

使用超高效液相色谱-多反射高分辨质谱Xevo MRT进行自来水中全氟化合物分析

甄云鹏，白旭，王志英 沃特世公司

Waters Corporation, United States

Published on September 10, 2025

摘要

全氟化合物已被列入新型持久性有机污染物。研究表明，全氟化合物在生物体内的蓄积水平远高于已知的有机氯农药和二恶英等持久性有机污染物。此外，它还具有生殖毒性、神经毒性和致癌性等。

已知全氟化合物的种类和数量已经超过10,000种，其中有标准品及对照品只占很少一部分。仍然大量新型和未知的PFAS分析需求和挑战等待着我们解决。为了应对不同环境样品，种类繁多，含量差异大（微量，痕量，亚ppt级别）的PFAS分析，沃特世公司建立了液相色谱-高分辨质谱全氟化合物高分辨质谱筛查数据库及整体解决方案。

本实验使用以上整体解决方案，即液相色谱-高分辨质谱全氟化合物筛查方法及数据库监测城市自来水等水体样品中全氟化合物污染状况，其结果显示，使用Waters Xevo™ MRT QToF质谱仪及该方法能够较好的实现此类新污染物的高通量，高灵敏度筛查。

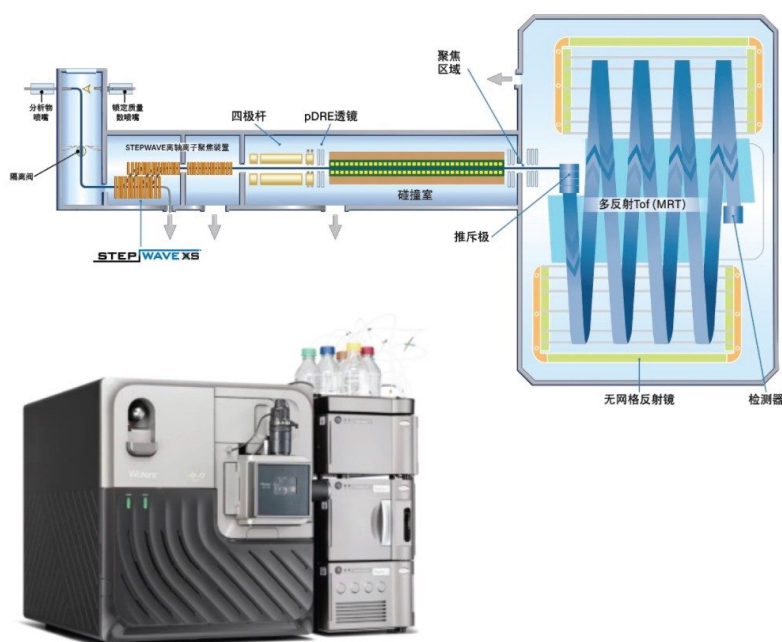


图1. Waters Xevo MRT QToF质谱仪。

产品特点介绍

- 沃特世多反射高分辨率飞行时间（MRT）技术可在较宽的 m/z 范围内提供始终如一的质谱分辨率，即使在100 Hz的扫描速率下分辨率结果也不会受到影响。
- Waters Xevo MRT质谱仪经过精心设计，将高端技术融入台式平台中，可帮助用户解决棘手难题。创新的采集系统配备双增益模数转换器，在高动态范围内亦可保持长期的系统稳定性，从而确保始终如一的优异数据质量、耐用性和重现性。
- 在MRT质量分析器内，4 m飞行路径将发生 总共8次反射，在高达100 Hz的扫描速率下，分辨率可达100,000 FWHM以上，实现出色的MS/MS性能。

沃特世全氟化合物的高分辨质谱解决方案

使用waters_connect™平台中的UNIFI™应用程序进行采集和数据处理。其中，使用沃特世高分辨质谱PFAS筛查

数据库，该数据库中包括化合物的保留时间及碎片信息等参数，通过数据库中精准的保留时间、质谱精确质量数及二级碎片等多次筛选可以获得令人满意的筛查结果。

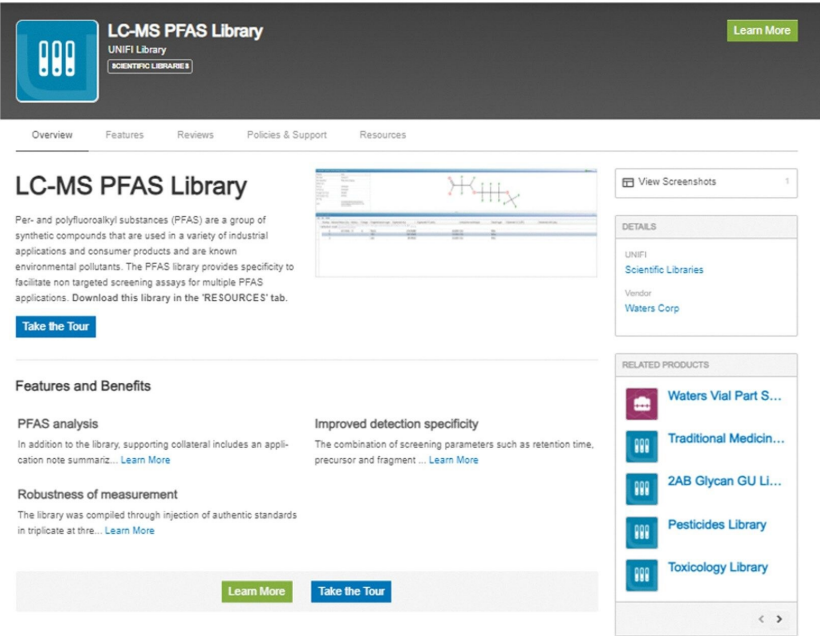


图2. 沃特世高分辨质谱PFAS筛查数据库。

实验方法及参数

液相色谱条件

液相系统:	ACQUITY Premier 系统 PFAS Analysis kit p/n: 176004588 ACQUITY UPLC BEH C ₁₈ p/n: 186002352 (1.7 μm, 2.1 x 100 mm Column)
流动相A:	2 mM 乙酸铵水溶液

流动相 B: 2 mM 乙酸铵甲醇溶液

柱温: 35 °C

样品室温度: 10 °C

梯度:

时间 (min)	流速 (mL/min)	A(%)	(%)	曲线
0.00	0.3	95	5	Initial
1.00	0.3	95	5	6
2.00	0.3	75	25	6
7.00	0.3	50	50	6
14.0	0.3	15	85	6
15.0	0.3	5	95	6
18.0	0.3	5	95	6
19.0	0.3	95	5	1
25.0	0.3	95	5	1

质谱条件

质谱系统: Xevo™ MRT QToF

离子化模式: ESI-

离子源温度: 100 °C

脱溶剂气温度: 250 °C

毛细管电压:	0.5 kV
锥口电压:	10 V
锥口气流速:	100 L/hour
脱溶剂气流速:	600 L/hour
采集方式:	MSE
采集范围:	m/z 50-1,200
碰撞能量:	低能量: 4 eV 高能量: 20-70 eV

实验结果

1. 自来水样品中全氟化合物筛查色谱叠加图及组分图展示。

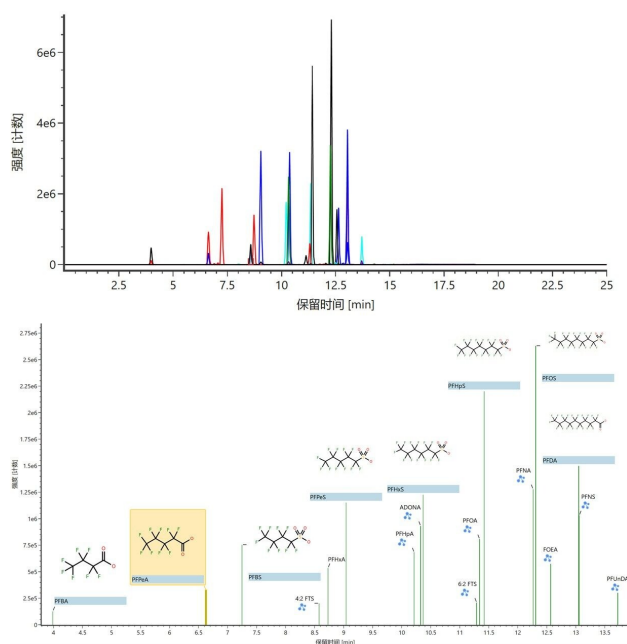


图3. 自来水样品中全氟化合物筛查色谱叠加图及组分图。

2. 最终筛查到全氟化合物在不同质量数范围 (m/z 213 Da-563 Da) (如下图4) 都能获得高达近 150,000的高质量分辨率和高质量精度。

组分概要											
组分名	化学式	分子质量数 (...)	质量数误差 (...)	预期保留时...	观测保留时...	同位素...	同位素匹配...	加合物	响应	1.7	质量数峰分辨率
1	PFOS	C8HF17O3S	499.93749	0.7	12.87	12.31	2.38	3.56 -H	2629819		142899.7331
2	PFHpS	C7HF15O3S	449.94069	0.8	11.99	11.42	2.22	4.19 -H	2201023		135103.4421
3	PFDA	C10HF19O2	513.96732	0.7	13.62	13.05	0.29	3.46 -H	1496699		135128.3434
4	PFNA	C9HF17O2	463.97051	0.6	12.84	12.27	0.69	3.65 -H	1279225		129099.9038
5	PFHxS	C6HF13O3S	399.94388	0.7	10.92	10.37	0.85	4.34 -H	1225026		131456.9272
6	PFPeS	C5HF11O3S	349.94707	0.5	9.59	9.04	1.40	4.44 -H	1151879		124883.9392
7	PFNS	C9HF19O3S	549.93430	0.6	13.63	13.06	0.92	3.14 -H, +C...	1032046		128355.3898
8	ADONA	C7H2F12O4	377.97615	0.6	10.88	10.32	1.29	4.35 -H	932118		123849.5503
9	PFOA	C8HF15O2	413.97370	0.6	11.90	11.35	1.54	4.06 -H	808026		123556.2365
10	PFBs	C4HF9O3S	299.95027	0.3	7.81	7.25	1.51	4.61 -H	754734		115780.7317
11	PFHpA	C7HF13O2	363.97690	0.4	10.77	10.21	2.02	4.19 -H	683443		131005.0159
12	FOEA	C10H3F17O2	477.98616	0.4	13.13	12.57	1.64	3.19 -H	575286		121938.7928
13	PFHxA	C6HF11O2	313.98009	0.4	9.28	8.73	0.62	4.80 -H	534725		115299.5531
14	PFPeA	C5HF9O2	263.98328	0.1	7.19	6.63	0.86	4.68 -H	324936		112160.3473
15	PFUnDA	C11HF21O2	563.96412	0.4	14.29	13.72	2.36	2.71 -H	301339		100634.3676
16	8:2 FTS	C10H5F17O3S	527.96879	0.6	13.62	13.06	0.89	3.22 -H	261667		92026.0231
17	6:2 FTS	C8H5F13O3S	427.97518	0.2	11.86	11.29	1.72	3.02 -H	209756		107225.4963
18	4:2 FTS	C6H5F9O3S	327.98157	0.1	9.13	8.58	1.15	3.54 -H	202824		104007.3151
19	PFBA	C4HF7O2	213.98648	0.0	4.43	3.99	0.48	5.05 -H	127799		94905.6487

图4. waters_connet软件筛查到全氟化合物在不同质量数范围（ m/z 213 Da-563 Da）都能获得高达近150,000 的高质量分辨率和高质量精度。

3.下图是自来水混标筛查结果（如下图5），其中以PFOS化合物筛查结果为例，即使目标化合物超痕量 在色谱柱上也能获得很好的信噪比，其他的全氟化合物均能够获得出色的灵敏度结果。同时，通过waters_connect软件可以自动展示出目标化合物一级、二级质谱图、良好的碎片质量精度及结构等信息。

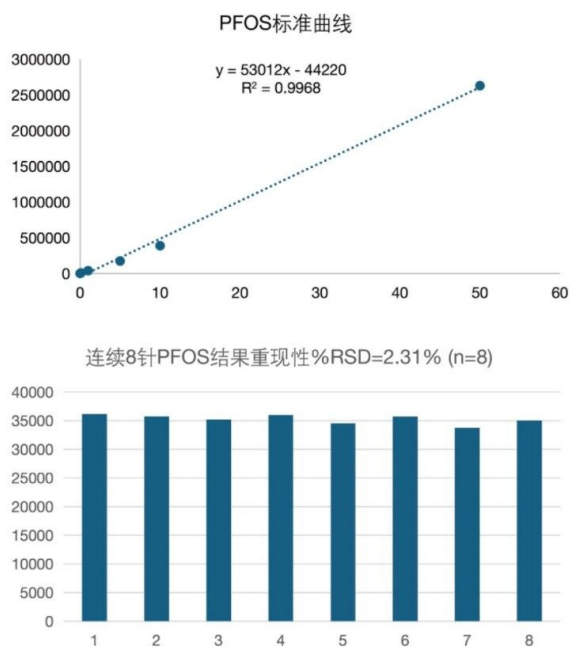


图6. 以自来水中PFOS化合物筛查结果为例，可以获得PFOS良好的标准曲线及结果重现性。

结论

使用超高效液相色谱-多反射高分辨质谱Xevo MRT及Waters PFAS筛查解决方案针对自来水中全氟化合物分析能够获得以下结果：

- ACQUITY Premier液相色谱系统采用了MaxPeak高性能表面(HPS)技术，能够消除全氟化合物中包含羧酸、磷酸基团等电负性化合物与色谱管路金属非特异性吸附。改善了金属敏感分析物的分离和检测，能够大幅降低未检出分析物带来的风险，从而提高效率以及结果可信度。
- 从以上自来水中全氟化合物筛查实验PFOS分析结果得到，质量分辨率筛查结果和质量偏差筛查结果不受不同化合物质量范围（m/z 213 Da-563 Da）影响，都能获得很好的质量分辨率和质量精度筛查结果。
- 以自来水中PFOS化合物筛查结果为例，即使目标化合物超痕量在柱上也能获得很好的一级、二级碎片质谱信息，能够获得很好的灵敏度筛查结果。

- 以自来水中PFOS化合物筛查结果为例，PFOS标准曲线线性为 $R^2=0.9968$ ，结果重现性为%RSD=2.31%（n=8），均能够获得很好的标准曲线线性和重现性筛查结果。
- 综上所述，使用沃特世最新的多反射高分辨率飞行时间质谱Xevo MRT QTof进行自来水中全氟化合物筛查，均能够获得近150,000的高质量分辨率、高质量精度、良好的重现性和出色的灵敏度结果，完全胜任针对不同样品对高通量和高灵敏度全氟化合物严格的筛查需求。

参考文献

1. 720007931ZH_使用沃特世LC-QTof全氟化合物筛查解决方案针对不同水体进行全氟化合物监测。

特色产品

Xevo MRT Mass Spectrometer <<https://www.waters.com/nextgen/global/products/mass-spectrometry/mass-spectrometry-systems/xevo-mrt.html>>

720008831ZH，2025年5月



© 2025 Waters Corporation. All Rights Reserved.

[使用条款](#) [隐私声明](#) [商标](#) [招聘](#) [法律和隐私声明](#) [危险化学品经营许可证](#) [Cookie](#) [Cookie设置](#)
[沪ICP备06003546号-2](#) [京公网安备 31011502007476号](#)