

PFAS 侦探日记：从蛛丝马迹到真相大白之气质联用

破案实录

原创 飞飞 [赛默飞色谱与质谱中国](#)

关注我们，更多干货和惊喜好礼



步峰

化学界的"不死小强"——PFAS

想象一下，1940 年代的化学家们像疯狂科学家一样在实验室里捣鼓：“嘿，我们要创造一种永不消失的材料！”于是 PFAS 这个“化学界的小强”就诞生了。

这些分子就像一群穿着防弹衣的碳原子和氟原子，手拉手组成了“化学界最牢固的兄弟会”。它们的 C-F 键比钢铁直男还固执，让 PFAS 获得了“永恒化学物质”的江湖名号。

PFAS 拥有世界上最难破坏的单键——C-F 键，但这同时也让它们成为最难去除的物质

最初发明特氟龙的人大概是这样想的："让煎饼永远不粘锅？太棒了！"谁知道这货后来不仅赖在锅上不走，还偷偷溜进水源、土壤甚至人体里开起了"永驻派对"。

这玩意儿堪称化学界的"僵尸"——打不死、煮不烂、甩不掉。喝进肚子像办了终身会员卡，在你器官里开永续派对；洒在土壤里比 502 胶水还黏人，能送走十代蟑螂子孙。

更绝的是它擅长"分身术"，从消防泡沫到不粘锅，从防水外套到外卖纸盒，像极了那个总在同学会突然冒出来的显眼包。最气人的是，当你终于决定"戒掉"它时，身体会无辜摊手："亲，降解服务需排队……大约 1000 年？"

科学家挠头：当初谁说"永久材料"是优点的？现在全人类都在替这个冷笑话买单。



PFAS 检测界的"福尔摩斯"——气质联用仪の搞笑自白

大家好，我是气质联用仪（GC-MS），江湖人称"化学侦探"。让我来扒一扒分析 PFAS（这群号称"永久化学品"的顽固分子）时，我的三大绝活：

鼻子比狗灵：

哪怕 PFAS 躲在样品里玩"大家来找茬"，我的质谱检测器也能像闻到螺蛳粉一样精准锁定它们，灵敏度堪比在游泳池里检测一滴奶茶！

拆马甲专家：

PFAS 家族动不动就换马甲（同分异构体），但我的气质联用仪就像 Tony 老师，管你什么结构，统统给你梳得明明白白。

快闪达人：

隔壁仪器还在慢悠悠泡茶（萃取）呢，我这边已经"唰唰唰"出结果了（可采用 SPME 等快速处理技术），老板再也不用担心实验员熬夜等数据猝死啦！



言归正传，气相色谱-质谱联用法作为 PFAS 的常规检测方法之一，非常适合分析短碳链和挥发性的 PFAS 化合物，下面我们来看看具体方案：

挥发性 PFAS 的常规靶向分析

ISQ 7610 单四极杆气质联用仪作为常规分析手段，可以用来快速定量分析检测纺织品，食品，环境中的 PFAS。例如国标 GB/T 31126.2-2024 就是采用 GCMS 测定纺织品中的 PFAS。该方法快速简便、耗时短，具有良好的灵敏度、准确度和精密度，为全氟化合物的风险监控提供了一种快速、高效、可靠的分析手段。

方法适用于样品中全氟烷基醇类、全氟烷基丙烯酸酯类的测定

色谱分离时间<10 分钟，通量高

ISQ7610 具有行业内领先的灵敏度和稳定性

NeverVent 技术可以实现免卸真空色谱柱更换和离子源维护

易于操作的变色龙软件，可实现快速方法建立及高通量数据处理

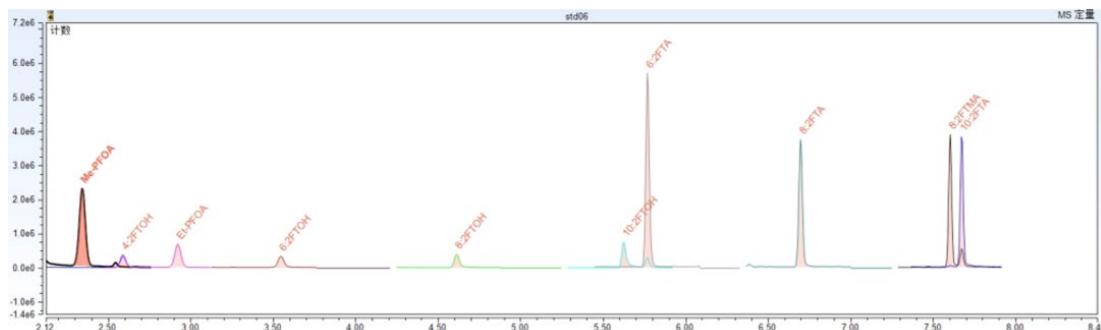


样品净化和收集

ISQ7610 GCMS 联用系统

Chromeleon CDS

(点击查看大图)



0.500 μg/L PFCs 标准品溶液谱图 (点击查看大图)

序号	化合物名称	判定系数	10 μg/L RSD%(n=8)	500 μg/L RSD%(n=8)	检出限 (μg/L)
1	全氟辛酸甲酯 (Me-PFOA)	0.998	2.34	1.03	0.25
2	全氟丁基乙醇 (4:2FTOH)	0.998	2.58	2.53	3.23
3	全氟辛酸乙酯 (Et-PFOA)	0.999	2.92	1.56	3.02
4	全氟己基乙醇 (6:2FTOH)	0.998	3.54	1.87	3.68
5	全氟辛基乙醇 (8:2FTOH)	0.999	1.60	1.64	3.08
6	全氟癸基乙醇 (10:2FTOH)	0.998	2.62	2.45	1.76
7	全氟己基乙基丙烯酸酯 (6:2FTA)	0.999	1.76	1.04	0.05
8	全氟辛基乙基丙烯酸酯 (8:2FTA)	0.998	3.69	3.11	0.54
9	2- (全氟辛基) 乙基甲基丙烯酸酯 (8:2FTMA)	0.999	2.60	1.60	0.52
10	全氟癸基乙基丙烯酸酯 (10:2FTA)	0.999	3.67	2.33	1.36

10 种 PFCs 方法学数据结果 (点击查看大图)

滑动查看更多

环境空气中和废气中痕量 PFAS 的靶向定量分析

由于环境空气中 PFAS 含量较低, 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, 14 分钟内同时分析 19 种中性和离子型 PFAS, 同时实现高灵敏度分析 (基于 20 L 采样体积计算的平均方法检测限 (MDL) 为 780 pg/m³), 符合 HJ 1392-2024, ASTM D8591-24 等国内外标准, 为空空气中痕量水平 (低于 ppt 级) 的 PFAS 挥发物提供了一种稳定且自动化的方法

使用 TD-GC-MS/MS 直接分析空气中的 PFAS

TSQ9610 较单四极杆气质和三重四极杆液质具有更高的灵敏度

采样技术的灵活性使其可应用于许多空气监测场景: 室内、室外和工作场所, 包括工业气体的监测

可拓展到塑料, 高分子材料中 PFAS 的检测

变色龙软件同时控制 TD 和 GCMSMS, 减少繁琐操作

无溶剂工作流程可优化灵敏度，简化采样操作并降低分析误差

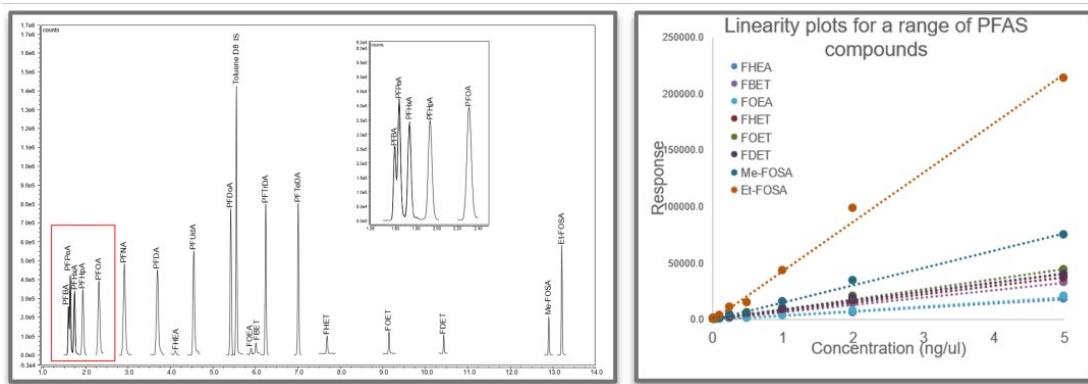


两阶段热脱附示意图

TD100-xr 热脱附仪结合 TSQ9610 GCMSMS 联用系

Chromeleon CDS

(点击查看大图)



ASTM D8591-24 用热解吸气相色谱-三重四极杆串联质谱法 (TD-GC-MS/MS) 测定
试验室空气中含氟调聚醇的标准试验方法 (点击查看大图)

Compound	RT (min)	Quantitation ion (m/z)	Calibration range (pg/μL)	R ²	Peak area %RSD (n=7)	Calculated MDL (pg)	Calculated MDL (pg/m ³)
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 (PFTrDA)	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-Perfluoroctyl 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-Perfluoroctyl 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、测定系数 (R2)、峰面积%RSD

(n=7) 及 MDL (点击查看大图)

滑动查看更多

水中的痕量 PFAS 的高通量定量分析和非靶向监测

方案采用固相微萃取 (SPME Arrow) 技术结合高分辨气质联用仪 Orbitrap Exploris GC 对环境水中的挥发性全氟和多氟烷基物质 (PFAS) 进行分析。全扫描 (Full Scan) 采集模式可实现靶向定量分析的同时兼顾非靶向分析, 且数据具有回顾性分析能力。此外, 专业的 PFAS 高分辨谱库, 包含超过 1700 张 EI/CI 谱图, 快速识别未知 PFAS 化合物。

SPME Arrow 采用无溶剂萃取和浓缩的技术, 简化样品制备, 提高分析效率和样品通量

TriPlus RSH SMART 自动进样器实现样品在线提取, 减少人工错误/操作人员差异和运行成本

出色的峰面积重现性和 PFAS 良好回收率

高分辨全扫描检测: 兼具靶向定量与非靶向筛查能力, 快速识别目标列表外的未知化合物

低检测限: 0.1-1.4 ng/L, 满足各种复杂基质中低水平检测的需求



RSH SMART 多功能工作站



GC-Orbitrap/MS 高分辨气质



Chromleon CDS 和 Compound Discoverer



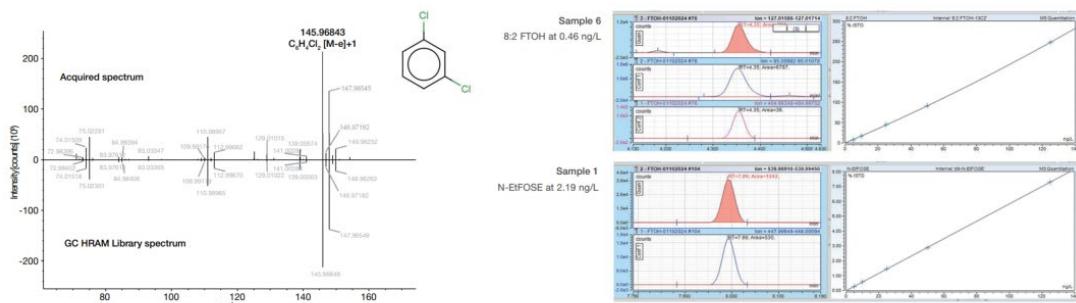
(点击查看大图)

Compound name	CAS number	Target or internal std	Retention time (min)	Quantification ion	Qualifier ion 1	Qualifier ion 2	Compound	LOD (ng/L)	LOQ (ng/L)
4:2 FTI	2043-55-2	Target	3.42	373.9208	227.0102	-	4:2 FTI	0.25	0.83
6:2 FTOH	647-42-7	Target	3.54	127.0165	95.0103	294.9975	6:2 FTI	0.63	2.09
6:2 FTOH-13C2	647-42-7	Internal Std	3.54	129.0261	96.0136	314.9991	8:2 FTI	1.37	4.58
6:2 FTI	2043-57-4	Target	4.23	473.9145	327.0038	-	6:2 FTOH	0.15	0.49
8:2 FTOH	678-39-7	Target	4.35	127.0165	95.0103	404.9955	8:2 FTOH	0.08	0.27
8:2 FTOH-13C2	678-39-7	Internal Std	4.35	129.0261	96.0136	414.9930	10:2 FTOH	0.33	1.10
6:2 FTAC	17527-29-6	Target	4.89	55.0178	77.0197	418.0233	6:2 FTAC	0.25	0.84
8:2 FTI	2043-53-0	Target	5.12	573.9081	426.9974	-	8:2 FTAC	0.80	2.65
10:2 FTOH	865-86-1	Target	5.17	127.0165	95.0103	504.9891	10:2 FTAC	0.77	2.57
6:2 FTMAC	2144-53-8	Target	5.53	432.0389	77.0197	-	6:2 FTMAC	0.72	2.41
8:2 FTAC	27905-45-9	Target	5.7	55.0178	77.0197	518.0169	8:2 FTMAC	0.49	1.65
8:2 FTMAC	1996-88-9	Target	6.29	532.0326	77.0197	-	10:2 FTMAC	0.76	2.53
10:2 FTAC	17741-60-5	Target	6.43	55.0178	77.0197	618.0095	N-MeFOSA	0.13	0.43
d3-N-MeFOSA	936109-37-4	Internal Std	6.43	97.0145	433.0271	-	N-EtFOSA	0.10	0.34
N-MeFOSA	31506-32-8	Target	6.45	93.9957	430.0083	-	N-MeFOSE	0.87	2.91
d5-N-EtFOSA-d	936109-40-9	Internal Std	6.59	113.0427	450.0113	-	N-EtFOSE	0.89	2.98
N-EtFOSA	4251-50-2	Target	6.62	108.0114	447.9989	-			
10:2 FTMAC	2144-54-9	Target	6.91	632.0262	77.0197	-			
d7-N-MeFOSE	1265205-95-5	Internal Std	7.74	531.0074	467.0455	-			
N-MeFOSE	24448-09-7	Target	7.77	525.9764	462.0145	-			
d9-N-EtFOSE	1265205-96-6	Internal Std	7.97	547.0358	451.0177	-			
N-EtFOSE	1691-99-2	Target	7.99	539.9921	447.9989	-			

16 种目标化合物和 6 种内标的保留时间、定量定性的精确质量离子

16 种 PFAS 的 LOD 和 LOQ

(点击查看大图)



非靶向筛查：采集 MS 谱图与 OEGC 污染物谱库中二氯苯高分辨率精确质量谱图搜索匹配结果

样品中极低浓度也能有非常好的响应，满足各种复杂基质中低水平检测的需求

(点击查看大图)

滑动查看更多

总结

基于 PFAS 的监测和筛查难点以及法规和市场关注的重点，赛默飞为客户提供一套端到端的全流程解决方案文集，包括自动化前处理、靶向定量、兼具靶向分析和未知物筛查，从多维度覆盖 PFAS 分析。

赛默飞提供 PFAS 一站式分析工作流程

可吸附有机氟 (AOF) 

自动化样品制备 

常规靶向检测 

筛查和非靶向监测 

耗材 – 经过验证的方法 – 应用支持 – PFAS谱库 – 合规软件 

饮用水 

废水 

污泥、生物固体 

土壤 

空气 

食品 

血液 

血浆 

ThermoFisher 经过验证的自动化工作流程为实验室提供了有效满足当前全球 PFAS 法规测试要求所需的技术适用于所有基质 (点击查看大图)

会议报名



新污染物前沿分析 与精准筛查技术论坛

暨中国环境科学学会2025年科学技术年会分论坛

⌚ 时间：2025年7月20日 9:00-12:10

📍 地点：南京丰大酒店北京厅(二层)



现场领取好礼
线下参会





扫码报名参会
线上直播

日程安排

●	9:00-9:05	开场
		宋宁慧 生态环境部南京环境科学研究所 研究员
●	9:05-9:30	饮用水新污染物风险控制技术：前沿与挑战
		董慧峪 中国科学院生态环境研究中心 研究员
●	9:30-9:55	基于高分辨质谱非靶向分析的智能化实验室场景应用
		乔禹欣 生态环境部南京环境科学研究所 博士
		▶ 主持人 孟维坤 江苏省环境科学研究院 博士后
●	9:55-10:20	基于HRMS的环境污染源水体中新污染物组分解析方法研究
		张茜 生态环境部南京环境科学研究所 博士
●	10:20-10:45	液质联用法测定水土中的全氟化合物
		陈虹 中国科学院南京土壤研究所 高级工程师
●	10:45-11:20	突破瓶颈-赛默飞新污染物和PFAS整体解决方案
		郭藤 赛默飞世尔科技(中国)有限公司 应用经理
		▶ 主持人 吴诗剑 上海市环境监测中心 高级工程师
●	11:20-11:45	开启新征程-Cindion燃烧离子色谱助力PFAS研究
		沈晓玲 赛默飞世尔科技(中国)有限公司 产品经理
●	11:45-12:10	多种塑化剂人体血清暴露标志物的筛查研究
		陈倩羽 江苏省疾病预防控制中心 博士

如需合作转载本文，请文末留言。



长按图片识别二维码

热线电话

800 810 5118

400 650 5118