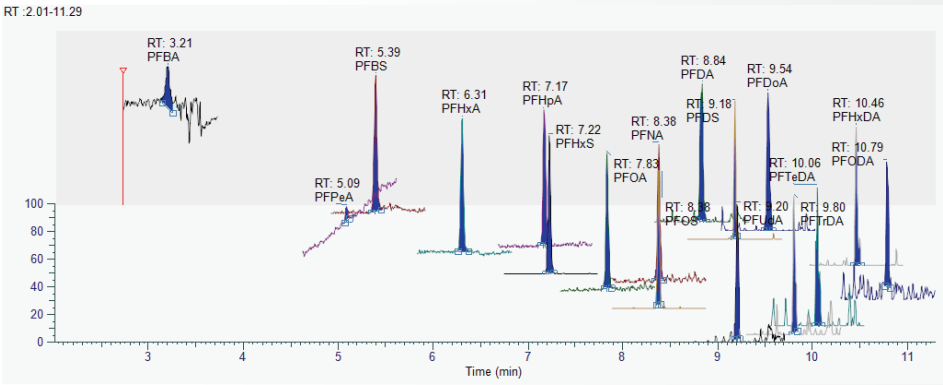
#### 结果与数据



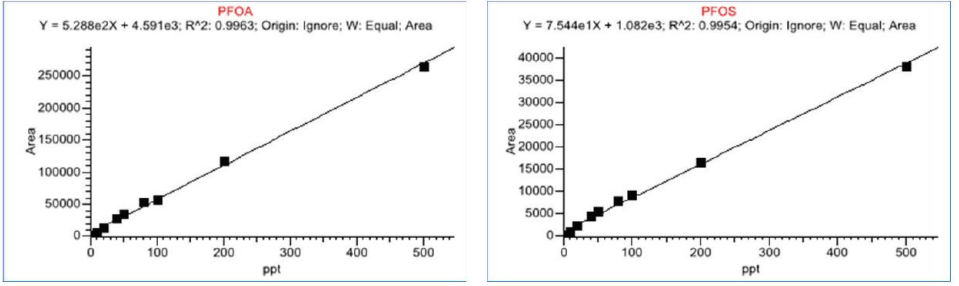
Vanquish UHPLC + TSQ Altis Plus LCMSMS



地下水基质空白



基质添加20pg/mL样品提取离子流色谱叠加图



混标中代表性化合物PFOA、PFOS标准曲线



# 靶向分析

## LC-MS/MS液质联用-纺织品

### 三重四极杆液质联用测定纺织染整助剂中的27种全氟化合物（PFCs）

本方案使用了Thermo Scientific 高效液相色谱串联三重四极杆质谱，建立了纺织染整助剂中27 种全氟化合物（PFCs）的快速检测方法，以满足国家标准GB/T 29493.2-2021 的分析需求。

✓ TSQ三重四极杆液质超高的灵敏度、选择性、通量、重复性，高抗污染能力与易用性满足纺织品中痕量PFAS的精准测定

✓ 27 种PFCs 在20 分钟梯度洗脱下分离良好

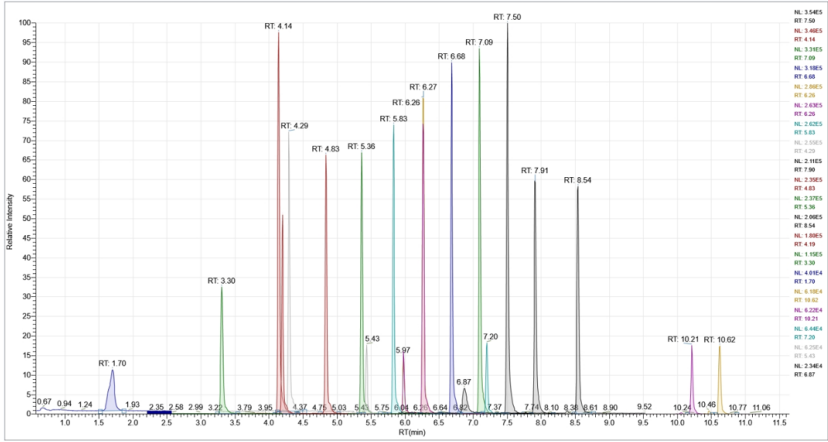
#### 仪器、软件和耗材

- Thermo Scientific™ Vanquish Flex 超高效液相色谱系统
- Thermo Scientific™ TSQ 系列三重四极杆质谱
- 色谱柱：Thermo Hypersil Gold C18 Column 2.1 × 100mm，2.6μm
- TraceFinder软件

#### 结果与数据



Vanquish UHPLC + TSQ Quantis Plus LCMSMS



27 种目标物色谱图

序号	化合物	LOD/(ng/mL)	LOQ/(ng/mL)	线性范围/(ng/mL)	RSD/% (1 ng/mL, n=6)
1	PFBA	<0.10	0.20	0.2-50	0.63
2	PFPeA	<0.10	0.20	0.2-50	1.63
3	PFHxA	<0.10	0.20	0.2-50	4.82
4	PFHpA	<0.10	0.20	0.2-50	2.18
5	PFOA	<0.10	0.20	0.2-50	0.76
6	PFNA	<0.10	0.20	0.2-50	3.11
7	PFDA	<0.10	0.20	0.2-50	1.45
8	PFUdA	<0.10	0.20	0.2-50	6.20
9	PFDoA	<0.10	0.20	0.2-50	2.05
10	PFTeDA	<0.10	0.20	0.2-50	4.39
11	PFTeDA	<0.10	0.20	0.2-50	1.11
12	PFBS	<0.10	0.20	0.2-50	2.84
13	PFHxS	<0.10	0.20	0.2-50	3.94
14	PFHpS	<0.10	0.20	0.2-50	5.20
15	PFOS	0.2	0.4	0.4-100	1.68
16	PFDS	<0.10	0.20	0.2-50	4.43
17	PFOSA	<0.10	0.20	0.2-50	5.75
18	N-Me-FOSA	<0.10	0.20	0.2-50	0.99
19	N-Et-FOSA	<0.10	0.20	0.2-50	1.37
20	N-Me-FOSE	0.2	0.4	0.4-100	1.56
21	N-Et-FOSE	0.2	0.4	0.4-100	4.68
22	6:2 FTS	<0.10	0.20	0.2-50	2.97
23	4HPFUnA	0.2	0.4	0.4-100	3.06
24	PF-3,7DMOA	<0.10	0.20	0.2-50	5.12
25	HPFHpA	<0.10	0.20	0.2-50	4.35
26	H2PFDA	0.2	0.4	0.4-100	3.85
27	8:2 FTS	<0.10	0.20	0.2-50	2.49

目标物LOD、LOQ、线性范围、重现性测试结果



# 靶向分析

## GC-MS/MS气质联用-纺织品

### 使用AEI源-TSQ 9610三重四极杆气质联用仪测定纺织品中PFCs

本方案采用TSQ 9610 AEI源对纺织品中11种PFCs进行测定。结果表明，11种PFCs在1-100 ng/mL浓度范围内线性判定系数均在0.9994以上，10 ng/mL与100 ng/mL 两个浓度点定量离子对峰面积重复性在5.3%以内，按1 ng/mL浓度下信噪比以SN=3计算检出限在0.006-0.550 ng/mL。

- ✓ 方法适用于纺织品中全氟烷基乙醇类、全氟烷基丙烯酸酯类以及氟调聚物碘类的测定
- ✓ TSQ 9610具有行业内领先的灵敏度和稳定性
- ✓ NeverVent技术的真空锁 (VPI) 功能和V-Lock离子源插件可以实现免卸真空即能完成日常维护
- ✓ AEI源具有独特的结构设计，具备超高稳定性与灵敏度

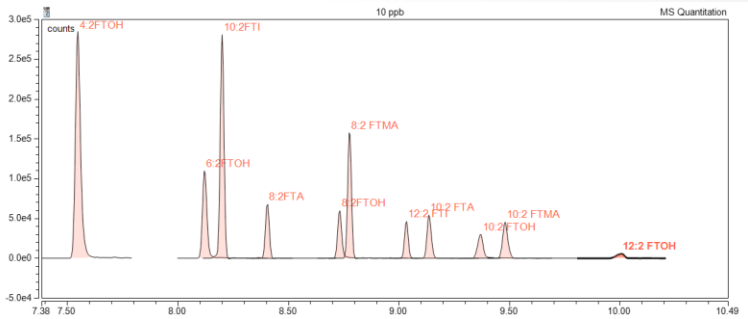


TSQ9610 GCMSMS系统

#### 仪器、软件和耗材

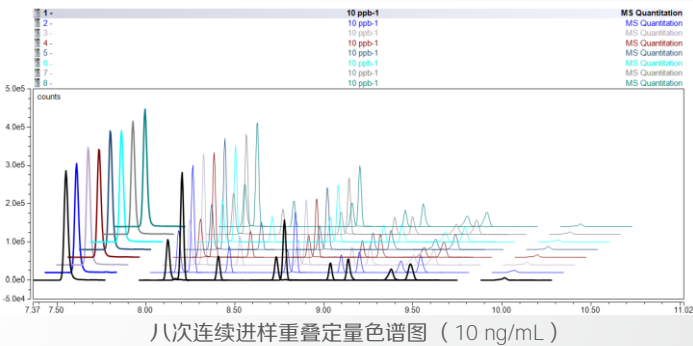
- Thermo Scientific™ AS 1610 液体自动进样器
- Thermo Scientific™ TRACE 1610 气相色谱仪
- Thermo Scientific™ TSQ 9610 三重四极杆气质联用仪配备AEI源
- Thermo Scientific™ Chromeleon™ 7.3.2 数据处理系统
- 色谱柱：TG-WAXMS 30m\*0.25mm\*0.25μm ( P/N: 26088-1420 )

#### 结果与数据



No.	化合物名称	判定系数R²	10 ng/mL RSD%(n=8)	100 ng/mL RSD%(n=8)	检出限 (ng/mL)
1	4:2FTOH	0.99997	2.55	1.87	0.007
2	6:2FTOH	0.99996	4.38	1.64	0.016
3	10:2FTI	0.99998	5.30	1.55	0.006
4	8:2FTA	0.99999	4.76	3.01	0.040
5	8:2FTOH	0.99995	4.50	3.21	0.060
6	8:2 FTMA	0.99995	4.75	1.93	0.015
7	12:2 FTI	0.99998	1.92	4.31	0.047
8	10:2 FTA	0.99985	4.93	4.03	0.047
9	10:2 FTOH	0.99946	3.94	3.56	0.087
10	10:2 FTMA	0.99990	3.76	3.11	0.035
11	12:2 FTOH	0.99995	3.48	2.72	0.550

11种PFCs方法学数据结果





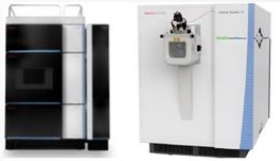
# 靶向分析

## Orbitrap Exploris LC/MS高分辨液质-包装材料

### 粒径减小技术对食品接触纸包装材料中16种PFAS提取和回收率的影响

本方案旨在通过聚焦超声固液萃取（FUSLE）技术，探讨两种颗粒尺寸减小技术（球磨法和刀片切割研磨法）对三种食品接触材料（微波爆米花袋、模压纤维碗和食品包装纸）中16种目标氟化物的回收率影响。其中，聚焦超声固液萃取（FUSLE）因其低成本、快速和高回收率（接近100%）被验证为有效的固体基质样品提取与净化方法。

- ✓ Orbitrap Exploris MS超高分辨率和质量精度，实现同时定性和定量分析
- ✓ 方法灵敏度高、专属性强、稳定性好
- ✓ UHPLC/高分辨质谱在复杂基质中表现出良好的检测能力
- ✓ 两种研磨技术对PFAS总回收率无显著差异

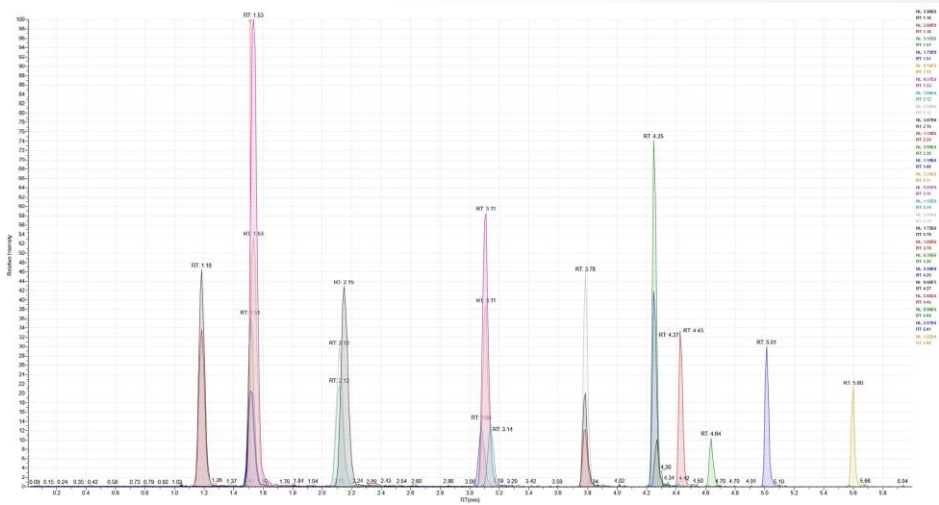


Vanquish UHPLC + Orbitrap Exploris LC/MS 120

#### 仪器、软件和耗材

- Thermo Scientific™ Vanquish™ Flex UHPLC
- Thermo Scientific™ Orbitrap Exploris LC/MS 120
- TraceFinder 软件
- 色谱柱：Hypersil GOLD™ aQ柱（100 × 2.1 mm, 1.9 μm）
- Trap柱：Hypersil GOLD column, 50 × 3 mm, 1.9 μm
- JMP Pro™软件：进行t检验，比较两种研磨技术的回收率差异

#### 结果与数据



使用球磨研磨技术的PFAS分析物全扫描提取色谱图分离

Molded Fiber Bowl				Brown Sandwich Bag				Microwave Popcorn Bag			
Ball Analytical MIII (ng/g)	%CV	Blade Analytical MIII (ng/g)	%CV	Ball Analytical MIII (ng/g)	%CV	Blade Analytical MIII (ng/g)	%CV	Ball Analytical MIII (ng/g)	%CV	Blade Analytical MIII (ng/g)	%CV
325.7	1.56	316.6	0.11	322.9	3.52	305.3	1.92	314.7	1.32	313.1	2.06

在三种不同的食品接触基质中，使用两种粒径减小技术提取的总PFAS回收率（ng/g）和（%CV）



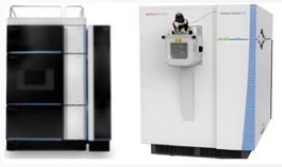
# 靶向分析

## Orbitrap Exploris LC/MS高分辨液质-动物组织

### 使用Orbitrap Exploris 120高分辨率质谱仪检测和定量动物组织中的PFAS

本方案旨在开发一种稳健的方法，利用LC-Orbitrap高分辨率质谱仪在动物组织中高效提取、识别和定量ppt水平的靶向全氟和多氟烷基物质（PFAS），选择了34种靶向PFAS化合物。以猪肉肌肉组织为测试基质，验证方法的适用性。

- ✓ 34种PFAS在5–5000 pg/mL范围内线性良好（ $r^2 > 0.995$ ），相对标准偏差（RSD）<7%
- ✓ 平均回收率为60–130%，RSD ≤25%，大部分化合物的LOQ低于50 pg/g
- ✓ 通过myLibrary™ Enterprise云平台创建高保真PFAS谱库，支持碎片结构注释与数据回溯分析
- ✓ HPLC PFAS-free套件有效降低系统交叉污染



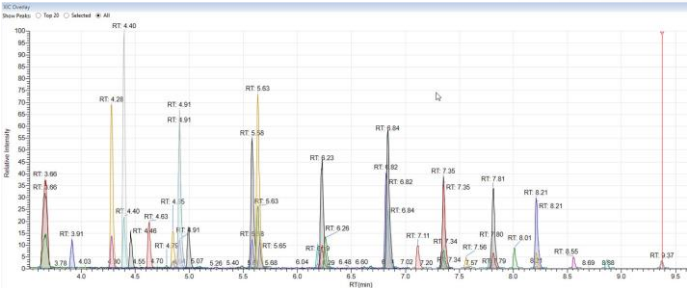
Vanquish UHPLC + Orbitrap Exploris LC/MS 120



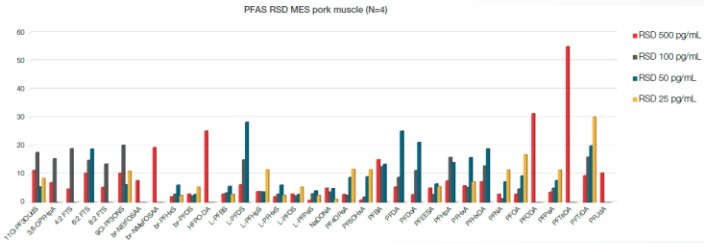
Vanquish UHPLC PFAS分析工具包

- ❑ 仪器、软件和耗材
  - Thermo Scientific™ Vanquish Flex 超高效液相色谱系统
  - Thermo Scientific™ Orbitrap Exploris™ 120高分辨率质谱仪
  - 分析柱：Accucore™ C18柱（100 × 2.1 mm，2.6 μm）
  - 捕集柱：Hypersil GOLD™ C18柱（50 × 4.6 mm，1.9 μm）
  - 赛默飞PFAS HPLC样品瓶套件
  - PFAS分析升级套件（Vanquish™ Flex UHPLC系统）
  - TraceFinder软件

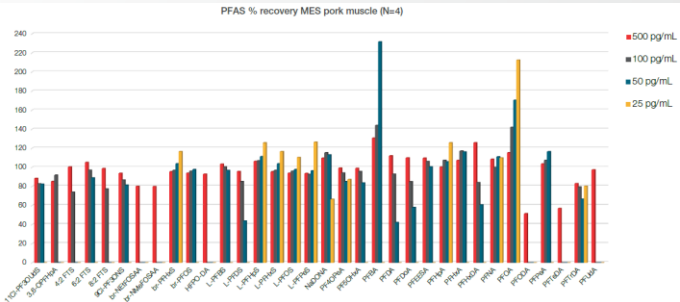
### ❑ 结果与数据



在溶剂标准品中，浓度为500 pg/mL的PFAS化合物全扫描母离子提取结果显示，尽管提取物中溶剂浓度较高，早期洗脱的峰仍表现出良好的峰形



基于四个独立猪肉肌肉基质加标提取实验的各浓度水平下，PFAS化合物的平均RSD



基于四个独立猪肉肌肉基质加标提取实验的各浓度水平下，PFAS化合物的平均回收率百分比



# 靶向分析

## HPLC液相色谱-药物-三氟乙酸（TFA）

### HPLC结合复合模式色谱柱检测极性有机酸

近年来，有机酸的使用在制药和食品领域越来越普遍，在制药领域，常用的有机酸主要有乙酸、三氟乙酸、甲酸等，常被作为有机合成的原料，而三氟乙酸（TFA）随着大量使用和排放，在水体中广泛存在，植物会随土壤和水浓度增加而富集TFA，且由于其持久性和缺乏挥发性，难以从植物组织中消除。三氟乙酸对水生生物有害且具有持久影响，哺乳动物毒性研究表明TFA对生殖有毒性且有肝毒性。目前高效液相色谱法是有机酸最广泛的检测方法，但小分子有机酸由于极性较强，通常在C18色谱柱上保留较弱，分离较差，本方法使用新型复合模式色谱柱，调整流动相pH，使有机酸完全解离，通过离子交换模式对有机酸进行保留，操作简单、快速、测定结果准确可靠。

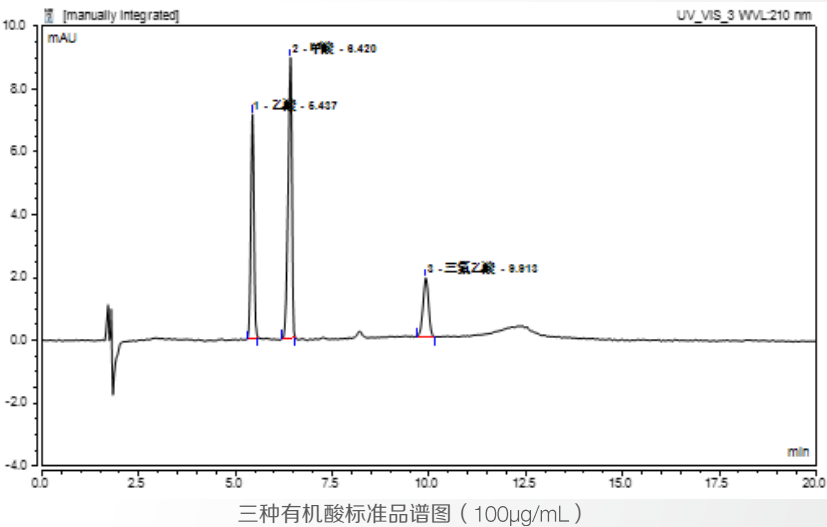
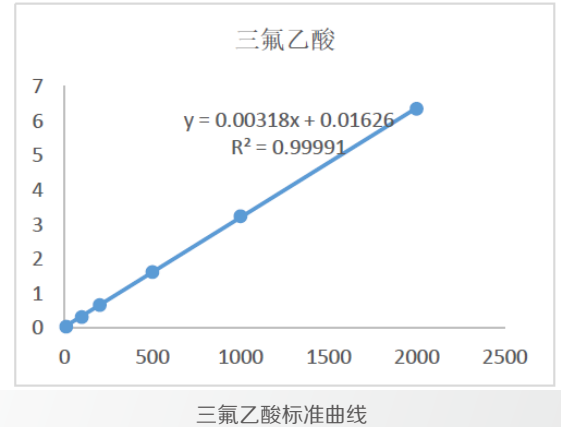
#### 推荐仪器、软件和耗材

- Thermo Fisher Vanquish UHPLC
  - Thermo Fisher Vanquish Diode Array Detector
  - 色谱柱：Thermo Acclaim Mixed-Mode WAX-1（150×3.0mm 3μm）
  - 柱温：30℃；进样量：5μL；流动相：A为25mM磷酸二氢钠（氢氧化钠调pH至5.2），B为乙腈 A:B=60：40
- 检测波长：210nm

#### 结果与数据

化合物	线性范围 (μg/mL)	相关系数 (r <sup>2</sup> )	LOD (μg/mL)	LOQ (μg/mL)	RSD% (n=6)
乙酸	10-2000	0.99999	1.4	4.6	2.17
甲酸	10-2000	0.99998	1.0	3.4	2.58
三氟乙酸	10-2000	0.99991	4.9	16.7	3.29

3种有机酸的线性范围、线性相关系数及 LOD、LOQ、RSD





# 靶向分析

## IC离子色谱-药物-三氟乙酸（TFA）

### 离子色谱法直接检测药物中的三氟乙酸

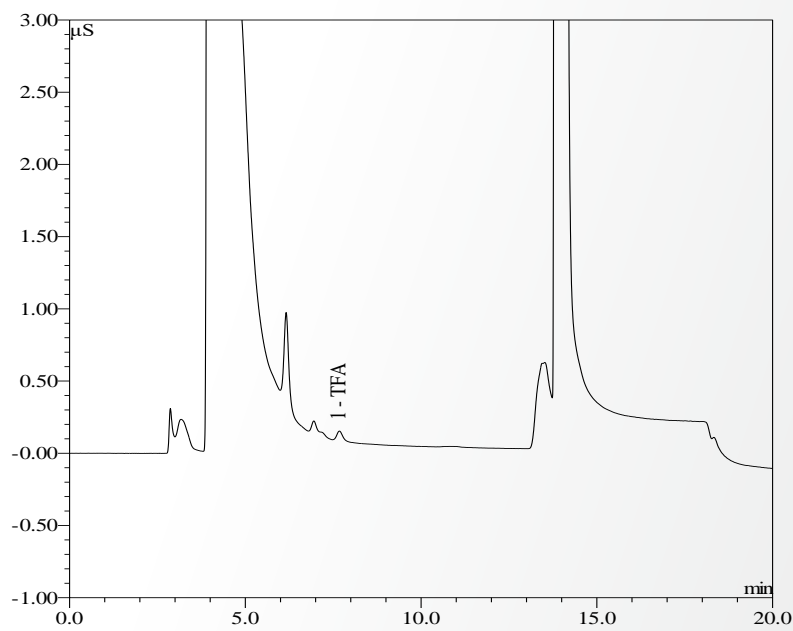
在制药领域，三氟乙酸常被作为有机合成的原料，多肽合成中，三氟乙酸常作为固相合成切割及后期纯化工艺试剂；而三氟乙酸（TFA）随着大量使用和排放，在水体中广泛存在，植物会随土壤和水浓度增加而富集TFA，且由于其持久性和缺乏挥发性，难以从植物组织中消除。哺乳动物毒性研究表明TFA对生殖有毒性且有肝毒性。因此需要根据具体工艺应用情况，在终产品中对工艺相关毒性试剂残留进行检测和控制。本方案介绍使用离子色谱仪直接测定药物中三氟乙酸。

- ✓ 无需配置淋洗液，节省实验时间，同时保证检测结果的重复性
- ✓ 采用高容量阴离子交换柱，分离效率高
- ✓ 无需额外再生液，重现性好
- ✓ 灵敏度高，满足痕量杂质检测需求

#### ❑ 仪器、软件和耗材

- Thermo Fisher Inuvion/Integrion/ICS6000 离子色谱
- IonPac AS 11-HC/18/19 分析柱
- EGC KOH
- ASRS 300/ADRS 600
- CD 电导检测器

#### ❑ 结果与数据



多肽注射液三氟乙酸分离谱图



# 靶向分析

## IC离子色谱-药物-三氟甲基磺酸

### 离子色谱法测定药物中的三氟甲基磺酸

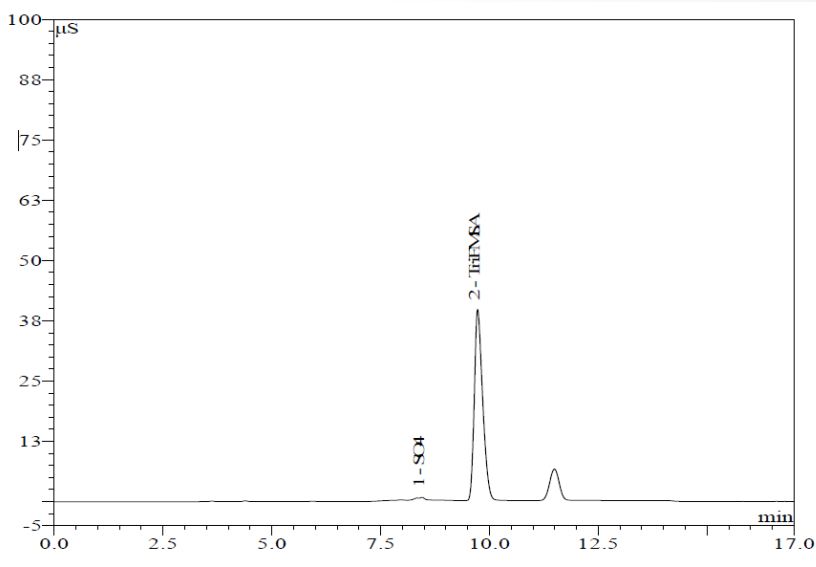
三氟甲基磺酸是广泛应用于医药、化工等行业。主要用来研究作为酯化反应的催化剂，被誉为万能的合成工具。而随着基因毒性杂质成为人们关注的焦点，甲磺酸酯、苯甲磺三氟甲基磺酸、甲磺酸甲酯、甲磺酸乙酯、三氟甲磺酸甲酯这类物质可与DNA 发生烷基化反应，从而可能成为引发癌症的诱因，因此控制药物中该类杂质的毒理学，关注阈值（TTC）水平非常重要。本方案介绍探索三氟甲基磺酸的离子色谱检测法。

- ✓ 使用离子色谱法，直接检测三氟甲基磺酸
- ✓ 使用简单前处理方法，无需繁琐衍生化

#### ❑ 仪器、软件和耗材

- Thermo Fisher Inuvion/Integrion/ICS6000 离子色谱
- IonPac AS 11-HC/18/19 分析柱
- EGC KOH
- ASRS 300/ADRS 600
- CD 电导检测器

#### ❑ 结果与数据



三氟甲磺酸色谱图



靶向筛查

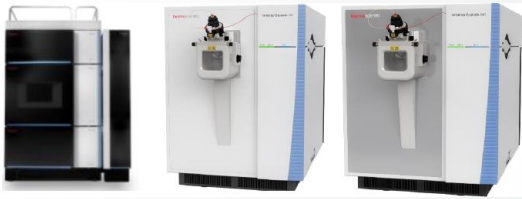
Orbitrap Exploris LC/MS高分辨液质-高通量筛查方案

Orbitrap Exploris LC/MS进行400多种新污染物筛查

- ✓ 本方案采用15分钟梯度，两种流动相，一根色谱柱，正负切换扫描，实现了400 多种新污染物的筛查鉴定，其中包括80多种PFAS
- ✓ 可实现120K 及以上的分辨率
- ✓ 高质量精度优势，引入仪器自带的Easy IC内标校正，可实现1ppm 以内的偏差
- ✓ 正负切换同时采集，采集结果更加丰富
- ✓ 方法灵敏度高、专属性强、稳定性好，可为新污染物的筛查提供有效的技术支持，进行准确的分析

仪器、软件和耗材

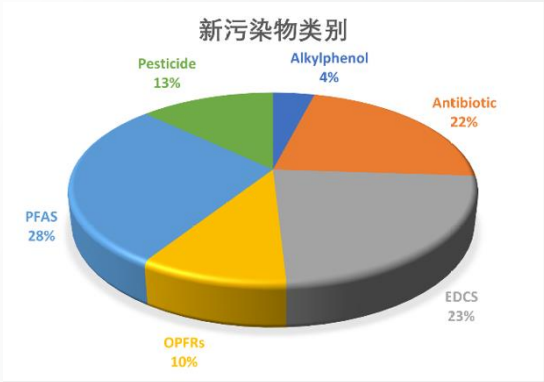
- Thermo Scientific™ Vanquish™ Flex UHPLC
- Thermo Scientific™ Orbitrap Exploris LC/MS 120
- TraceFinder 5.1 软件
- mzVault 2.3 软件
- 色谱柱：Acclaim RSLC 120 C18 (150x2.1mm, 2.2μm, P/N: 071399 )
- Trap 柱：Acclaim RSLC 120 C18 (50x2.1mm, 2.2μm, P/N: 068981 )



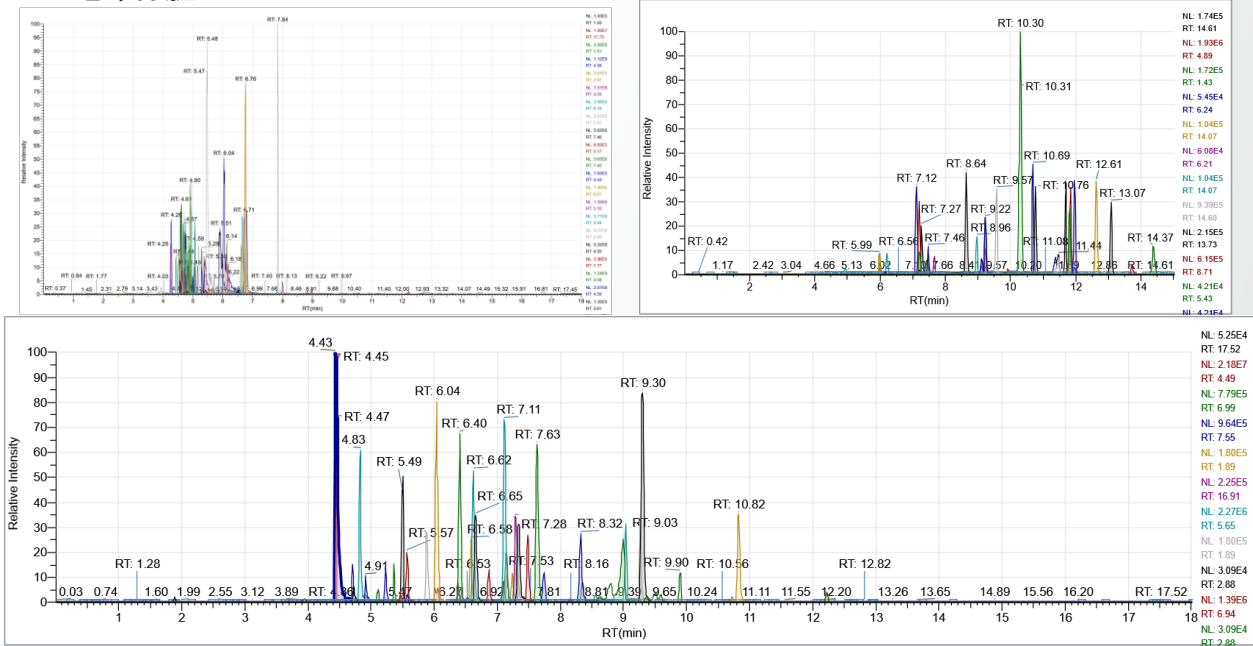
Vanquish UHPLC + Orbitrap Exploris LC/MS 120/240

筛查项目来源

- 《关于持久性有机污染物的斯德哥尔摩公约》
- 《重点管控新污染物清单（2023年版）》
- 《第一批化学物质环境风险优先评估计划》
- 《优先控制化学品名录（第一批）》
- 《优先控制化学品名录（第二批）》
- 《环境污染物检测标准》



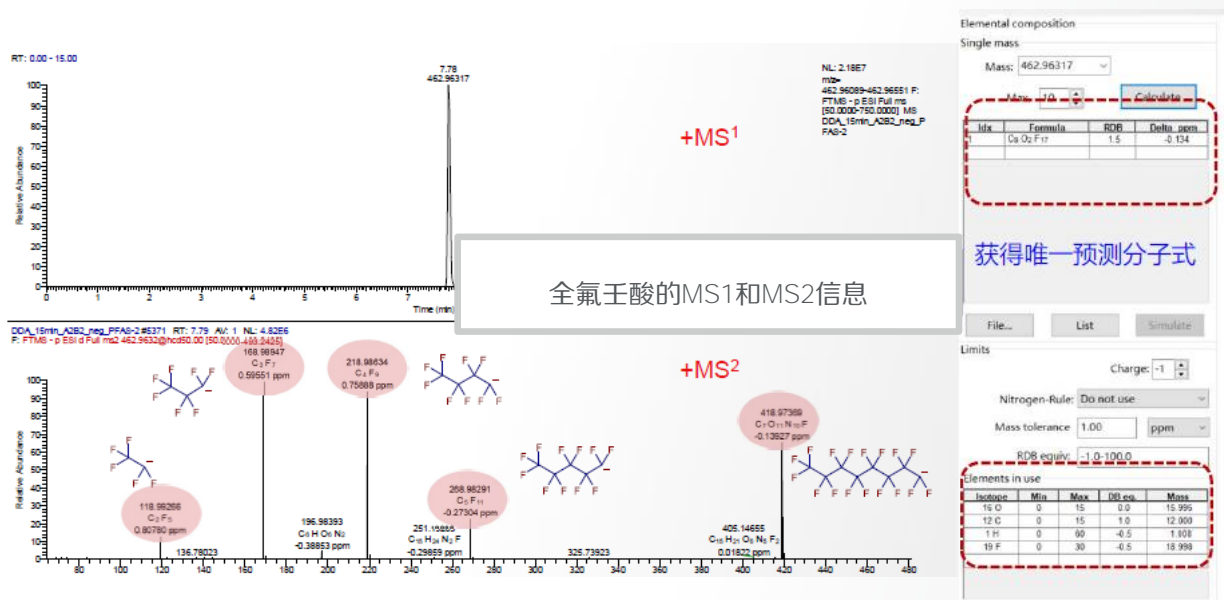
结果数据





靶向筛查

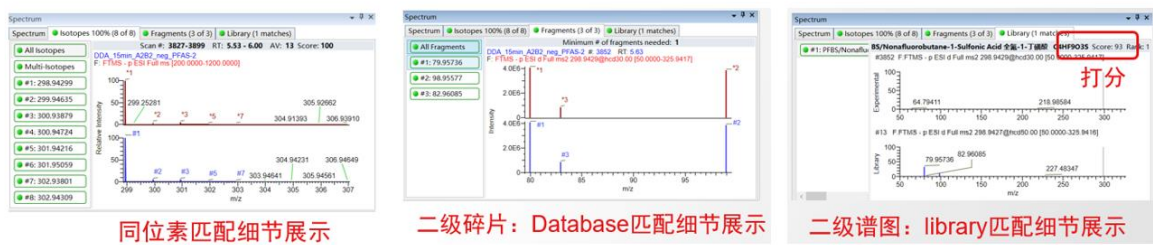
Orbitrap Exploris LC/MS高分辨液质-高通量筛查方案



MS2的不同响应的碎片的偏差均小于1ppm，其中，以复杂元素进行拟合分子式，可获得唯一的拟合结果，在未知物定性中提升鉴定的可信度

Compounds									
PFAS-22									
	Selected	MZ	RT	IP	F	LS	Flag	Compound Name	
1	<input checked="" type="checkbox"/>							ADONA/Dodecafluoro-3H-4,8-dioxnonanoic acid NaDoNA	
2	<input checked="" type="checkbox"/>							PFBA/Perfluorobutanoic acid (Heptafluorobutyric acid) 七氟丁酸	
3	<input checked="" type="checkbox"/>							PFBS/Nonafluorobutane-1-Sulfonic Acid 全氟-1-丁磺酸	
4	<input checked="" type="checkbox"/>							PFDA/Perfluorodecanoic Acid 全氟癸酸	
5	<input checked="" type="checkbox"/>							PFDoA/Perfluorododecanoic Acid 全氟十二烷酸	
6	<input checked="" type="checkbox"/>							PFDS/Henicosfluorodecanesulphonic Acid 全氟癸烷磺酸钠盐	

结果总览表（匹配合理标记绿色）



同位素匹配细节展示      二级碎片：Database匹配细节展示      二级谱图：library匹配细节展示

化合物匹配结果



样品前处理+靶向筛查+定量  
在线SPE结合LC Orbitrap-高通量筛查定量

自动化在线SPE结合Orbitrap Exploris LC/MS快速同时筛查定量300多种新污染物

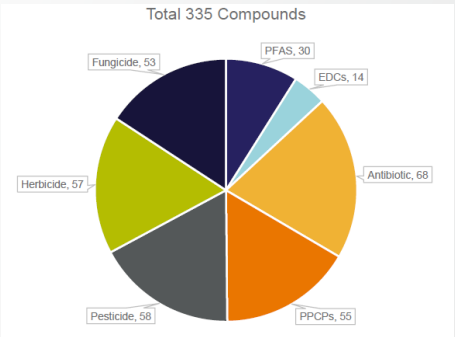
- ✓ 创新的在线SPE同时可自动切换大体积进样，一针15分钟完成335种新污染物筛查和定量，其中包括30多种PFAS
- ✓ 便捷性—显著地减少样品分析的时间，样品可以被直接进样，在线富集，随后进行LC-MS/MS 分析
- ✓ 高效性—自动化在线浓缩，减少人为操作误差以及降低成本
- ✓ 高灵敏度—Orbitrap 超高灵敏度，同时通过大体积进样直接改善样品的最低检测限（最大可达20mL）
- ✓ 独家的在线SPE-新污染物-高分辨分析方案

仪器、软件和耗材

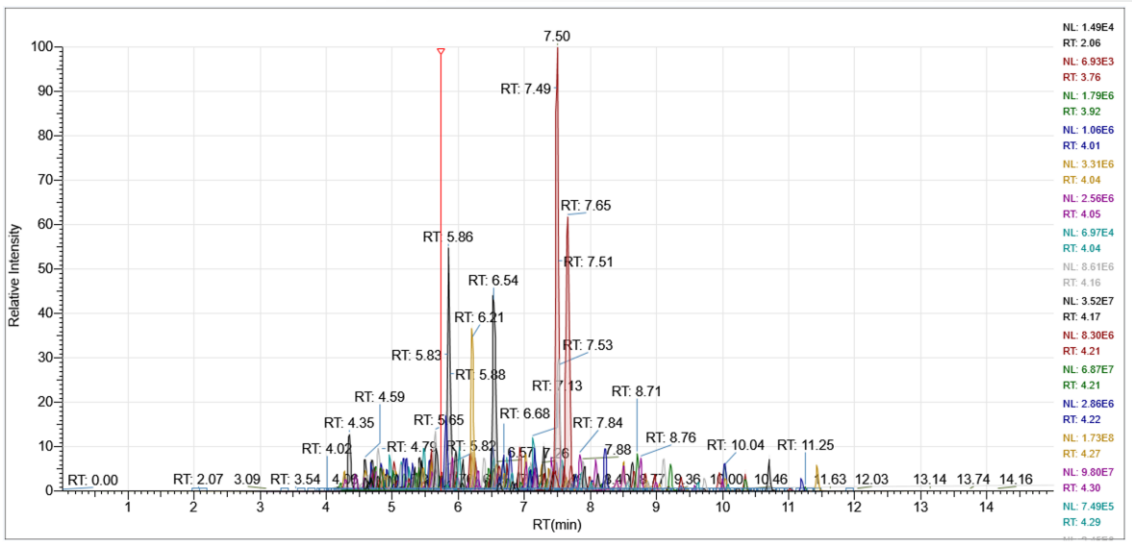
- Thermo ScientificTM VanquishTM Flex UHPLC ( VF-P10-A-01, VF-P20-A )
- Thermo ScientificTM Orbitrap Exploris LC/MS 120
- Thermo ScientificTM TriPlus RSH EQuan 850自动进样器
- TraceFinder 软件
- mzVault 软件
- 在线固相萃取柱：Hypersil Gold aQ 固相萃取柱（2.1×20mm，12um, PN 25312-022130）
- Trap柱：Thermo Scientific AcclaimTM RSLC120 C18（2.2um, 2.1×50mm, PN 068981）
- 分析柱：Thermo Scientific AcclaimTM RSLC120 C18（2.2um, 2.1×150mm, PN 071399）



TriPlus RSH EQuan 850-Orbitrap Exploris 120



结果数据



335种新污染物色谱图



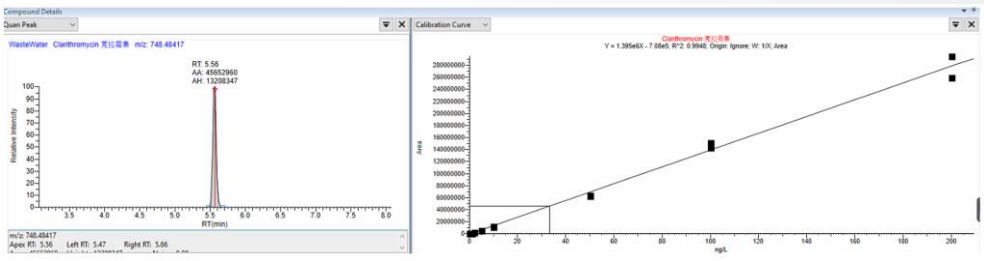
样品前处理+靶向筛查+定量  
在线SPE结合LC Orbitrap-高通量筛查定量

Compound Name	Curve Equation		中文	类别
11-Eicosafuoroundecanoic acid	Y = 3.629e7X + 2.919e5	R^2: 0.9954	11H-全氟癸酸	PFAS
17-Methyltestosterone	Y = 8.559e6X + 7.851e6	R^2: 0.9970	17-甲睾酮	EDCs
1H,1H-Perfluorohexylamine	Y = 7.875e4X - 3.029e5	R^2: 0.9979	1H,1H-全氟己胺	PFAS
1H-Perfluoroheptane	Y = 5.775e6X + 5.876e5	R^2: 0.9985	1H-全氟庚烷	PFAS
1H-Perfluorononane	Y = 1.078e6X - 1.379e6	R^2: 0.9898	1H-全氟壬烷	PFAS
2-Amino-1H-benzazole	Y = 1.388e6X + 2.504e4	R^2: 0.9976	2-氨基苯并咪唑	PPCPs
2-Methyl-4-(methylthio)-2-morpholinopropiophenone	Y = 2.51e5X + 4.31e5	R^2: 0.9900	光引发剂 907	EDCs
4,4-Dinitrocarbanilide/1,3-bis(4-nitrophenyl)urea	Y = 5.207e6X - 1.271e6	R^2: 0.9969	4,4'-二硝基二苯脲	PPCPs
4,8-dioxo-3H-Perfluorononanoic acid	Y = 1.809e6X - 1.912e5	R^2: 0.9972	4,8-二氧-3H-全氟壬酸	PFAS
4:2FTS/1H,1H,2H,2H-Perfluorohexanesulfonic acid	Y = 9.503e5X - 2.532e5	R^2: 0.9968	1H,1H,2H,2H-全氟己烷磺酸	PFAS
5-Hydroxy-thiabendazole	Y = 2.282e6X - 3.577e4	R^2: 0.9970	5-羟基噻苯咪唑	PPCPs
Acetpromazine	Y = 3.137e6X - 2.525e6	R^2: 0.9946	乙酰丙嗪	PPCPs
Acetamiprid	Y = 2.574e6X + 3.332e5	R^2: 0.9958	啉虫脒	EDCs
Acetochlor	Y = 9.752e5X - 1.98e5	R^2: 0.9980	乙草胺	Herbicide

部分目标物定量线性方程

Compounds		RT 偏差<0.2 min				同位素及碎片匹配				质量偏差<2 ppm		
1	24.4	Selected	Match Result Name	Measured	RT (Expected)	RT (Delta)	Flag	MZ	RT	IP	FI	m/z (Delta)
1		<input checked="" type="checkbox"/>	1H-Perfluoroheptane 1H-全氟庚烷@RT 7.21	4.9252E07	7.24	-0.03						-0.01892
2		<input checked="" type="checkbox"/>	Clarithromycin 克拉霉素@RT 5.56	4.5653E07	5.50	0.06						-1.35701
3		<input checked="" type="checkbox"/>	Roxithromycin 罗红霉素@RT 5.58	3.3506E07	5.52	0.06						-0.93502
4		<input checked="" type="checkbox"/>	Hexazinone@RT 5.59	2.9612E07	5.55	0.04						0.39644
5		<input checked="" type="checkbox"/>	Amantadine@RT 4.66	1.7652E07	4.64	0.02						-1.25884
6		<input checked="" type="checkbox"/>	PFBA/Perfluorobutanoic acid (Heptafluorobutyric acid) 七氟丁酸@RT 5.47	1.6919E07	5.28	0.19						-0.06098
7		<input checked="" type="checkbox"/>	Isoproturon@RT 5.98	1.3536E07	5.95	0.03						-0.24425
8		<input checked="" type="checkbox"/>	Norfloxacin 诺氟沙星@RT 4.51	4.8880E06	4.45	0.06						-0.73345
9		<input checked="" type="checkbox"/>	Azoxystrobin 啉菌素@RT 6.07	3.2201E06	6.04	0.03						0.74957
10		<input checked="" type="checkbox"/>	PFHxDA/Perfluorohexadecanoic Acid 全氟十六烷酸@RT 10.79	3.0010E06	10.77	0.02						0.94766
11		<input checked="" type="checkbox"/>	PFODA/Perfluorooctadecanoic Acid 全氟十八烷酸@RT 11.29	1.1633E06	11.25	0.04						1.75937

实际废水筛查结果：检出了正模式的抗生素以及负模式的全氟化合物，质量误差< 2 ppm，保留时间偏差<0.2 min，同位素峰形及二级碎片匹配良好



实际废水中克拉霉素定量结果：在废水中浓度为33.24 ng/L



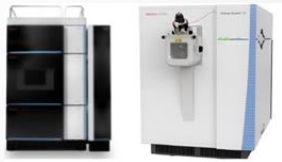
# 靶向分析+非靶向筛查

## Orbitrap Exploris LC/MS高分辨液质-生活饮用水

### 使用HRAM Orbitrap技术与MS/MS通过EPA方法537分析多氟烷基物质的比较

本方案展示一种基于液相色谱-高分辨率精确质量（LC-HRAM）的Orbitrap质谱的技术方法，作为三重四极杆质谱仪的灵敏、准确且可靠的定量替代方案，同时在同一饮用水提取物中检测未知的全氟化合物。

- ✓ HRAM Orbitrap技术符合EPA方法537的灵活性要求
- ✓ Orbitrap高分辨质谱在全扫描和PRM模式下均表现出与三重四极杆相当的灵敏度、特异性及校准线性
- ✓ 全扫描模式对PFOS等支链异构体的定量更准确
- ✓ 结合Compound Discoverer™软件，可基于全扫描数据回溯分析未知PFAS
- ✓ 单次分析可同时完成目标定量和非目标筛查

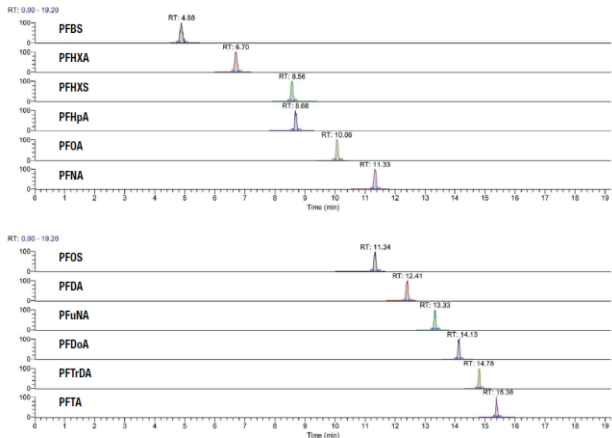


Vanquish UHPLC + Orbitrap Exploris LC/MS 120

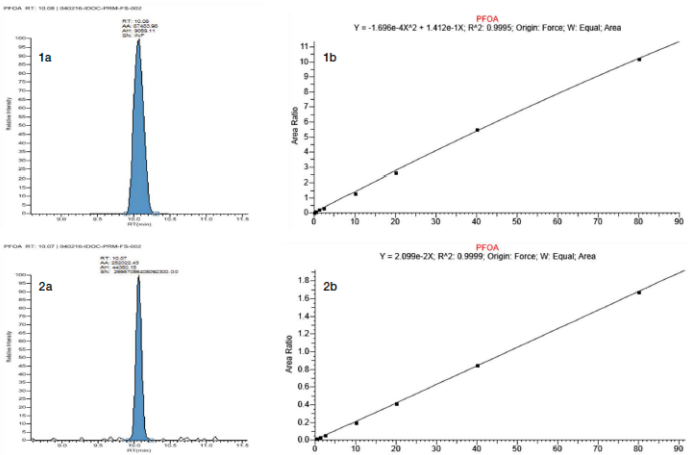
#### 推荐仪器、软件和耗材

- Thermo Scientific™ Vanquish Flex 超高效液相色谱
- Thermo Scientific™ Orbitrap Exploris LC/MS 120 高分辨质谱仪
- 色谱柱：Thermo Scientific™ Hypersil GOLD™ aQ (2.1 × 150 mm, 3 μm)
- 软件：Thermo Scientific™ Compound Discoverer

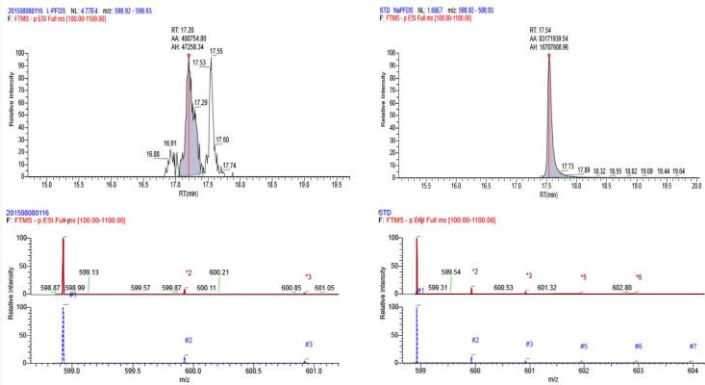
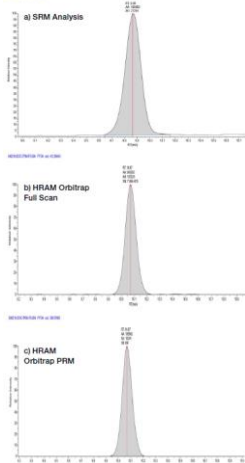
#### 结果与数据



目标化合物全扫描提取离子色谱图，对于2.5 ppt的标准品显示出良好的峰形和信噪比（S/N）



对于0.5 ppt的全氟辛酸（PFOA），比较了全扫描提取离子模式和PRM（平行反应监测）扫描模式，以及0.5至80 ppt范围内的校准线性。（1a, 1b）PRM采用用于量定的主要MS<sup>2</sup>转换；（2a, 2b）用于量定的全扫描提取离子模式



在相似条件下（均为5 μL进样），采用Orbitrap质谱仪和三重四极杆质量分析仪对2.5 ppt的全氟辛酸（PFOA）标准品进行分析。与三重四极杆（QQQ）分析相比，高分辨质谱Orbitrap在定量和灵敏度方面表现更优

一个UCMR3（第三轮未明确规定的污染物监测规则）样品显示含有微量非目标化合物（全氟癸烷磺酸，PFDS）。运行后通过使用内部光谱库，结合同位素模式识别、精确质量和保留时间进行确认来完成化合物的鉴定



## Orbitrap Exploris LC/MS高分辨液质-PFAS综合分析

本方案介绍了一种基于LC-MS的分析策略，结合靶向与非靶向分析策略，在赛默飞™ Orbitrap Exploris™ 120质谱仪上实现药品制造材料提取物中已知和未知PFAS化合物的灵敏检测与鉴定。

- 

## 高分辨LC-MS筛查PFAS的分析策略

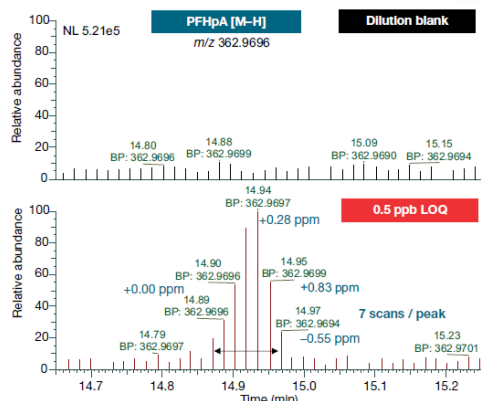
- Thermo Scientific™ Vanquish™ Horizon UHPLC+PFAS分析套件
- Thermo Scientific™ Orbitrap Exploris 120 高分辨质谱仪
- 分析柱：赛默飞™ Hypersil GOLD™ VANQUISH™ C18柱 ( 2.1 × 100 mm, 1.9 μm )
- 捕集柱：赛默飞™ Hypersil GOLD™ C18选择性柱 ( 4.6 × 50 mm, 1.9 μm )
- 软件：Thermo Scientific™ Compound Discoverer™ 3.3 SP3
- 软件：Thermo Scientific™ Chromeleon CDS 7.3.2

[illegible]

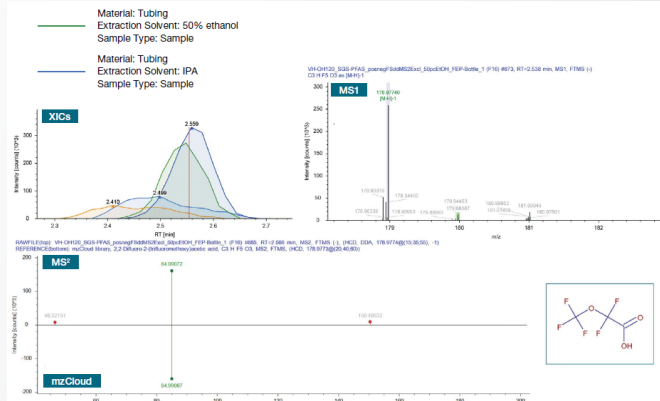
Figure 1 is a scatter plot titled "MS Quantitation" showing the relationship between PFDA concentration (ppb) on the x-axis and counts\*min on the y-axis. The x-axis ranges from 0 to 600 ppb, and the y-axis ranges from 0 to 30,000,000 counts\*min. A linear regression line is shown with  $R^2 = 0.008$ . An inset shows a zoomed-in view of the data points at low concentrations (0 to 200 ppb).

PFDA (ppb)	counts*min
0	0
25	1,000,000
100	5,000,000
200	10,000,000
500	25,000,000

PFOA的校准曲线, 线性范围为 0.1 - 500 ppb, 采用 1/X 加权方式, 相关系数  $R^2 = 0.998$



Orbitrap Exploris 120 MS 的快速极性切换保持了极高的质量精度和扫描速度，能够对色谱峰进行充分采样 ( $\geq 7$  次扫描/峰)，上图为在稀释空白和最低定量限水平下 PFHpA [M-H]<sup>-</sup> 的 XICs



在 2.5 分钟处检测到在提取物中存在分子量为 178.9774 的化合物, 经 MS2 与 mzCloud 数据库匹配以及匹配同位素模式, 确认其为 2,2-二氟-2-(三氟甲氧基)乙酸



# 样品前处理+靶向分析+非靶向筛查

## Orbitrap Exploris GC/MS高分辨气质-非饮用水

### 基于SPME Arrow与Orbitrap Exploris GC的环境样品中挥发性PFAS分析

本方案旨在展示一种基于固相微萃取（SPME）Arrow与高分辨精确质量（HRAM）赛默飞™ Orbitrap™ Exploris™ GC质谱联用技术的PFAS灵敏定量方法，高分辨精确质量（HRAM）Orbitrap质谱技术同时提供了更灵活的解决方案，其全扫描模式可同时捕获所有离子信息，支持靶向与非靶向分析，并能通过谱库匹配追溯筛查其他污染物

- ✓ 高效前处理：自动化SPME Arrow减少污染风险，回收率良好
- ✓ 灵活分析：全扫描HRAM数据支持靶向定量与非靶向筛查
- ✓ 低检测限：0.1–1.4 ng/L，适用于复杂基质
- ✓ 实际应用：所有样品均检出PFAS，部分浓度显著超标（如原污水）

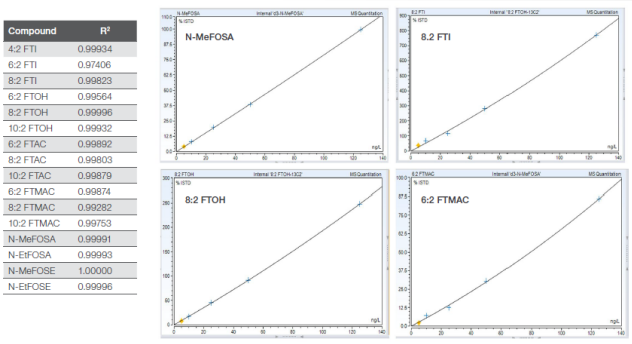
#### 仪器、软件和耗材

- TriPlus™ RSH SMART自动进样器及1.1 mm PDMS 100 μm fiber
- TRACE 1610 GC系统
- Orbitrap Exploris GC高分辨质谱，EI源
- 色谱柱：TG-5SiMS（30 m × 0.25 mm I.D. × 0.25 μm）
- 软件：Chromeleon CDS 7.3.2



Orbitrap Exploris GC高分辨质谱仪+TriPlus™ RSH SMART自动进样器

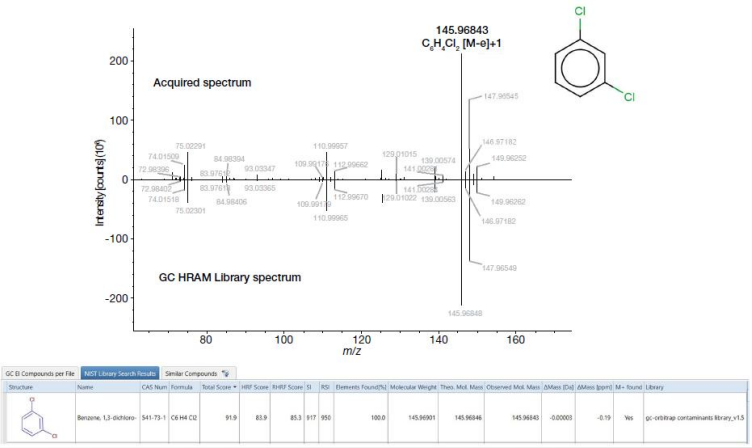
#### 结果与数据



6种目标化合物的线性结果，和部分化合物线性曲线

Compound	25 ng/L spike		125 ng/L spike	
	Recovery (%)	RSD (%)	Recovery (%)	RSD (%)
6:2 FTOH	102.8	4.0	105.1	7.4
8:2 FTOH	103.1	1.4	114.5	1.7
10:2 FTOH	84.5	7.4	87.9	5.0
6:2 FTAC	99.7	6.1	98.8	7.9
8:2 FTAC	87.3	21.8	71.1	15.8
10:2 FTAC	76.1	10.3	83.1	15.0
6:2 FTMAC	90.5	4.8	84.3	6.5
8:2 FTMAC	82.0	9.8	64.9	7.7
10:2 FTMAC	78.4	8.5	72.7	6.6
N-Me-FOSA	98.7	2.3	99.6	1.1
N-Et-FOSA	97.6	1.4	102.4	1.8
N-Me-FOSE	96.0	3.8	100.4	2.3
N-Et-FOSE	92.6	2.3	95.6	5.5

25和125ng /L加标河水中挥发性PFAS化合物的回收率。进行了6次重复分析



样品质谱图（上图）与匹配的Orbitrap GC-MS污染物谱库中二氯苯的高分辨精确质量谱图（下图）及搜索结果表。S<sub>1</sub>得分917表明匹配度极高。分子离子（m/z 145.96846）的质量精度为0.2 ppm，进一步增强了鉴定结果的可信度。



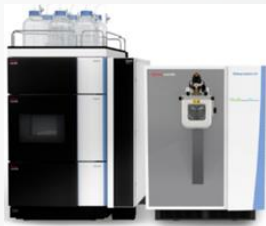
# 非靶向筛查

## Orbitrap Exploris LC/MS高分辨液质-PFAS综合筛查

### 用于 PFAS 高置信度识别的综合性非靶向工作流程

非靶向 PFAS 工作流程中最重要的步骤之一是为最终的 PFAS 注释分配置信度级别,由于质量分析器技术的差异导致质量分辨率和质量精度不同,以及对谱库、数据库和工具的不同使用,PFAS 注释置信度的判定可能存在广泛的不一致性。为了评估测试实验室之间的这些不一致性,美国国家标准与技术研究院 (NIST) 开展了全氟和多氟烷基物质-非靶向分析实验室间研究 (PFAS NTALLS)。本应用说明展示了一个综合性非靶向 PFAS 注释工作流程,该流程将 Orbitrap Exploris 240 质谱仪的样品分析与使用 Compound Discoverer 3.4 软件的强大自动化数据分析和可视化相结合。通过对来自 PFAS NTALLS 的“未知”样品的分析,解释该软件如何在统一的非靶向数据处理工作流程中利用 PFAS 专用数据库、参考谱库以及覆盖超过 40,000 种 PFAS 的计算机生成谱库。介绍了能够完整且一致地实施 Schymanski 注释置信度分级标准的软件功能,从而解决了注释差异问题。

- ✓ 使用Orbitrap Exploris™ 质谱仪平台采集的高分辨精确质量 (HRAM) 数据,能够高置信度地识别未知的 PFAS
- ✓ Compound Discoverer™ 软件 (3.4版) 提供了市面上最全面的 PFAS 分析工作流程,涵盖超过 40,000 种 PFAS
- ✓ Compound Discoverer 软件能够完整且一致地应用 Schymanski 注释置信度分级标准,包括可定制的多个谱库和数据库的优先级排序
- ✓ 不仅适用于 PFAS 分析,也适用于其他非靶向应用,包括可提取物和可浸出物、杂质分析、食品安全、毒理学等

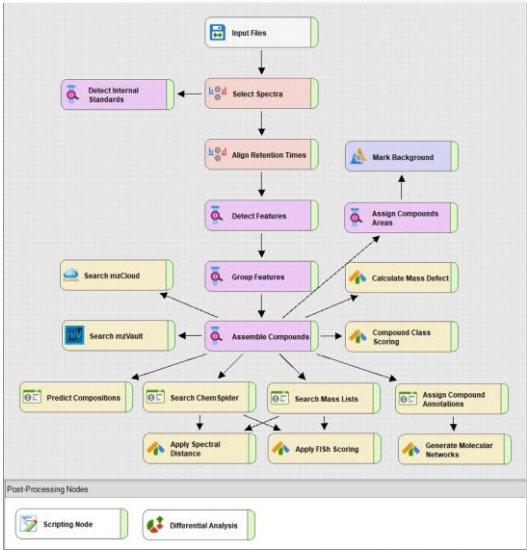


Vanquish UHPLC + Orbitrap Exploris LC/MS 240

#### ❑ 仪器、软件和耗材

- Thermo Scientific™ Vanquish™ Flex UHPLC+PFAS分析套件
- Thermo Scientific™ Orbitrap Exploris 240 高分辨质谱仪, EASY-IC™ (内部校准) 离子源
- 分析柱: 50 × 3 mm C18 column
- 捕集柱: 30 × 3 mm C18 columna
- 软件: Thermo Scientific™ Compound Discoverer™ 3.4

#### ❑ 结果与数据

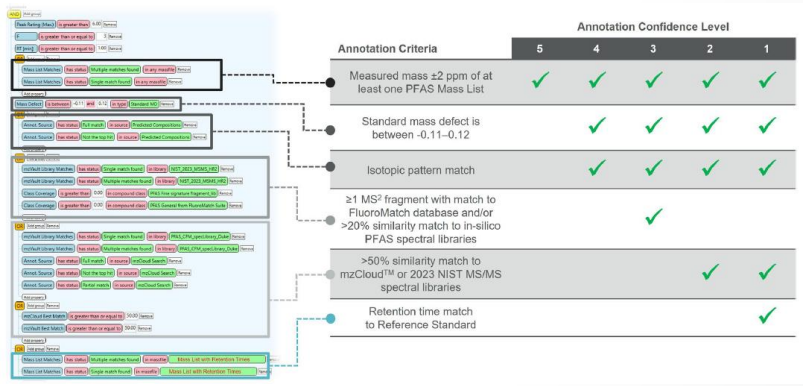


Compound Discoverer 软件的工作流程编辑器,显示了用于自动处理从研究样品的 LC-MS 分析中获取的数据文件的步骤。该工作流程是从软件附带的模板“PFAS Unknown ID”构建的。该工作流程使用多个谱库、化合物数据库、PFAS 碎片库、元素组成确定等来注释化合物

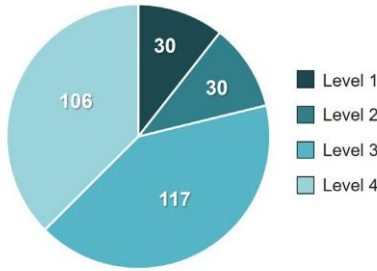
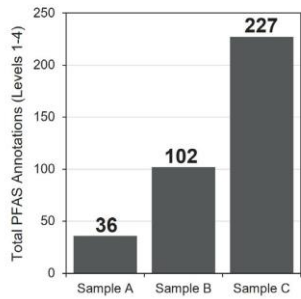


# 非靶向筛查

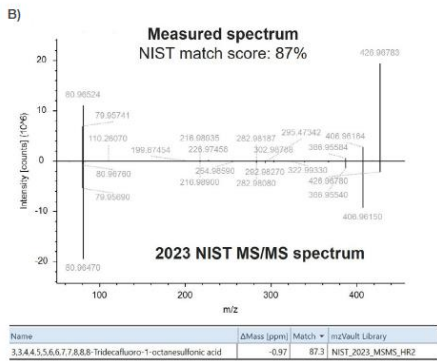
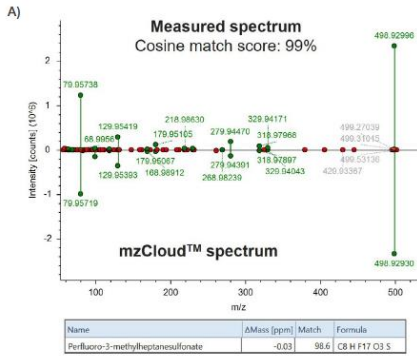
## Orbitrap Exploris LC/MS高分辨液质-PFAS综合筛查



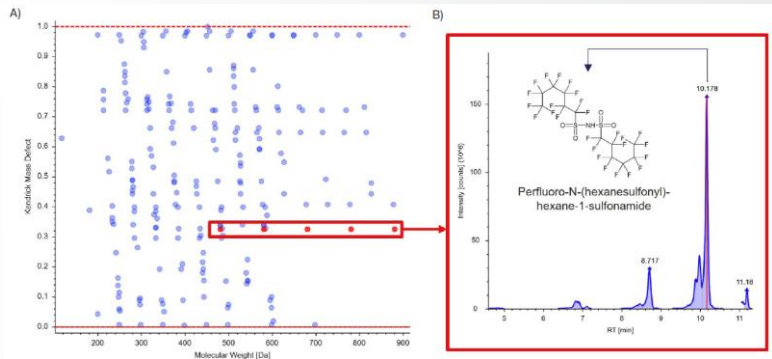
使用 Compound Discoverer 软件（3.4 版）中的数据过滤工具（Data Filter）对样品中检测到的化合物进行过滤



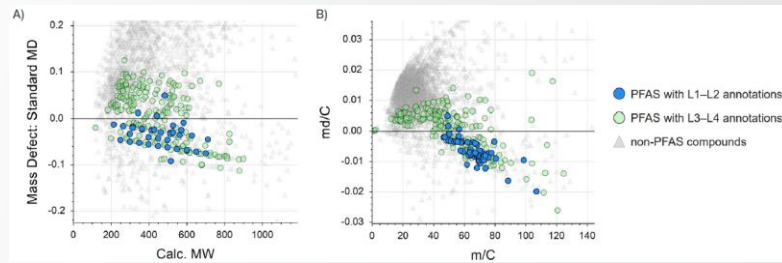
(A) 每份样本中检测到并标注为 1 至 4 级置信度的全氟和多氟烷基物质的总数；  
(B) 所有全氟和多氟烷基化合物在所有样本中的分布情况，按 1 至 4 级标注的置信度级别划分



使用参考谱库实现 2 级注释置信度的示例。(A) 使用 mzCloud 高级质谱数据库鉴定全氟-3-甲基庚烷磺酸盐（perfluoro-3-methylheptanesulfonate）（全氟辛烷磺酸盐的支链异构体），以及 (B) 使用 2023 NIST 串联质谱库鉴定 6:2 氟调聚物磺酸（6:2 fluorotelomer sulfonic acid）



(A) 使用 Compound Discoverer 软件质量亏损绘图工具创建的研究数据的 Kendrick 质量亏损图，Kendrick 公式设置为“CF2”。属于特定双全氟-N-烷基磺酰胺（bis-perfluoro-N-alkyl sulfonamides (bis-FASi)）同系物系列的数据点以红色突出显示。(B) 该系列在受 AFFF 污染的土壤样品（样品 C）中的叠加提取色谱图。

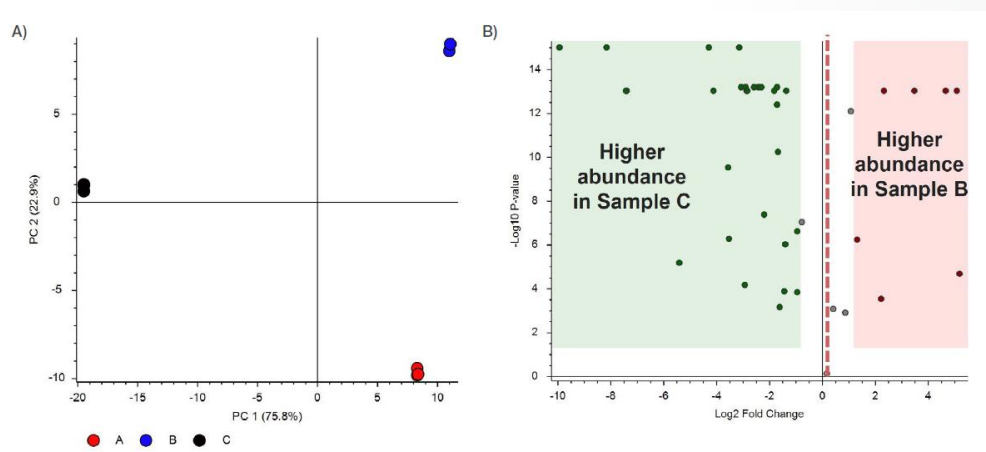


(A) 标准质量亏损图和 (B) 使用 Compound Discoverer 软件的结果图表工具创建的正交 MS1 图

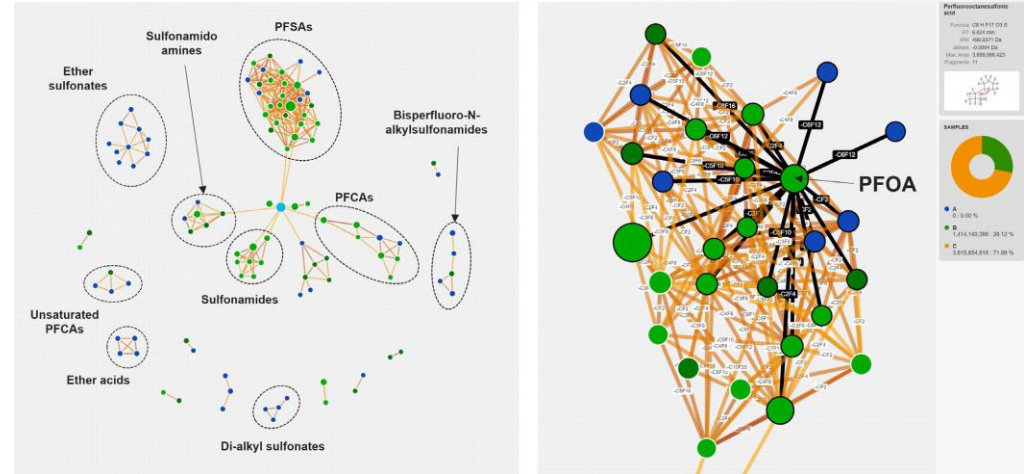


# 非靶向筛查

## Orbitrap Exploris LC/MS 高分辨液质-PFAS综合筛查



使用统计分析图评估三个分析样品的 PFAS 组成。PCA 图 (A) 显示了样品 PFAS 组成之间的显著差异。样品 B 和 C 的差异分析 (B) 揭示了超过 20 种 PFAS 化合物在样品 C 中水平更高。进一步调查确定这些化合物中的大多数属于一系列全氟羧酸和全氟磺酸。



在 Compound Discoverer 软件中创建的综合分子网络图 (Comprehensive Molecular Network diagram)，使用 Fluoromatch PFAS 碎片数据库和通用 PFAS 碎片化合物类别 (general PFAS fragment compound class) 作为碎片种子 (fragment seeds) 来生成结构相关化合物的簇



# 非靶向筛查

## 热脱附-气相色谱质谱法-空气

### 气质联用结合热脱附技术筛查水成膜泡沫(AFFF)使用过程中释放的挥发性PFAS

本方案展示了如何通过热脱附仪与气相色谱-质谱法 (TD-GC-MS) 的联用，监测水成膜泡沫 (AFFF) 使用过程中释放的全氟和多氟烷基物质 (PFAS)。结果表明，TD-GC-MS 可用于分析目标化合物和非目标化合物的筛查，使研究人员能够更深入地了解 AFFF 排放情况。

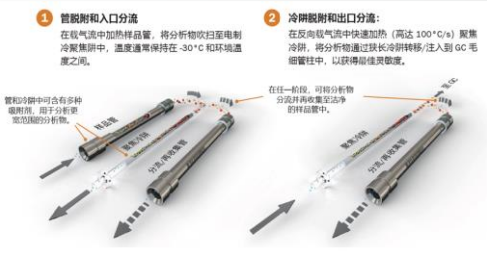
- ✓ 为监测空气中痕量水平的多种目标和非目标 PFAS 挥发物提供了一种稳定且易于自动化的方法
- ✓ 采样技术的灵活性使其可应用于许多空气监测场景
- ✓ 无溶剂工作流程可优化灵敏度，简化采样操作并降低出现分析误差的风险
- ✓ TD 与 GC-MS 技术相结合，有助于检测未知的非目标化合物



TD100-xr热脱附仪结合ISQ7610 GCMS联用系统

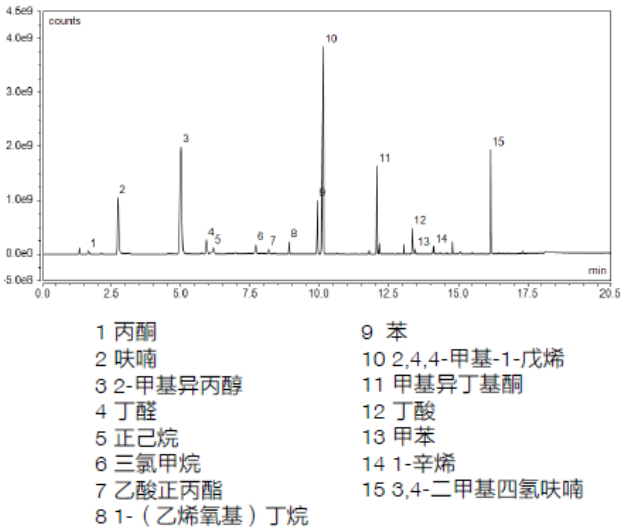
#### 仪器、软件和耗材

- Markes International™ TD100-xr™ 热脱附仪
- TRACE™ 1610气相色谱仪
- ISQ 7610 气相色谱质谱联用仪
- 色谱柱：TG-624SiIMS 60 m×0.25 mm×1.4μm ( P/N: 26059-3330 )
- 软件：Chromeleon CDS



二阶热脱附示意图

#### 结果与数据



AFFF样品的总离子色谱图，其中选定峰显示除 PFAS化合物外鉴别的其他VOC

峰编号	RT	化合物	分子式
1	4.11	全氟己烷	C <sub>6</sub> F <sub>14</sub>
2	5.33	1,1,1,2,2,3,3,4,4,5,5,6,6-十三氟己烷	C <sub>6</sub> HF <sub>13</sub>
3	9.43	1H,1H,2H-全氟-1-辛烯	C <sub>8</sub> H <sub>3</sub> F <sub>13</sub>
6	11.90	全氟己基碘	C <sub>6</sub> F <sub>13</sub> I
10	17.30	3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,8-十三氟-1-碘-1-辛烯-1	C <sub>8</sub> H <sub>2</sub> F <sub>13</sub> I
11	18.42	1H,1H,2H,2H-全氟辛基碘	C <sub>8</sub> H <sub>4</sub> F <sub>13</sub> I

通过谱库定性，疑似 PFAS 化合物



# 非靶向筛查

## 高分辨质谱软件工作流程

### 基于高分辨质谱（HRAM）的全氟和多氟烷基物质（PFAS）非靶向分析综合软件工作流程

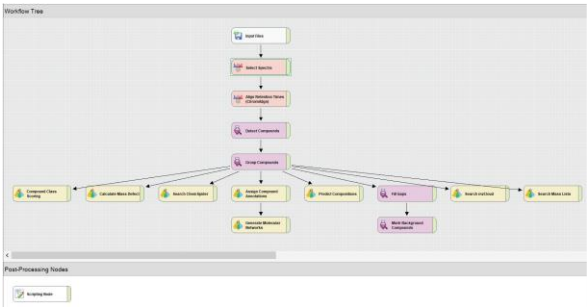
本方案介绍了Thermo Scientific™ Compound Discoverer™ 软件中新型非靶向PFAS分析工作流程的功能。Compound Discoverer软件是分析复杂基质中PFAS的强力平台，提供一站式非靶向解决方案。通过mzCloud谱库相似性搜索、正模式计算机模拟碎裂、负模式PFAS特征产物离子库匹配，实现无与伦比的分析能力。

- ✓ 整合文献分析方法、PFAS数据库、正交判别的自定义节点及多样化可视化工具为PFAS分析提供简化途径
- ✓ 集成主流非靶向PFAS分析技术的综合工作流程
- ✓ 适用于从简单水体、复杂市政垃圾渗滤液到生物组织等多种基质中采集的高分辨精确质量（HRAM）数据

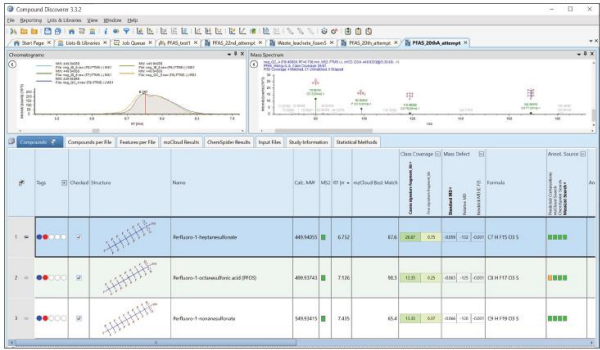
#### 仪器、软件和耗材

- Thermo Scientific™ Compound Discoverer™ 软件
- Vanquish™ Core Binary UHPLC系统（配备PFAS改装套件）
- Orbitrap Exploris™ 120高分辨液质

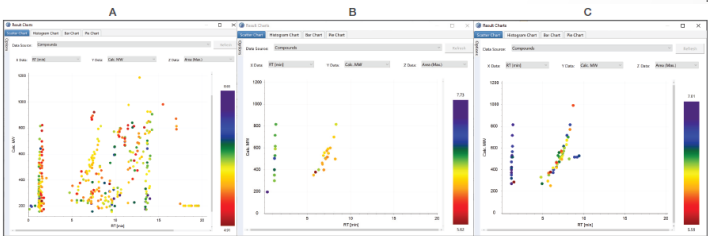
#### 结果与数据



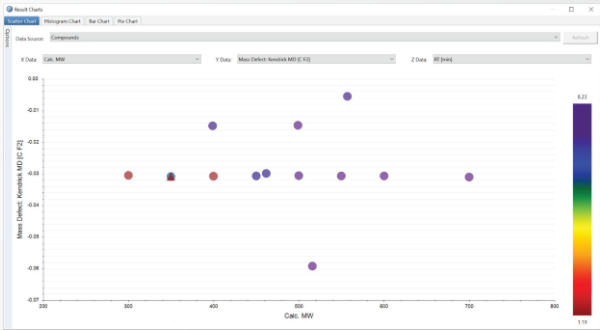
该流程图展示了PFAS样本分析的节点及其连接关系



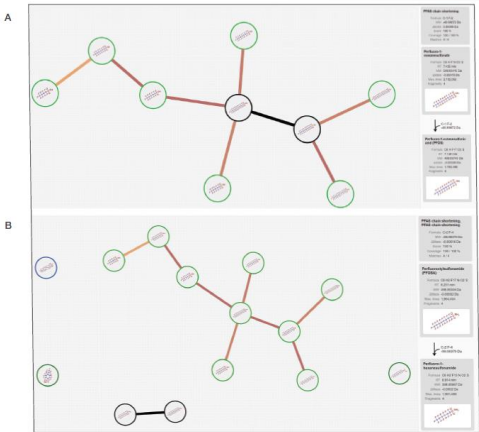
结果视图提供交互式分析数据界面，表格包含LC-MS/MS分析的保留时间、m/z、碎裂库匹配分数、分子式等信息，并展示色谱叠加图和质谱图



A为无过滤（373个化合物）；B为碎片筛选（保留28个）；C为碎片无关正交判别筛选（保留60个），Z轴为对数变换



内置结果图展示CF<sub>2</sub> Kendrick质量缺陷，标注同源系列：全氟丁磺酸（C<sub>4</sub>HF<sub>9</sub>O<sub>3</sub>S）、全氟戊磺酸（C<sub>5</sub>HF<sub>11</sub>O<sub>3</sub>S）、全氟己磺酸（C<sub>6</sub>HF<sub>13</sub>O<sub>3</sub>S）



A展示基于类别的同源系列聚类；B展示全氟磺酸同源物集群



# 总有机氟测定

## 利用燃烧离子色谱法（C-IC）增强PFAS筛查

### 通过燃烧-离子色谱法实现废水中PFAS化合物的增强筛查

燃烧-离子色谱法（Combustion-ion chromatography, C-IC）已被证明可作为PFAS的一种筛查方法；PFAS化合物被转化为氟化氢（HF），随后产生的氟化物通过带抑制电导检测的离子色谱（Ion Chromatography, IC）进行分析。该技术被纳入EPA方法1621中，用于非靶向测定PFAS作为可吸附有机氟。在本应用中，EPA方法1621在离线的赛默飞世尔科技™ Cindion™ 带液体和固体样品处理功能的Cindion燃烧/吸收模块以及Inuvion™ 免试剂离子色谱（RFIC™）系统上实施。该解决方案由于提高了信噪比、改善了加标标准的回收率、在更小占地面积下实现了与先前结果相当的重现性，同时提供了更高的灵敏度。

- ✓ 吸附模块的设计最大限度地减少污染。吸附模块设计为一次半自动地从六个水样中吸附PFAS，提高样品通量
- ✓ 改进的 C-IC 工作流程解决方案获得更好的美国 EPA 方法 1621 的结果：  
MDL（1.7 µg/L vs. 2.3 µg/L），重现性RSD（4.5% vs. 4.6%），准确度（82–101% vs. 70–120%）
- ✓ C-IC 系统由单一软件控制—Chromeleon™ 色谱数据系统 (CDS)，提高了数据处理和系统管理效率



#### 仪器、软件和耗材

- Thermo Scientific™ Cindion™燃烧/吸收模块，带Cindion™ C-IC 固体样品套件
- Thermo Scientific™ Cindion™固体/液体自动进样器
- Thermo Scientific™ Cindion™吸附模块，包含六个色谱柱支架
- Thermo Scientific™ Dionex™ Inuvion™ 带 RFIC 的 IC 系统
- Thermo Scientific™ Dionex™ IonPac™ AG24 保护柱和 IonPac AS24 分析柱, 2 mm
- Thermo Scientific™ Dionex™ EGC 500 KOH 淋洗液发生器套件
- Thermo Scientific™ Dionex™ CR-ATC 600 电解捕获柱
- Thermo Scientific™ Dionex™ Inuvion™ RFIC 淋洗液脱气模块
- Thermo Scientific™ Dionex™ ADRS 600 抑制器，2 mm
- Thermo Scientific™ Dionex™ IC PEEK Viper™ 接头管路组件套件
- 100 µL PEEK 样品定量环

#### 结果与数据

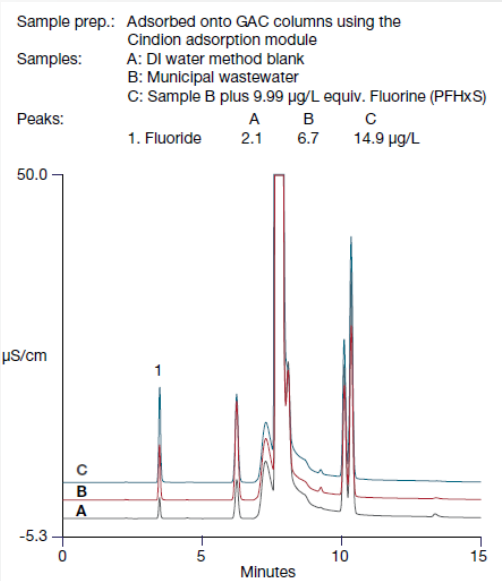
EPA Method 1621	Prescribed limit	Experimental value
IDA (Section 9.2.1)	Recovery within ± 20%	Recovery = 103.2%
IDP (Section 9.2.1)	RSD < 20 %	RSD = 4.47%

对准确性和精密度的初步论证

Sample	Total fluoride (µg/L)		Recovered (%)
	Measured*	Added	
Municipal drinking water	1.81 ± 1.02	8.0	81.6 ± 1.6
		23.99	101 ± 16
Blended wastewater	4.86 ± 0.55	8.0	93.6 ± 14
		23.99	86.5 ± 5
Percolation pond water	0.29 ± 0.26	8.0	101 ± 5
		23.99	94.5 ± 7.3

\*After MBs were subtracted

添加PFHxS标准品的样品结果及回收率结果



AOF - C-IC法测定废水中PFAS



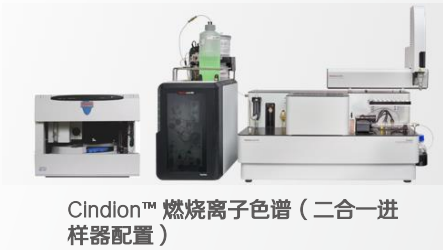
# 总有机氟测定

## 利用燃烧离子色谱法（C-IC）增强PFAS筛查

### 利用Cindion燃烧离子色谱系统进行总有机氟分析

本方案开发了一种使用燃烧-离子色谱法 (C-IC) 测量食品包装材料中 TOF 的方法。赛默飞世尔™ Cindion™ C-IC 系统将配备试剂离子色谱 (RFIC™) 的Inuvion™ IC 系统与Cindion™ 燃烧/吸收模块相结合测定总氟，同时，通过使用AS-AP 自动进样器直接进样通过离子色谱仪来测定总无机氟，最终确定样品中的总有机氟。

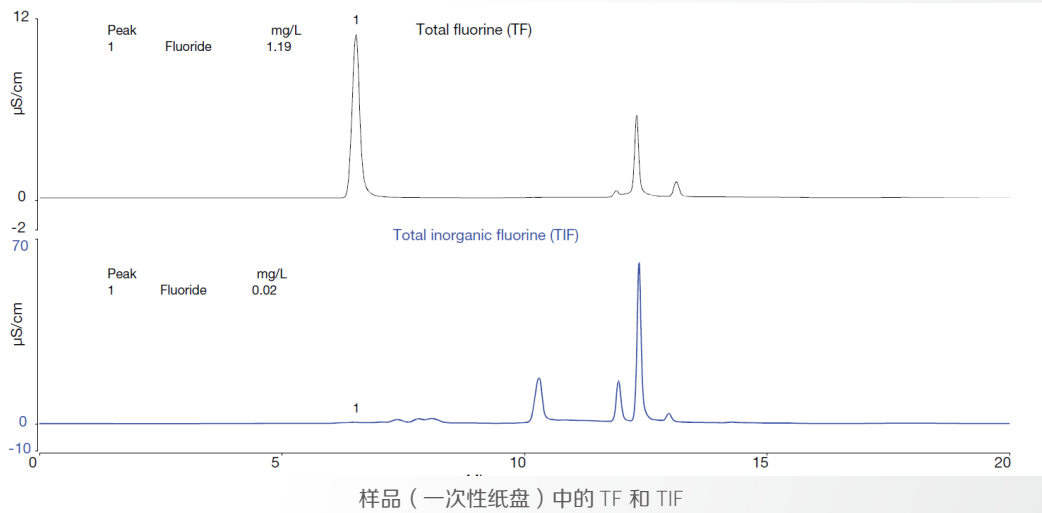
- ✓ Cindion™ 燃烧/吸收模块采用Z 型折叠燃烧管在多个点引入氧气，优化了燃烧效率
- ✓ 多功能二合一配置，可通过AS-AP 自动进样器在 C-IC 和独立 IC 之间无缝切换，显著提高了分析效率和便利性
- ✓ C-IC 系统由单一软件控制—Chromeleon™ 色谱数据系统 (CDS)，提高了数据处理和系统管理效率
- ✓ 该方法为食品接触材料中 PFAS 全面筛查提供了一个有价值的工具



### 仪器、软件和耗材

- 配备Thermo Scientific™ Dionex™ AS-AP 自动进样器的Thermo Scientific™ Dionex™ Inuvion™ 系统
- Thermo Scientific™ Cindion™燃烧/吸收模块，带Cindion™ C-IC 固体样品套件
- 色谱柱：Thermo Scientific™ Dionex™ IonPac™ AS24 Analytical Column (2 x 250 mm) (P/N 064153)
- 保护柱：Thermo Scientific™ Dionex™ IonPac™ AG24 Guard Column (2 x 50 mm) (P/N 064151)
- 软件：Chromeleon CDS

### 结果与数据



Sample	TF	TIF	TOF (TF-TIF)
1	1089	0.42	1088.6
2	1346	0.29	1345.7
3	2151	0.20	2150.8

食品接触材料中的 TOF，ppm (μ g/g) (n=3, RSD<8%)



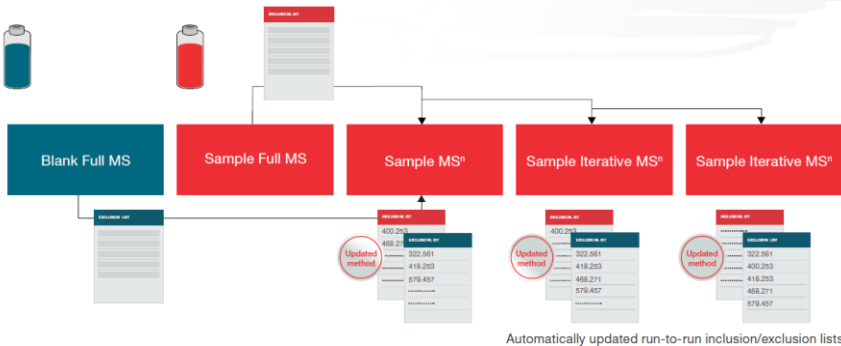
# PFAS数据处理

## 数据处理技术与软件应用

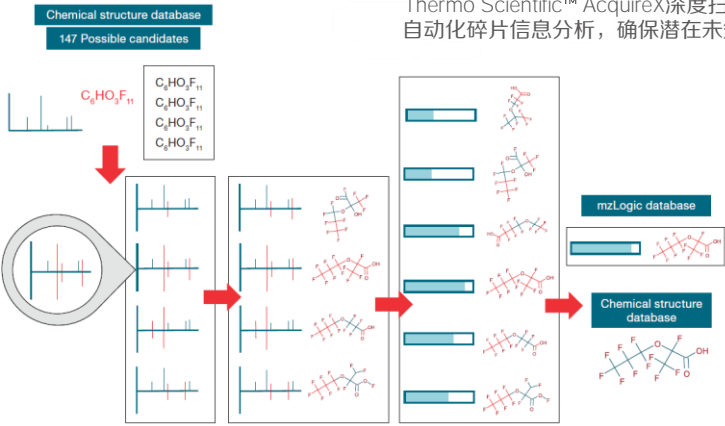
### 借助合适的设备和软件，"永久化学品"无需永久分析

从低水平定量到识别日益增长的新型PFAS化合物及其代谢物，种种挑战引发了人们对漏检新兴关注变体的担忧，实验室需要配备多种PFAS检测能力，专注于已知目标物、未知物的可靠鉴定以及新兴威胁的分析。强大且易用的软件是提升实验室生产力的关键，帮助应对当前和未来的核心挑战。软件需求因技术配置和实验室目标而异，可能包括合规工具、网络或企业云功能、跨平台仪器控制、数据自动化、智能数据处理等。选择合适的软件可简化培训、减少错误并最小化实验室干扰，从而充分挖掘数据价值。

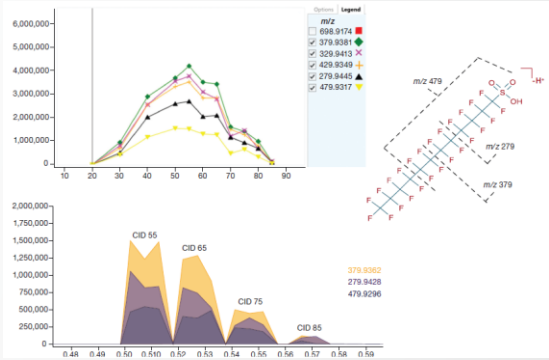
针对已知PFAS化合物的高通量靶向分析，三重四极杆质谱仪结合Thermo Scientific™ TraceFinder™软件或Thermo Scientific™ Chromeleon™色谱数据系统软件是最佳选择。若需同时筛查未知化合物并支持回溯性新化合物搜索，高分辨精确质量（HRAM）质谱系统更为适合。检测和识别新兴威胁是真正的挑战。Thermo Scientific™ Compound Discoverer™软件与Thermo Scientific™ mzCloud™质谱碎片库的结合可加速未知物鉴定，在缩短周转时间的同时提供准确结果。



Thermo Scientific™ AcquireX深度扫描工作流程示意图：通过全自动化碎片信息分析，确保潜在未知PFAS化合物的全覆盖检测



未知物鉴定流程示例：基于元素组成筛选出147个候选结构。通过整合mzCloud/mzVault碎片谱与结构数据库，利用谱图重叠确定匹配可信度，最终锁定最可能结构



SRM信息可直接从mzCloud谱库导入TraceFinder软件，用于Thermo Scientific™ TSQ™ Plus质谱仪。碎片裂解曲线可探索每个目标物的最佳子离子以确定SRM离子对。上图展示了mzCloud谱库中每个碎片的碰撞能量信息，支持快速创建并转移优化参数至日常分析。以全氟十二烷磺酸为例：mzCloud谱库中的碎片裂解曲线（左上）、结构裂解路径（右上）与三重四极杆验证结果（下），证明利用高分辨碎片数据自动化创建SRM的可行性

#### 从样品到结构：Compound Discoverer软件助力深度解析

通过将高质量MS和MS²数据转化为已知化合物，获取更深入见解。Compound Discoverer软件可轻松实现化合物注释、样本组间差异分析及生化通路关联研究。

#### TraceFinder软件：简化高通量筛查与定量

将发现成果直接转移至高通量检测。TraceFinder软件通过可定制界面和方法模板，无缝整合化合物数据库与质谱库，实现快速方法建立和谱图匹配验证，提升筛查信心。

#### mzCloud质谱库：可靠化合物鉴定

依托全球最大的LC-MS²高分辨碎片谱库，利用化学多样性丰富的MS³数据，确保成分鉴定的高置信度。

#### Chromeleon CDS软件：高效合规分析

满足法规要求时，Chromeleon CDS软件提供卓越的质谱数据处理与自动化功能，支持定量、靶向筛查及蛋白质/多肽分析。除控制25种以上赛默飞质谱仪外，还可远程连接650多种色谱设备（LC、IC、GC），适用于企业级环境。

#### 如何获取PFAS分析数据处理方案的更多信息？

[thermofisher.com/pfas-testing](https://thermofisher.com/pfas-testing)：涵盖样品前处理、分离、检测与数据处理的完整方案

[thermofisher.com/compounddiscoverer](https://thermofisher.com/compounddiscoverer)：mzCloud/mzVault谱库在未知物鉴定中的应用

[thermofisher.com/tracefinder](https://thermofisher.com/tracefinder)：高通量筛查与快速报告生成指南

[thermofisher.com/chromeleon](https://thermofisher.com/chromeleon)：企业级软件与多厂商仪器控制方案



赛默飞世尔科技

**上 海**  
上海市浦东新区新金桥路27号3,6,7号楼  
邮编 201206  
电话 021-68654588\*2570

**成 都**  
成都市临江西路1号锦江国际大厦1406 室  
邮编 610041  
电话 028-65545388\*5300

**南 京**  
南京市中央路201号南京国际广场南楼1103室  
邮编 210000  
电话 021-68654588\*2901

**北 京**  
北京市东城区北三环东路36号环球贸易中心C座7层/8层  
邮编 100000  
电话 010-87946888

**沈 阳**  
沈阳市沈河区惠工街10号卓越大厦3109 室  
邮编 110013  
电话 024-31096388\*3901

**武 汉**  
武汉市东湖高新技术开发区高新大道生物园路  
生物医药园C8栋5楼  
邮编 430075  
电话 027-59744988\*5401

**广 州**  
广州国际生物岛寰宇三路36、38号合景星辉广  
场北塔204-206 单元  
邮编 510000  
电话 020-82401600

**西 安**  
西安市高新区科技路38号林凯国际大厦  
1006-08单元  
邮编 710075  
电话 029-84500588\*3801

**昆 明**  
云南省昆明市五华区三市街6号柏联广场写字  
楼908单元  
邮编 650021  
电话 0871-63118338\*7001

欲了解更多信息，请扫描二维码关注我们的微信公众账号

赛默飞世尔科技在全国共有21个办事处。本资料中的信息，说明和技术指标如有变更，恕不另行通知。



热线 800 810 5118  
电话 400 650 5118  
[www.thermofisher.com](http://www.thermofisher.com)

