

# 直接进样法测定饮用水中全氟化合物的解决方案

## A Solution for the Determination of Perfluorinated Compounds(PFCs) in Drinking Water by Direct Injection with SCIEX Triple Quad™ 3500 System

翟南南, 孙小杰, 刘冰洁, 郭立海  
Zhai Nannan, Sun Xiaojie, Liu Bingjie, Guo Lihai

SCIEX China

**Key Words:** LC-MS/MS, Perfluorinated Compounds (PFCs), Drinking Water, Triple Quad™ 3500

饮用水的安全问题一直以来是备受大家关注的问题, 我们平时常关注的影响水质安全的指标主要有微生物、重金属、消毒副产物和其它有毒性的有机和无机物质的含量。近年来, 有一种物质悄然的成为饮用水安全的潜在隐患-全氟化合物。

全氟化合物 (PFCs) 是一种人工合成的化学物质, 它是一类具有特殊结构的有机化合物 (碳相连的氢元素全都被氟元素所取代)。PFCs结构的特殊性赋予了其很强的化学稳定性, 从而使PFCs在工业产品和家用产品制造领域得到广泛应用。随着其应用越来越广, 其排放量也在不断增加, 最终PFCs会回到环境和水体中。由于其化学稳定性强, 所以很难被氧化和降解, 如果水体中的PFCs浓度较高进入人体中会对人体带来伤害, 所以需要对其浓度进行准确检测和严格把控。

本文选取了11种典型的全氟化合物, 采用直接进样的方式, 在SCIEX Triple Quad™ 3500 LC-MS/MS系统上, 建立了饮用水中全氟化合物的快速测定方法, 为饮用水中全氟化合物的监测提供了快速有效的技术支持。

### 本方法具有以下特点:

1. 本方法灵敏度高, 11种化合物的检测灵敏度均达到ng/L级别
2. 本方法分析时间仅为7分钟, 大大提高了通量
3. 本方法提供了11种全氟化合物的质谱条件、液相条件, 拿来即用
4. 本方法采用大体积直接进样的方法, 省去繁琐的样品前处理过程

### 仪器设备

SCIEX ExionLC™系统+ SCIEX Triple Quad™ 3500系统



### 样品前处理

- 饮用水过滤后, 进行LC-MS/MS分析

### 液相方法

色谱柱: Phenomenex Kinetex F5 (100 × 3.0 mm, 2.6 μm)

流动相: A: 水 (0.01%甲酸);

B: 乙腈

流速: 0.5 mL/min;

柱温: 40°C

梯度洗脱

时间 (min)	A (%)	B (%)
0.00	97	30
2.50	97	65
4.00	85	99
5.00	25	99
5.10	5	30
7.00	97	30

### 质谱方法

离子源: ESI源, 负离子模式

离子源参数:

IS电压: -4500 V                      气帘气 CUR: 25 psi

雾化气 GS1: 50 psi                  辅助气 GS2: 60 psi

源温度 TEM: 550°C                  碰撞气 CAD: 8 psi

备注: 各化合物质谱参数见附表

### 实验结果

1. 11种化合物的典型色谱图

\* XIC from 20210421-ACN-H2O(0.01%FA).wiff (sample...-MRM (21 transitions): PFPEA 1 (262.9 / 218.9)

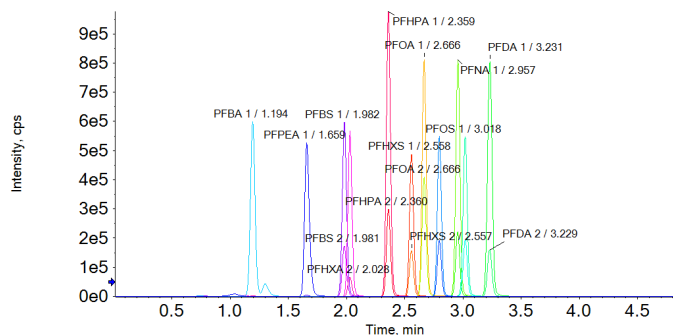


图1. 自来水中11种全氟化合物的色谱图

2. 11种化合物的检测灵敏度达ng/L级别, 满足实际样品的测定需求

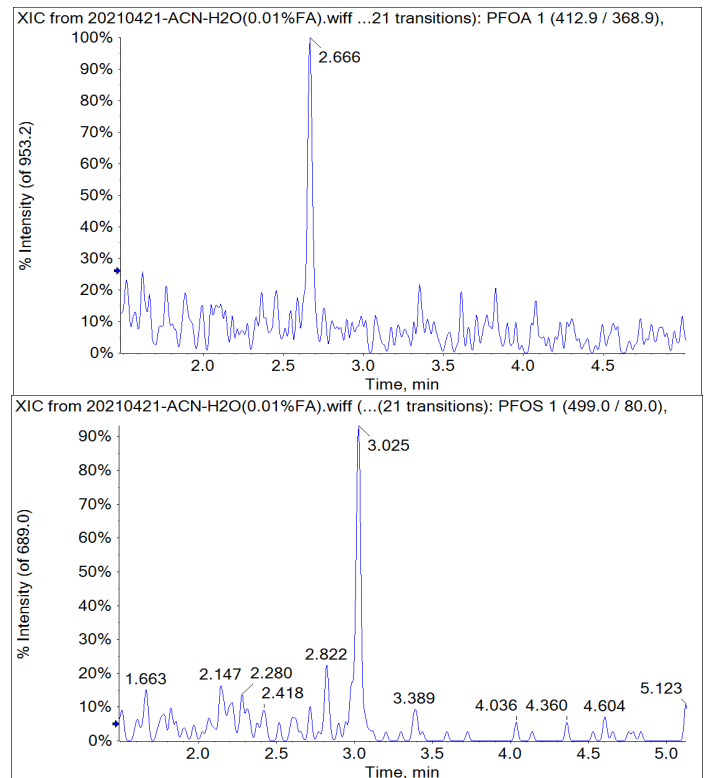


图2. 自来水中1ng/L PFOA和PFOS色谱图

3. 该方法的基质效应考察: 11种化合物在三个浓度水平下的基质效应在80%-113%之间  
4. 该方法的线性关系好,  $r > 0.99$ , 且该方法重现性好, 连续进样1000针后CV% < 2%。

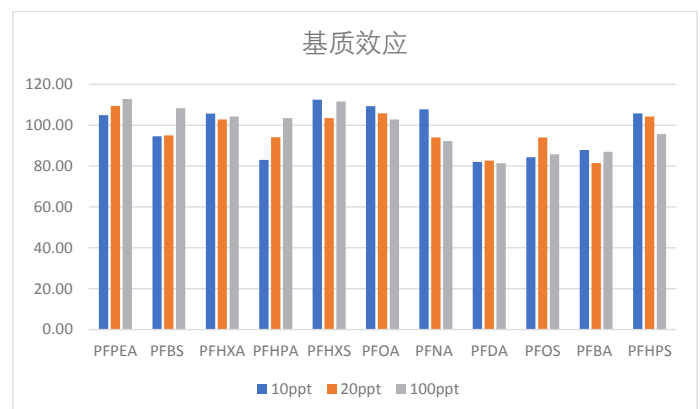


图3. 自来水中各化合物基质效应统计图

4. 该方法的线性关系好,  $r > 0.99$ , 且该方法重现性好, 连续进样1000针后CV% < 2%。

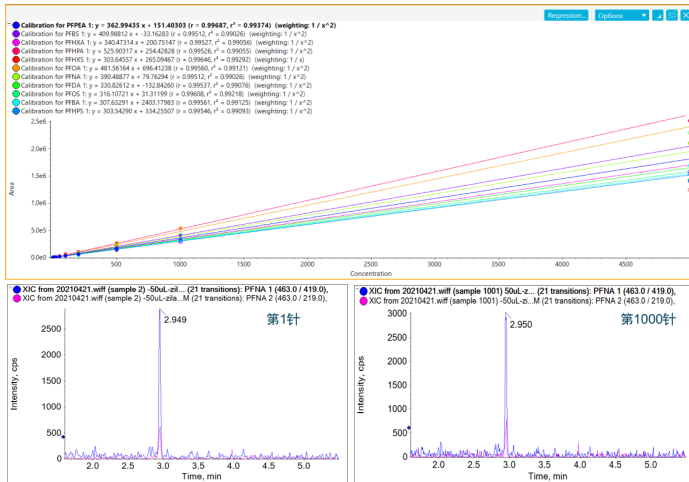


图4. 自来水中各化合物线性及重现性图谱展示

## 总结

本方法在SCIEX Triple Quad™ 3500 系统上建立了一套快速测定饮用水中11种典型全氟化合物的LC-MS/MS方法。该方法分析时间短, 灵敏度高, 满足饮用水中痕量PFCs残留的测定。该方法采用大体积直接进样的方式, 无需SPE富集, 简单易操作。

SCIEX临床诊断产品线仅用于体外诊断。仅凭处方销售。这些产品并非在所有国家地区都提供销售。获取有关具体可用信息, 请联系当地销售代表或查阅<https://sciex.com.cn/diagnostics>。所有其他产品仅用于研究。不用于临床诊断。本文提及的商标和/或注册商标, 也包括相关的标识、标志的所有权, 归属于AB Sciex Pte. Ltd. 或在美国和/或某些其他国家地区的各权利所有人。

© 2021 DH Tech. Dev. Pte. Ltd. RUO-MKT-02-13694-ZH-A



### SCIEX中国

北京分公司  
北京市朝阳区酒仙桥中路24号院  
1号楼5层  
电话: 010-5808-1388  
传真: 010-5808-1390  
全国咨询电话: 800-820-3488, 400-821-3897

上海公司及中国区应用支持中心  
上海市长宁区福泉北路518号  
1座502室  
电话: 021-2419-7200  
传真: 021-2419-7333  
官网: [sciex.com.cn](http://sciex.com.cn)

广州分公司  
广州市天河区珠江西路15号  
珠江城1907室  
电话: 020-8510-0200  
传真: 020-3876-0835  
官方微信: [SCIEX-China](https://www.sciex.com.cn)

附表: 11种全氟化合物的质谱参数

Compound	Q1	Q3	DP	CE
全氟丁酸PFBA	212.9	168.9	-5	-12
全氟戊酸 PFPEA	262.9	218.9	-40	-11
全氟丁烷磺酸钾 (全氟丁基磺酸) PFBS	298.9	80	-70	-65
全氟己酸 PFHXA	312.9	268.9	-50	-11
全氟庚酸 PFHPA	362.9	318.9	-30	-13
全氟己基磺酸 PFHXS	398.9	80	-70	-75
全氟辛酸 PFOA	412.9	368.9	-30	-15
全氟庚烷磺酸 PFHPS	448.7	79.9	-100	-104
全氟壬酸 PFNA	463	419	-50	-15
十七氟辛烷磺酸 (全氟辛烷磺酸) PFOS	499	80	-90	-108
十九氟癸酸 (全氟癸酸) PFDA	512.9	468.9	-31	-16