

ICS 71.100.40

CCS G 72

团 体 标 准

T/ACEF 185—2025

表面活性剂中 31 种全氟和多氟烷基化合物 (PFAS) 和总可氧化前驱体 (TOP) 的测 定 液相色谱-三重四极杆质谱法

Determination of 31 per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS) and total oxidizable precursors (TOP) in surfactants—Liquid chromatography-triple quadrupole mass spectrometry

2025-1-21 发布

2025-1-21 实施

中 华 环 保 联 合 会 发 布

目次

前 言..... II

1 范围..... 1

2 规范性引用文件..... 1

3 术语和定义..... 1

4 原理..... 2

5 干扰和消除..... 2

6 试剂或材料..... 2

7 仪器设备..... 3

8 样品..... 4

9 试验步骤..... 5

10 试验数据处理..... 7

11 精密度和正确度..... 8

12 质量保证和质量控制..... 8

13 废物处置..... 9

14 注意事项..... 9

附录 A（规范性）目标化合物及仪器检出限的信息..... 10

附录 B（资料性）目标化合物与同位素内标的对应关系 13

附录 C（资料性）目标化合物和同位素内标的质谱参数 15

附录 D（资料性）31 种 PFAS 保留时间..... 18

前言

本文件按照GB/T 1.1-2020《标准化工作导则第1部分：标准化文件的结构和起草规则》的规定起草。

请注意本文件的某些内容可能涉及专利。本文件的发布机构不承担识别专利的责任。

本文件由中华环保联合会提出并归口。

本文件起草单位：生态环境部对外合作与交流中心、清华大学、上海市检测中心、清华苏州环境创新研究院、意玮新材料科技（上海）有限公司、上海汇友消防技术有限公司、中国科学院大学。

本文件主要起草人：黄俊、任志远、刘敏、张晓丹、赵振江、贾颂今、陈文静、葛羽锡、左烧、程雪、惠亚梅、方宁、潘惠妹、胡健、尹华、刘文彬、王悦、罗春辉。

本文件验证单位：沃特世科技（上海）有限公司、北京师范大学、中国矿业大学（北京）、中国中医科学院。

表面活性剂中 31 种全氟和多氟烷基化合物（PFAS）和总可氧化前驱体（TOP）的测定 液相色谱-三重四极杆质谱法

警示——使用本文件的人员应有正规实验室工作的实践经验。本文件并未指出所有可能的安全问题。使用者有责任采取适当的安全和健康措施，并保证符合国家有关法规规定的条件。

1 范围

本文件描述了采用液相色谱-三重四极杆质谱法直接测定以及先氧化前处理再测定表面活性剂中 31 种全氟和多氟烷基化合物（PFAS）的方法。

本文件适用于表面活性剂产品中 31 种 PFAS 和总可氧化前驱体（TOP）的测定。

31 种 PFAS 的仪器检出限（IDL）为 0.10 ng/mL~1.93 ng/mL，详见附录 A。

2 规范性引用文件

下列文件中的内容通过文中的规范性引用而构成本文件必不可少的条款。其中，注日期的引用文件，仅该日期对应的版本适用于本文件；不注日期的引用文件，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本文件。

GB/T 6680 液体化工产品采样通则

3 术语和定义

下列术语和定义适用于本文件。

3.1

全氟和多氟烷基化合物 per- and polyfluoroalkyl substances; PFAS

含有至少一个全氟化甲基或亚甲基碳原子（且其不与 H、Cl、Br 或 I 相连）的化合物。

3.2

前驱体 precursor

指在环境中能够转化为全氟烷基羧酸（PFCA）或全氟烷基磺酸（PFSA）的化合物。

3.3

总可氧化前驱体 total oxidizable precursors; TOP

指在碱性溶液热活化过硫酸盐氧化条件下能够被转化为 PFCA 或 PFSA 的化合物。

4 原理

表面活性剂经水稀释、滤膜过滤，用液相色谱-三重四极杆质谱直接测定其中的 PFAS，根据特征离子对与保留时间定性，同位素稀释法和内标法定量。

表面活性剂经水稀释，用碱性溶液热活化过硫酸盐氧化，再经滤膜过滤后，用液相色谱-三重四极杆质谱测定其中的 PFAS，根据特征离子对与保留时间定性，同位素稀释法和内标法定量。

对比直接测定和氧化后测定所得到的 11 种 PFCA 和 7 种 PFSA 的总量，将其增量作为 TOP 指示值。

5 干扰和消除

5.1 分析过程中含氟聚合物（如聚四氟乙烯）器皿的使用可能对测定产生干扰，样品采集和前处理过程中应避免使用含氟聚合物材质的器皿。

5.2 液相色谱系统可能含有 PFAS，可通过使用捕集柱分离样品中 PFAS 与仪器背景干扰，捕集柱安装在流动相混合器和进样器内六通阀之间；也可将液相色谱系统中聚四氟乙烯材质配件更换为聚醚醚酮或不锈钢材质。

6 试剂或材料

除非另有说明，在分析中仅使用确认为分析纯的试剂和不含目标化合物的纯水。

6.1 甲醇（CH₃OH）：色谱纯。

6.2 乙酸（CH₃COOH）：色谱纯。

6.3 氢氧化钠（NaOH）：优级纯。

6.4 过硫酸钾（K₂S₂O₈）：优级纯。

6.5 乙酸铵（CH₃COONH₄）：色谱纯。

6.6 氢氧化钠水溶液： $c(\text{NaOH}) = 10.0 \text{ mol/L}$

称取 4.00 g NaOH（6.3），加入水溶解，最终定容至 10 mL，混匀，临用现配。

6.7 过硫酸钾水溶液： $c(\text{K}_2\text{S}_2\text{O}_8) = 175.0 \text{ mmol/L}$

称取 4.73 g $K_2S_2O_8$ (6.4), 加入水溶解, 最终定容至 100 mL, 混匀, 临用现配。

6.8 4% (体积分数) 乙酸甲醇溶液:

用乙酸 (6.2) 和甲醇 (6.1) 按 4:96 的体积比混合, 临用现配。

6.9 乙酸铵水溶液: $c(CH_3COONH_4) = 10.0 \text{ mmol/L}$

称取 0.77 g 乙酸铵 (6.5), 加入 1000 mL 水, 混匀, 临用现配。

6.10 PFAS 标准贮备液: $\rho = 1.0 \mu\text{g/mL}$ 。

市售有证标准溶液, 也可用单个标准溶液配制, 按照标准溶液证书要求或参照制造商产品说明保存, 使用前应恢复至室温并摇匀。

6.11 定量内标贮备液: $\rho = 50.0 \mu\text{g/mL}$

内标为 14 种同位素标记物, 详见附录 B。市售有证标准溶液, 按照标准溶液证书要求保存, 使用前应恢复至室温并摇匀。

6.12 定量内标混合使用液: $\rho = 0.5 \mu\text{g/mL}$

将定量内标贮备液 (6.11) 按需要用甲醇 (6.1) 稀释。定量内标工作液密封、避光, 于 $0^\circ\text{C} \sim 4^\circ\text{C}$ 保存。使用前应恢复至室温并摇匀。

6.13 进样内标贮备液: $\rho = 50.0 \mu\text{g/mL}$

进样内标为同位素标记物 $^{13}\text{C}_2$ PFOA, 市售有证标准溶液, 按照标准溶液证书要求保存, 使用前应恢复至室温并摇匀。

6.14 进样内标使用液: $\rho = 0.5 \mu\text{g/mL}$

将进样内标贮备液 (6.13) 按需要用甲醇 (6.1) 稀释。进样内标使用液密封、避光, 于 $0^\circ\text{C} \sim 4^\circ\text{C}$ 保存。使用前应恢复至室温并摇匀。

6.15 针头式过滤器: 尼龙材质滤膜, $0.2 \mu\text{m}$ 。

注: 可使用其他被证明合适的针头式过滤器。

6.16 氮气: 纯度 $\geq 99.99\%$ 。

7 仪器设备

7.1 液相色谱-三重四极杆质谱仪: 液相色谱仪具备梯度洗脱功能, 三重四极杆质谱仪配有电喷雾离子源, 具备多反应监测功能。

7.2 色谱柱: 填料为十八烷基硅烷键合硅胶, 填料粒径为 $3.5 \mu\text{m}$, 柱长为 150 mm, 内径为

2.1 mm。或其他性能相近的色谱柱。

7.3 捕集柱：填料为十八烷基硅烷键合硅胶，填料粒径为 3.5 μm ，柱长为 50 mm，内径为 4.6 mm。或其他性能相近的色谱柱。

7.4 分析天平：实际分度值为 0.1 mg。

7.5 涡旋混合器。

7.6 恒温水浴锅。

7.7 移液器：20 μL 、200 μL 、1 mL 和 10 mL。

7.8 采样瓶：聚丙烯材质，100 mL。

7.9 离心管：聚丙烯材质，1.5 mL 和 15 mL。

7.10 进样瓶：聚丙烯材质，2 mL。

7.11 移液器吸头：20 μL 、200 μL 、1 mL 和 10 mL。

7.12 一次性注射器：聚丙烯材质，1 mL。

8 样品

8.1 样品采集和保存

按照 GB/T 6680 的相关规定采集样品。将样品置于采样瓶（7.8）中，密封、避光，0 $^{\circ}\text{C}$ ~ 4 $^{\circ}\text{C}$ 保存，样品应尽快送往实验室，14 d 内完成样品的制备。采集样品时应同时采集全程序空白样品。用采样瓶（7.8）装满水带至采样现场，采样时将水转移至另一个采样瓶（7.8）中，作为全程序空白样品，随实际样品一起保存并运输至实验室。

8.2 试样的制备

8.2.1 直接分析试样

样品总稀释倍数根据样品浓度确定，一般建议上机总稀释倍数为 20000 倍，对于浓度更高或含量比较低的样品，可酌情增减总稀释倍数，一般的总稀释倍数范围为 2000 倍~200000 倍。

用水将样品逐级稀释（每次不超过 50 倍），稀释 10000 倍得到试样 A，取 0.25 mL 试样 A 转移至 1.5 mL 离心管（7.9）中，加入 10 μL 定量内标混合使用液（6.12），涡旋混匀。再加入 0.25 mL 甲醇（6.1），以及 10 μL 进样内标混合使用液（6.14），涡旋混匀。用一次性注射器（7.12）经针头式过滤器（6.15）过滤至 2 mL 进样瓶（7.10）中，密封、避光，0 $^{\circ}\text{C}$ ~

4 ℃保存，28 d 内完成分析。

8.2.2 前驱体分析试样

样品总稀释倍数根据样品浓度确定，一般建议上机总稀释倍数为 400000 倍，对于浓度更高或含量比较低的样品，可酌情增减总稀释倍数，一般的总稀释倍数范围为 400000 倍～800000 倍。

取 0.5 mL 试样 A（8.2.1）转移至 15 mL 离心管（7.9）中，加入 0.15 mL 的氢氧化钠水溶液（6.6）和 3.43 mL 的过硫酸钾水溶液（6.7），用水定容至 10 mL，使 NaOH 和 $K_2S_2O_8$ 的浓度分别为 150 mmol/L 和 60 mmol/L。涡旋混匀后 85 ℃水浴加热 6 小时，之后立即用乙酸甲醇溶液（6.8）将 pH 调至 6 左右，并在冰水中冷却至室温得到试样 B。48 h 内尽快完成后续分析步骤。

取 0.25 mL 试样 B 转移至 1.5 mL 离心管（7.9）中，加入 10 μ L 定量内标混合使用液（6.12），涡旋混匀。加入 0.25 mL 甲醇（6.1），以及 10 μ L 进样内标混合使用液（6.14），涡旋混匀。用一次性注射器（7.12）经针头式过滤器（6.15）过滤至 2 mL 进样瓶（7.10）中，密封、避光，0 ℃～4 ℃保存，28 d 内完成分析。

8.2.3 空白试样

用水代替样品，按照与直接分析（8.2.1）和前驱体分析（8.2.2）的试样制备的相同步骤制备实验室空白试样。

9 试验步骤

9.1 仪器参考条件

9.1.1 液相色谱参考条件

流动相 A 为乙酸铵水溶液（6.9），流动相 B 为甲醇（6.1）；柱温为 35 ℃；流速为 0.3 mL/min。进样量为 5 μ L；梯度洗脱条件如表 1 所示。

表 1 梯度洗脱条件

时间（min）	流动相 A（%）	流动相 B（%）
1.00	70	30
3.00	40	60

8.00	5	95
14.00	5	95
14.01	70	30
18.00	70	30

9.1.2 质谱参考条件

质谱采用电喷雾离子源（ESI），负离子电离模式，多反应监测方式（MRM）。毛细管电压为 3500 V，鞘气加热温度为 350 ℃，鞘气流速为 7 L/min。目标化合物和同位素内标的质谱参数如附录 C 所示，保留时间如附录 D 所示。

9.2 校准仪器

按照仪器说明书校准仪器，仪器性能正常后测定样品。

9.3 试验

9.3.1 试样测定

按照色谱参考条件（9.1.1）和质谱参考条件（9.1.2）测定直接分析试样（8.2.1）和前驱体分析试样（8.2.2）。

9.3.2 空白试验

按照与试样测定（9.3.1）相同的仪器条件测定空白试样（8.2.3）。

9.3.3 标准系列的配制和测定

标准系列浓度分别为 0.5 ng/mL、1.0 ng/mL、2.0 ng/mL、5.0 ng/mL、10 ng/mL、20 ng/mL、50 ng/mL、100 ng/mL、250 ng/mL（参考浓度），定量内标和进样内标的浓度为 10 ng/mL。按照与试样测定（9.3.1）相同的仪器条件，由低到高依次测定。

9.3.4 定性分析

根据特征离子对与保留时间定性分析。每种目标化合物设定一对或两对特征离子对，如附录 C 所示。并且试验中目标化合物的保留时间应与标准溶液一致，偏差在± 5%以内。

在色谱图上，对信噪比（S/N）≥3 的色谱峰视为有效峰。

直链和支链异构体的色谱峰可不分离，计算峰面积之和。

9.3.5 定量分析

以目标化合物和对应的定量内标的浓度之比为横坐标，峰面积之比为纵坐标，绘制标准曲线用于计算目标化合物的浓度。以定量内标和对应的进样内标的浓度之比为横坐标，峰面

积之比为纵坐标, 绘制标准曲线用于计算定量内标的浓度。要求标准曲线强制过零点。决定系数 (R^2) 应 ≥ 0.99 , 否则应查找原因, 重新测定标准系列并计算 R^2 。

10 试验数据处理

10.1 样品中目标化合物浓度的计算

样品中目标化合物的浓度 (以对应酸的浓度计) C_T , 数值以微克每千克 ($\mu\text{g/kg}$) 表示, 按公式 (1) 计算:

$$C_T = \frac{\rho_T \times V \times D}{m} \times \frac{M_a}{M_s} \quad (1)$$

式中:

ρ_T —试样中目标化合物的浓度 (由标准曲线计算得到) 的数值, 单位为纳克每毫升 (ng/mL);

V —试样体积的数值, 单位为毫升 (mL);

D —总稀释倍数的数值;

m —取样量的数值, 单位为克 (g);

M_a —目标化合物对应酸的摩尔质量的数值, 单位为克每摩尔 (g/mol);

M_s —标准溶液中目标化合物对应盐的摩尔质量的数值, 单位为克每摩尔 (g/mol)。

10.2 TOP 指示值的计算

TOP 指示值以前驱体分析样品和直接分析样品中 11 种 PFCA 和 7 种 PFSA 浓度总量的差值 C_{TOP} 计, 数值以微克每千克 ($\mu\text{g/kg}$) 表示, 按公式 (2) 计算:

$$C_{\text{TOP}} = C_P - C_D \quad (2)$$

式中:

C_P —前驱体分析中 PFCA 和 PFSA 浓度总量的数值, 单位为微克每千克 ($\mu\text{g/kg}$);

C_D —直接分析中 PFCA 和 PFSA 浓度总量的数值, 单位为微克每千克 ($\mu\text{g/kg}$)。

10.3 试样中定量内标回收率的计算

试样中目标化合物对应定量内标的回收率 ω_I , 按公式 (3) 计算:

$$\omega_I = \frac{\rho_S}{\rho_A} \times 100 \quad (3)$$

式中:

ρ_S —试样中定量内标的浓度 (由标准曲线计算得到) 的数值, 单位为纳克每毫升 (ng/mL);

ρ_A —定量内标加入浓度的数值，单位为纳克每毫升（ng/mL）。

样品浓度的计算结果表示到小数点后两位，回收率的计算结果保留 3 位有效数字。

11 精密度和正确度

11.1 精密度

4 家实验室对表面活性剂稀释液和有证标准物质稀释液实际样品加标浓度分别为 20 $\mu\text{g/kg}$ 和 30 $\mu\text{g/kg}$ 的统一样品进行了 6 次平行测定和统计。实验室内表面活性剂稀释液和加标稀释液相对标准偏差为 0.39%~22%、0.80%~25%；有证标准物质稀释液和加标稀释液相对标准偏差分别为 1.4%~23%、0.52%~19%。

11.2 正确度

4 家实验室对表面活性剂稀释液和有证标准物质稀释液实际样品加标浓度分别为 20 $\mu\text{g/kg}$ 和 30 $\mu\text{g/kg}$ 的统一样品进行了 6 次平行测定和统计，加标回收率平均值范围分别为 68.6%~130%、61.4%~107%。

4 家实验室对表面活性剂实际样品统一样品进行了测定和统计，实验室间相对标准偏差范围为 6.3%~26%。

12 质量保证和质量控制

12.1 校准

选择标准系列中间点浓度的标准溶液连续校准，每分析 20 个或每批次样品（少于 20 个）连续校准 1 次，测定结果相对误差应在 $\pm 20\%$ 以内。否则应查找原因，重新测定标准系列。

12.2 空白试验

每 20 个或每批次样品（少于 20 个）至少分析 1 个全程序空白和 1 个实验室空白，空白测试结果应低于仪器检出限。否则应采取措施排除污染并重新分析同批样品。

12.3 平行样

每 20 个或每批次样品（少于 20 个）至少分析 1 个平行样，平行样测定结果的相对偏差应在 $\pm 30\%$ 以内。

12.4 基体加标

每 20 个或每批次样品（少于 20 个）至少分析 1 个基体加标样品，加标回收率应在 40%~

160%之间。

12.5 定量内标回收率

定量内标回收率应在 40%~160%之间。

13 废物处置

试验中产生的废物应集中收集，分类保存，并做好相应的标识，依法处置。

14 注意事项

因玻璃容器可能吸附目标化合物，采样和分析过程中应避免使用玻璃材质器皿。

分析过程中含氟聚合物（如聚四氟乙烯）器皿的使用可能对测定产生干扰，样品采集和前处理过程中应避免使用含氟聚合物材质的器皿。

附录 A
(规范性)
目标化合物及仪器检出限的信息

本方法测定的 31 种 PFAS 的基本信息及仪器检出限如表 A.1 所示。

表 A.1 31 种 PFAS 的基本信息及仪器检出限

序号	物质名称	英文缩写	CAS 号	分子式	相对分子质量	仪器检出限 (ng/mL)
1	全氟丁酸 Perfluorobutanoic acid	PFBA	375-22-4	C ₄ F ₇ O ₂ H	213.90	0.3
2	全氟戊酸 Perfluoropentanoic acid	PFPeA	2706-90-3	C ₅ F ₉ O ₂ H	263.91	0.3
3	全氟己酸 Perfluorohexanoic acid	PFHxA	307-24-4	C ₆ F ₁₁ O ₂ H	313.92	0.3
4	全氟庚酸 Perfluoroheptanoic acid	PFHpA	375-85-9	C ₇ F ₁₃ O ₂ H	363.93	0.2
5	全氟辛酸 Perfluorooctanoic acid	PFOA	335-67-1	C ₈ F ₁₅ O ₂ H	413.93	0.3
6	全氟壬酸 Perfluorononanoic acid	PFNA	375-95-1	C ₉ F ₁₇ O ₂ H	464.08	0.3
7	全氟癸酸 Perfluorodecanoic acid	PFDA	335-76-2	C ₁₀ F ₁₉ O ₂ H	514.22	0.3
8	全氟十一烷基羧酸 Perfluoroundecanoic acid	PFUnA	2058-94-8	C ₁₁ F ₂₁ O ₂ H	564.10	0.3
9	全氟十二烷基羧酸	PFDoA	307-55-1	C ₁₂ F ₂₃ O ₂ H	614.11	0.3

序号	物质名称	英文缩写	CAS 号	分子式	相对分子质量	仪器检出限 (ng/mL)
	Perfluorododecanoic acid					
10	全氟十三烷基羧酸 Perfluorotridecanoic acid	PFTTrDA	72629-94-8	C ₁₃ F ₂₅ O ₂ H	664.11	0.2
11	全氟十四烷基羧酸 Perfluorotetradecanoic acid	PFTeDA	376-06-7	C ₁₄ F ₂₇ O ₂ H	714.11	0.3
12	全氟丁基磺酸 Perfluorobutanesulfonic acid	PFBS	375-73-5	C ₄ F ₉ SO ₃ H	299.92	0.5
13	全氟戊基磺酸 Perfluoropentanesulfonic acid	PFPeS	2706-91-4	C ₅ F ₁₁ SO ₃ H	350.11	0.4
14	全氟己基磺酸 Perfluorohexanesulfonic acid	PFHxS	355-46-4	C ₆ F ₁₃ SO ₃ H	399.97	0.5
15	全氟庚基磺酸 Perfluoroheptanesulfonic acid	PFHpS	375-92-8	C ₇ F ₁₅ SO ₃ H	449.98	0.4
16	全氟辛基磺酸 Perfluorooctanesulfonic acid	PFOS	1763-23-1	C ₈ F ₁₇ SO ₃ H	499.99	0.1
17	全氟壬基磺酸 Perfluorononanesulfonic acid	PFNS	68259-12-1	C ₉ F ₁₉ SO ₃ H	550.14	0.4
18	全氟癸基磺酸 Perfluorodecanesulfonic acid	PFDS	335-77-3	C ₁₀ F ₂₁ SO ₃ H	600.01	0.7
19	1H,1H,2H,2H-全氟己基磺酸 1H,1H,2H,2H-Perfluorohexanesulphonic acid	4:2 FTS	27619-93-8	C ₆ H ₄ F ₉ SO ₃ H	351.14	0.2
20	1H,1H,2H,2H-全氟辛基磺酸 1H,1H,2H,2H-Perfluorooctanesulphonic acid	6:2 FTS	27619-97-2	C ₈ H ₄ F ₁₃ SO ₃ H	428.17	0.4
21	1H,1H,2H,2H-全氟癸基磺酸	8:2 FTS	39108-34-4	C ₁₀ H ₄ F ₁₇ SO ₃ H	528.00	0.3

序号	物质名称	英文缩写	CAS 号	分子式	相对分子质量	仪器检出限 (ng/mL)
	1H,1H,2H,2H-Perfluorodecanesulphonic acid					
22	全氟辛基磺酰胺 Perfluorooctanesulfonamide	PFOSA	754-91-6	C ₈ H ₂ O ₂ NS ₂ F ₁₇	499.15	0.6
23	N-甲基全氟辛基磺酰胺 N-Methyl-perfluorooctanesulfonamide	NMeFOSA	31506-32-8	C ₉ H ₄ O ₂ NSF ₁₇	513.03	1.1
24	N-乙基全氟辛基磺酰胺 N-Ethyl- perfluorooctanesulfonamide	NEtFOSA	4151-50-2	C ₁₀ H ₆ O ₂ NSF ₁₇	527.06	0.4
25	N-甲基全氟辛基磺酰胺乙醇 N-Methyl- perfluorooctanesulfonamidoethanol	NMeFOSE	24448-09-7	C ₁₁ H ₈ O ₃ NSF ₁₇	557.08	0.3
26	N-乙基全氟辛基磺酰胺乙醇 N-Ethyl- perfluorooctanesulfonamidoethanol	NEtFOSE	1691-99-2	C ₁₂ H ₁₀ O ₃ NSF ₁₇	571.11	1.8
27	9-氯-3-氧杂全氟壬烷磺酸 9-Chlorohexadecafluoro-3-oxanonane-1-sulfonic acid	9Cl-PF3ONS	756426-58-1	C ₈ ClF ₁₆ SO ₄ H	532.60	0.3
28	11-氯-3-氧杂全氟十一烷磺酸 11-Chloroeicosafluoro-3-oxaundecane-1-sulfonic acid	11Cl-PF3OUdS	763051-92-9	C ₁₀ ClF ₂₀ SO ₄ H	632.60	1.6
29	六氟环氧丙烷二聚酸 Hexafluoropropylene oxide dimer acid	HFPO-DA	13252-13-6	C ₆ F ₁₁ O ₃ H	330.05	1.6
30	4,8-二氧-3H-全氟壬酸 4,8-Dioxa-3H-perfluorononanoic acid	ADONA	919005-14-4	C ₇ H ₂ F ₁₂ O ₄	378.10	1.9
31	全氟壬烯氧基苯磺酸钠 Sodium perfluorononyloxybenzenesulfonate	OBS	87-56-8	C ₁₅ H ₄ F ₁₉ SO ₄ Na	664.20	1.9

附录 B
(资料性)

目标化合物与同位素内标的对应关系

本方法测定的 31 种 PFAS 与同位素内标的对应关系如表 B.1 所示。

表 B. 1 31 种 PFAS 与同位素内标的对应关系

序号	英文缩写	定量内标	进样内标
1	PFBA	¹³ C ₄ PFBA	¹³ C ₂ PFOA
2	PFPeA	¹³ C ₅ PFPeA	
3	PFHxA	¹³ C ₂ PFHxA	
4	PFHpA	¹³ C ₄ PFHpA	
5	PFOA	¹³ C ₄ PFOA	
6	PFNA	¹³ C ₅ PFNA	
7	PFDA	¹³ C ₂ PFDA	
8	PFUnA	¹³ C ₂ PFUnA	
9	PFDoA	¹³ C ₂ PFDoA	
10	PFTTrDA	¹³ C ₂ PFDoA	
11	PFTeDA	¹³ C ₂ PFDoA	
12	PFBS	¹³ C ₃ PFHxS	
13	PFPeS	¹³ C ₃ PFHxS	
14	PFHxS	¹³ C ₃ PFHxS	
15	PFHpS	¹³ C ₈ PFOS	
16	PFOS	¹³ C ₈ PFOS	
17	PFNS	¹³ C ₈ PFOS	
18	PFDS	¹³ C ₈ PFOS	
19	4:2 FTS	¹³ C ₂ 6:2 FTS	
20	6:2 FTS	¹³ C ₂ 6:2 FTS	
21	8:2 FTS	¹³ C ₂ 6:2 FTS	
22	PFOSA	¹³ C ₈ PFOSA	
23	NMeFOSA	¹³ C ₈ PFOSA	

序号	英文缩写	定量内标	进样内标
24	NEtFOSA	¹³ C ₈ PFOSA	¹³ C ₂ PFOA
25	NMeFOSE	¹³ C ₈ PFOSA	
26	NEtFOSE	¹³ C ₈ PFOSA	
27	9Cl-PF3ONS	¹³ C ₃ HFPO-DA	
28	11Cl-PF3OUdS	¹³ C ₃ HFPO-DA	
29	HFPO-DA	¹³ C ₃ HFPO-DA	
30	ADONA	¹³ C ₃ HFPO-DA	
31	OBS	¹³ C ₈ PFOS	

附录 C
(资料性)

目标化合物和同位素内标的质谱参数

目标化合物和同位素内标的质谱参数如表 C.1 所示。

表 C.1 质谱参数

序号	化合物	母离子 (Da)	子离子 (Da)	锥孔电压 (V)	碰撞电压 (V)
1	PFBA	212.9	168.9*	60	8
2	PFPeA	262.9	218.9*	61	5
3	PFHxA	312.9	268.9*	60	5
	PFHxA	312.9	119.0	60	21
4	PFHpA	362.8	318.8*	60	5
	PFHpA	362.8	168.9	60	17
5	PFOA	413.1	368.9*	65	5
	PFOA	413.1	168.9	65	17
6	PFNA	462.9	418.8*	60	5
	PFNA	462.9	218.9	60	17
7	PFDA	513.1	468.8*	50	9
	PFDA	513.1	268.9	50	17
8	PFUnA	563.1	518.9*	88	9
	PFUnA	563.1	493.2	88	29
9	PFDoA	613.1	568.9*	103	9
10	PFTTrDA	663.1	618.9*	93	9
	PFTTrDA	663.1	168.9	93	29
11	PFTeDA	713.1	668.9*	88	13
12	PFBS	298.8	98.9	128	33
	PFBS	298.8	80.0*	128	37
13	PFPeS	348.8	98.9	136	37
	PFPeS	348.8	80.0*	136	45

序号	化合物	母离子 (Da)	子离子 (Da)	锥孔电压 (V)	碰撞电压 (V)
14	PFHxS	398.8	98.9	161	41
	PFHxS	398.8	80.0*	161	45
15	PFHpS	448.8	98.9	166	45
	PFHpS	448.8	80.0*	166	49
16	PFOS	498.8	98.9	172	45
	PFOS	498.8	80.0*	172	50
17	PFNS	548.9	98.9	191	53
	PFNS	548.9	80.0*	191	57
18	PFDS	598.8	98.9	196	53
	PFDS	598.8	80.0*	196	61
19	9Cl-PF3ONS	530.7	350.9*	136	29
	9Cl-PF3ONS	530.7	83.0	136	29
20	11Cl-PF3OUdS	630.9	450.9*	136	35
21	4:2 FTS	327.1	306.9*	123	21
	4:2 FTS	327.1	81.0	123	29
22	6:2 FTS	427.2	406.9*	128	25
	6:2 FTS	427.2	81.0	128	37
23	8:2 FTS	527.2	506.8*	171	29
	8:2 FTS	527.2	81.0	171	41
24	HFPO-DA	329.0	285.0*	55	5
25	ADONA	376.9	250.9*	80	10
	ADONA	376.9	84.9	80	18
26	OBS	602.9	171.9*	130	40
	OBS	602.9	108.0	130	40
27	PFOSA	498.1	168.9	136	33
	PFOSA	498.1	78.0*	136	37
28	NMeFOSA	512.2	218.9	128	25

序号	化合物	母离子 (Da)	子离子 (Da)	锥孔电压 (V)	碰撞电压 (V)
	NMeFOSA	512.2	168.9*	128	29
29	NEtFOSA	526.2	218.9	128	25
	NEtFOSA	526.2	168.9*	128	29
30	NMeFOSE	615.7	59.1*	98	13
31	NEtFOSE	629.8	59.1*	103	13
32	¹³ C ₄ PFBA	217.0	171.9*	60	5
33	¹³ C ₅ PFPeA	268.0	222.9*	60	5
34	¹³ C ₂ PFHxA	315.0	269.9*	60	5
35	¹³ C ₄ PFHpA	367.1	321.9*	60	5
36	¹³ C ₄ PFOA	417.1	371.8*	50	5
37	¹³ C ₅ PFNA	468.1	422.9*	60	5
38	¹³ C ₂ PFDA	515.1	469.9*	60	5
39	¹³ C ₂ PFUnA	565.0	519.8*	100	8
40	¹³ C ₂ PFDoA	615.0	570.0*	120	2
41	¹³ C ₃ PFHxS	401.8	98.9	156	41
	¹³ C ₃ PFHxS	401.8	80.0*	156	49
42	¹³ C ₈ PFOS	506.9	98.9	196	49
	¹³ C ₈ PFOS	506.9	80.0*	196	77
43	¹³ C ₂ 6:2FTS	429.2	408.9*	128	25
	¹³ C ₂ 6:2FTS	429.2	81.0	128	41
44	¹³ C ₈ PFOSA	506.1	78.0*	156	37
45	¹³ C ₃ HFPO-DA	332.0	286.7*	120	69
	¹³ C ₃ HFPO-DA	184.9	118.9	93	17
46	¹³ C ₂ PFOA	414.9	370.0*	70	5
注：*为定量离子。					

附录 D
(资料性)
31 种 PFAS 保留时间

本方法测定的 31 种 PFAS 保留时间如表 D.1 所示

表 D.1 31 种 PFAS 保留时间示例

序号	化合物	相对保留时间 (min)
1	PFBA	3.86
2	PFPeA	9.01
3	PFHxA	10.24
4	PFHpA	10.95
5	PFOA	11.50
6	PFNA	11.95
7	PFDA	12.37
8	PFUnA	12.69
9	PFDoA	13.01
10	PFTTrDA	13.30
11	PFTeDA	13.59
12	PFBS	9.37
13	PFPeS	10.24
14	PFHxS	10.98
15	PFHpS	11.50
16	PFOS	11.91
17	PFNS	12.30
18	PFDS	12.65
19	9Cl-PF3ONS	12.14
20	11Cl-PF3OUdS	12.81
21	4:2 FTS	10.17
22	6:2 FTS	11.47
23	8:2 FTS	12.37
24	HFPO-DA	10.47

序号	化合物	相对保留时间 (min)
25	ADONA	11.01
26	OBS	12.52
27	PFOSA	13.02
28	NMeFOSA	13.83
29	NEtFOSA	14.15
30	NMeFOSE	13.85
31	NEtFOSE	14.14