

使用高分辨 GC/Q-TOF 分析土壤和燕麦植株中的 PFAS 和其他环境污染物

作者

Luann Wong, Gabrielle Black
和 Thomas Young
加州大学戴维斯分校土木与环境
工程系

Sofia Nieto, Matthew
Giardina, Matthew Curtis 和
Tarun Anumol
安捷伦科技有限公司

摘要

土壤是全氟烷基和多氟烷基化合物 (PFAS)^[1] 的主要环境储存库之一，土壤中存在
的 PFAS 可能导致地下水和食品污染。目前的 PFAS 方法通常只能检测 40 至 80 种
PFAS，而且根据质量平衡研究，许多环境样品中的 PFAS 含量被大大低估^[2,3]。此
外，液相色谱/质谱 (LC/MS) 在分析某些挥发性 PFAS 方面存在明显局限性，应
考虑将气相色谱/质谱 (GC/MS) 作为重要的互补技术。

本研究介绍了使用 Agilent 7250 气相色谱/四极杆飞行时间质谱仪 (GC/Q-TOF) 提取
和分析土壤和植物中 PFAS 的不同方法。使用靶向筛查方法，根据这些污染物的精确
质量个人化合物数据库与谱库 (PCDL)，检测 PFAS 和其他环境污染物。使用非靶向
筛查和广泛的单位质量 NIST23 谱库，还在土壤和植物样品中鉴定出更多的污染物，
包括多氯联苯 (PCBs)、多溴联苯醚 (PBDEs) 和阻燃剂。

前言

PFAS 是一种持久性合成有机污染物，可能发生生物累积^[4]。美国国家环境保护局 (EPA) 制定的 PFAS 物质清单目前包括近 8000 种 PFAS 化学物质^[5]，从挥发性 PFAS (如普遍存在的氟调聚醇 (FTOHs)) 到长链 PFAS (包括最常检出的全氟辛酸 (PFOA) 和全氟辛烷磺酸 (PFOS))。虽然长链 PFAS 正逐步被淘汰，但由于普遍认为挥发性更强的 PFAS 毒性更低，因此短链 PFAS 的生产正在不断增加。这些短链 PFAS (如 6:2 FTOH) 更难使用已建立的方法通过 LC/MS 检测到，而且最近的研究表明，它们具有相同的毒性^[6,7]。

土壤是 PFAS 和其他许多持久性环境污染物的主要储存库，可能导致地下水、大气和生物群受到污染。因此，为了更好地了解这些污染物的来源和迁移情况，使用 Agilent 7250 GC/Q-TOF 对土壤和植物提取物进行了分析。

为了尽可能提高 PFAS 检测的灵敏度，采用了基于 PFAS 精确质量谱库的靶向筛查方法。本研究中使用的 PFAS PCDL 包括超过 150 张电子轰击电离 (EI) PFAS 谱图以及保留时间 (RTs) 和保留指数 (RIs) 信息，具体信息可参阅另一篇应用简报^[8]。

除 PFAS 外，使用靶向和非靶向筛查工作流程，还在土壤和植物中鉴定出许多持久性污染物。这些污染物包括农药、多环芳烃 (PAHs)、PCBs、PBDEs 和阻燃剂。

实验部分

样品采集

土壤和燕麦植株采集自加利福尼亚州的两块田地 (F1 和 F2)，这两块田地都曾接受过生物固体处理。在施用生物固体前采集土壤样品 (标记为 PreA，代表施用生物固体前)。在用堆肥 (Comp)、堆肥和石灰 (C&L) 处理小块地之前，还对经认证的 USDA 有机 (Org) 田地进行了采样，并采集了堆肥。在收割时 (Hvst) 也对土壤进行了采样。植物与土壤样品在相同的区域采集。

样品前处理

土壤和植物样品或用二氯甲烷 (DCM) 萃取以进行液体进样，或进行顶空固相微萃取 (HS-SPME)。对于 DCM 萃取，称取 2 g 土壤加入 50 mL 玻璃离心管中，并加入 5 mL DCM。使用 Heidolph Multi Reax 试管振荡器以速度 5 涡旋含有样品的 50 mL 离心管 5 min，并以 3000 rpm 离心 5 min。将约 0.5 mL 上清液提取物转移至 2 mL 自动进样器样品瓶中。将包括茎、叶、种子和种荚的完整植物样品切成 2–5 mm 小段。然后，使用二氯甲烷以与土壤相同的方式萃取 2 g 植物样品。每组还制备了方法空白样品。

对于 HS-SPME，将土壤 (2 g) 和切碎的植物材料 (1 g) 转移至 20 mL 顶空样品瓶中，分别加入 2 mL 或 3 mL 去离子水。

SPME 条件

使用 Agilent PAL 3 CTC 自动进样器进行 HS-SPME。测试了四种不同的纤维头 (Agilent 100 μ m PDMS、95 μ m CWR/PDMS、65 μ m DVB/PDMS 和 80 μ m DVB/CWR/PDMS，部件号 5191-5878)，并优化了 SPME 条件。在 300 °C 下将纤维头老化 5 min。将样品平衡 10 min，并将 SPME 纤维头插入样品瓶顶空。以 300 rpm 在 50 °C 下萃取 35 min (编程为 10 秒开，2 秒关循环)，然后在 250 °C 下在 GC 进样口脱附 7 min。GC 进样口配备了用于 SPME 分析的 0.75 mm 内径衬管和耐磨 Merlin 微密封隔垫。

数据采集

采用 Agilent 7250 GC/Q-TOF 系统进行 GC/MS 分析。所有数据都在全谱采集模式下采集。使用两种不同的 GC 色谱柱采集数据。DB-624 是一种中等极性 GC 色谱柱，为适合 GC 分析的 PFAS 化合物提供了理想的保留和分离性能。使用该色谱柱和 PFAS PCDL 进行 PFAS 筛查。还使用了非极性 DB-5ms 色谱柱，以充分利用 NIST23 谱库中具有 EI 谱图的所有化合物的可用 RI 信息。数据采集参数见表 1。

表 1. 数据采集参数

	Agilent DB-5ms	Agilent DB-624
MS	Agilent 7250 GC/Q-TOF	
GC	Agilent 8890 GC	
进样口	多模式进样口，安捷伦超高惰性 4 mm 衬管，单锥，带玻璃毛	
进样口温度	70 °C 保持 0.01 min，然后以 300 °C/min 升至 250 °C	
进样量	1 µL	
色谱柱	Agilent J&W DB-5ms 超高惰性柱 (UI), 30 m × 0.25 mm, 0.25 µm	Agilent DB-624 超高惰性柱, 30 m × 0.25 mm, 1.4 µm
柱温箱升温程序	35 °C 保持 2 min, 以 7 °C/min 升至 210 °C, 以 20 °C/min 升至 300 °C, 保持 4 min	30 °C 保持 2 min, 以 3 °C/min 升至 75 °C, 以 2 °C/min 升至 110 °C, 以 10 °C/min 升至 210 °C, 以 20 °C/min 升至 240 °C, 保持 2 min
色谱柱流速	1.2 mL/min, 恒流模式	1 mL/min, 恒流模式
载气	氦气	
传输线温度	250 °C	
四极杆温度	150 °C	
离子源温度	200 °C	
电子能量	70 eV	
发射电流	随时间段变化, 0.01–5 µA	
谱图采集速率	5 Hz	
质量数范围 (调谐)	50–1200 <i>m/z</i>	

数据处理

在 Agilent MassHunter 未知物分析软件 (版本 12.1) 中进行非靶向工作流程，涉及 SureMass 色谱解卷积和 NIST23 EI 谱库检索。使用 RIs 和精确质量信息确认化合物鉴定结果。使用 MassHunter 定量分析软件 (版本 12.1) 的 GC/Q-TOF Screener 工具和精确质量谱库进行农药和 PFAS 的疑似物筛查。

结果与讨论

PFAS 的特征 EI 碎裂

复杂基质中 PFAS 筛查的有效方法之一是疑似物筛查方法，因为它可以实现高灵敏度和特异性检测。使用高分辨精确质量 GC/MS 时，通过精确质量谱库来筛查大量目标化合物 (理论上无限的)，可以极大地促进这种方法。因此，本研究使用了之前创建的精确质量 GC/MS PCDL^[6]，涵盖 100 多种挥发性和半挥发性 PFAS 化合物，进行土壤和植物样品中的 PFAS 筛查。PCDL 中的 PFAS 化合物类别包括全氟烷基碘化物 (PFAIs)、氟调聚碘化物 (FTIs)、氟调聚醇 (FTOHs)、氟调聚烯烃 (FTOs)、氟调聚丙烯酸酯 (FTACs)、氟调聚甲基丙烯酸酯 (FTMACs)、氟调聚羧酸 (FTCA)、氟调聚不饱和羧酸 (FTUCA)、全氟烷烃磺胺类 (FASA) 等，其中许多只适合 GC/MS 分析。与化学电离相比，电子轰击电离 (EI) 是一种更通用的技术，因此选择 EI 模式用于 PFAS PCDL。EI 涵盖更广泛的 PFAS 化合物类别，使用户能够在同一数据文件中轻松筛查其他污染物。虽然许多 PFAS 化合物可在 EI 中高度碎裂，但大多数化合物仍具有特定的碎片离子，可通过 GC/Q-TOF 疑似物筛查算法或手动选择作为目标离子或定性离子。不同 PFAS 化合物类别的一些典型的特定碎片离子见表 2。

表 2. EI 中挥发性 PFAS 的特征碎片

特征碎片	中性丢失 (m/z)	PFAS 类别; 相对于基峰离子 (给定 PFAS 类别中强度最大的离子) 的百分比							
		FTOH	PFAI	FTI	FTAC	FTMAC	FTO	PFAL	FASA
[M]+	0	-	40	100	30	90	-	-	-
[M-I]+	126.9045	-	100	-	-	-	-	-	-
[M-H ₂ O-HF]+	38.0168	100	-	-	-	-	-	-	-
[M-CHO-F]+	48.011	-	-	-	-	-	-	90	-
[M-H ₂ O-F-HF-C ₂ H ₂]+	83.0308	80	-	-	-	-	-	-	-
[M-H ₂ O-2F]+	56.0074	70	-	-	-	-	-	-	-
[M-C ₂ F ₅]+	118.992	-	-	50	-	-	-	-	-
[M-HF-I]+	146.9107	-	-	50	-	-	-	-	-
[M-H ₂ O-CF ₃]+	87.0058	30	-	-	-	-	-	-	-
[M-H ₂ O-2F-CF ₃]+	126.0026	30	-	-	-	-	-	-	-
[M-F]+	18.9984	6	-	-	10	5	5	-	1
[M-CHO-2F]+	66.9995	-	-	-	-	-	-	25	-
[M-SO ₂ -CH ₃]+	78.9854	-	-	-	-	-	-	-	25
[M-H ₂ O-CF ₂]+	68.0074	25	-	-	-	-	-	-	-
[M-HF]+	20.0062	20	-	-	-	-	-	-	-
[M-2F-CF ₃]+	106.992	-	-	-	-	-	20	-	-
[M-H]+	1.0078	15	-	1	-	-	-	-	-
[M-CH ₃]+	15.0235	-	-	-	-	10	-	-	5
[M-H-HF]+	21.0141	15	-	-	-	-	-	-	-
[M-F-2HF]+	59.0109	15	-	-	-	-	-	-	-
[M-H ₂ O-F]+	37.009	15	-	-	-	-	-	-	-
[M-CF ₃ -HF]+	89.0014	-	-	10	-	-	5	-	-
[M-F-HF]+	39.0046	-	-	-	-	-	10	-	-
[M-NH ₂ SO ₂]+	79.9806	-	-	-	-	-	-	-	10
[M-C ₂ H ₃ -2F]+	65.0203	-	-	-	-	-	10	-	-
[M-CHO]+	29.0027	-	-	-	-	-	-	5	-
[M-SO ₂ -H]+	64.9697	-	-	-	-	-	-	-	5
[M-SO ₂ -F]+	82.9603	-	-	-	-	-	-	-	5
[M-SO ₂ -CF ₃ -HF]+	152.9633	-	-	-	-	-	-	-	5

土壤分析的 SPME 纤维头选择

评估了 4 种不同 SPME 纤维头从土壤中萃取挥发性化合物 (包括 PFAS) 的能力: PDMS、CWR/PDMS、DVB/PDMS 和 DVB/CWR/PDMS。使用从相同位置采集的土壤 (2 g) 样品进行测试, 与 2 mL 水混合, 并在相同的 SPME 条件下运行。各种测试的纤维头生成的总离子流色谱图 (TIC) 如图 1 所示。DVB/PDMS 和 DVB/CWR/PDMS 纤维头均产生了大量的峰, 表明能够提取各种化合物。

还评估了各纤维头的可识别峰数量 (表 3)。DVB/PDMS 和 DVB/CWR/PDMS 的谱库匹配结果数量相当, 但 DVB/CWR/PDMS 略高一点。因此, 选择其进行进一步分析。

表 3. SPME 纤维头性能。SureMass 解卷积算法生成的组分数量以及 NIST23 谱库匹配结果数量 (谱库匹配得分临界值 75)

纤维头类型	组分数量	匹配结果数量
PDMS	422	228
CWR-PDMS	514	419
DVB-PDMS	687	560
DVB-CWR-PDMS	683	570

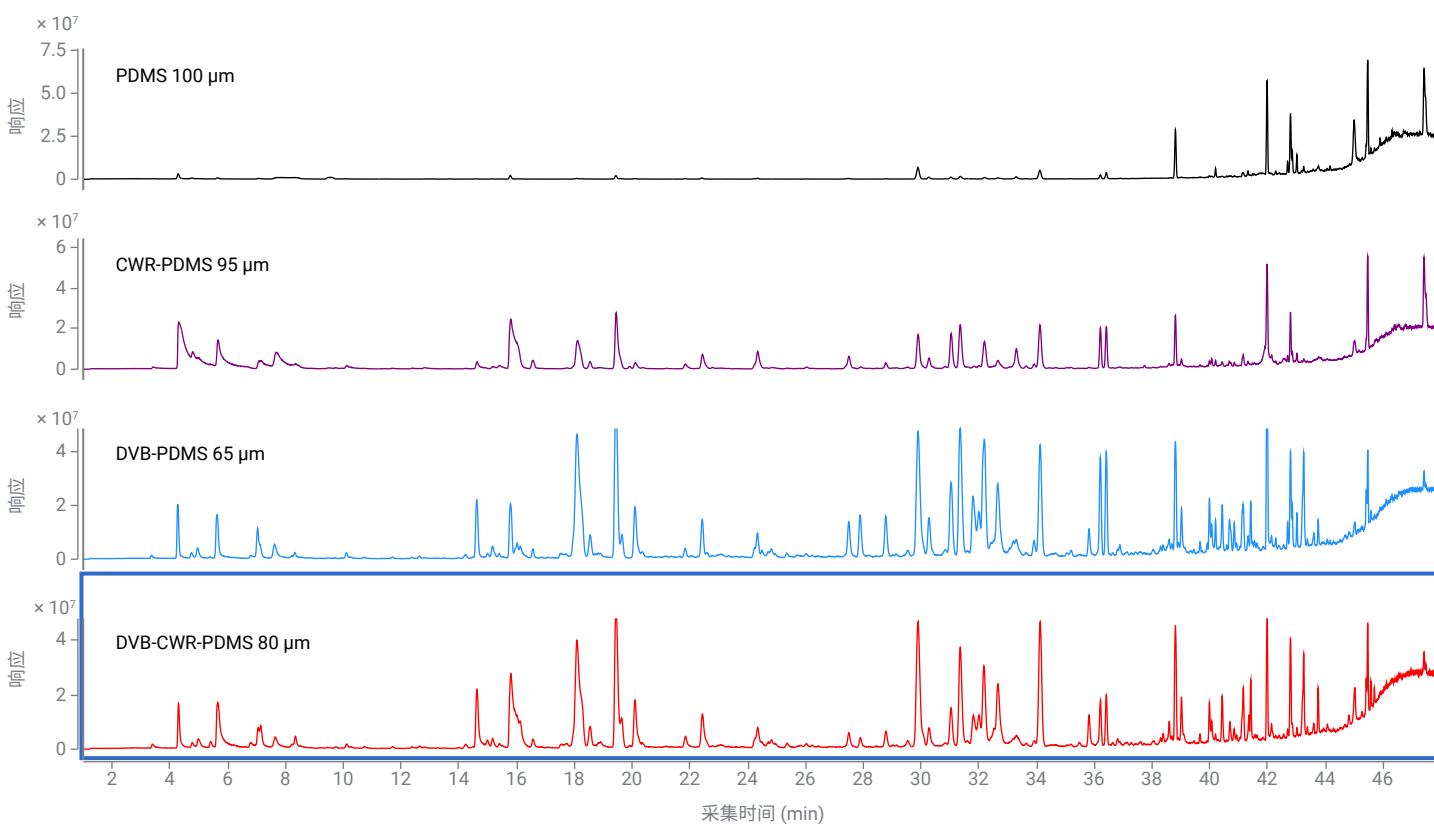


图 1. 处理土壤样品时的 SPME 纤维头性能

使用精确质量 PFAS 谱库检测土壤和植物样品中的挥发性 PFAS

使用精确质量 PFAS PCDL 对 PFAS 进行 GC/Q-TOF 检测时，使用了中等极性 DB-624 GC 色谱柱（更多详细信息请参见表 1）。

使用分别涉及 GC/Q-TOF Screener 和未知物分析软件的靶向和非靶向方法鉴别土壤和植物样品中的 PFAS。使用非靶向分析方法的一个优势是，可以使用精确质量谱库以及全面的大型公共谱库（如 NIST）同时筛查污染物，无需再进样。

基于 PCDL 的靶向疑似物筛查方法有几个优势，该方法完全在 MassHunter 定量分析软件中进行，之前已有详细介绍^[9,10]。该方法的一些主要优点包括高灵敏度以及数据分析方法设置和结果验证的高度灵活性和自动化。验证所需的手动操作非常少，可轻松获得报告。这些优势为用户提供了一种高效、省时的靶向分析工具。

在分析 SPME 数据时，检测到一些 PFAS 化合物。使用 GC/Q-TOF Screener 在一些土壤和植物样品中鉴定出的化合物示例见图 2。该化合物是一种挥发性 6:2 氟调聚醇，经常在环境基质中检测到。由于该化合物的含量在痕量级，在非靶向方法中并未检测到。

样品：土壤，F1

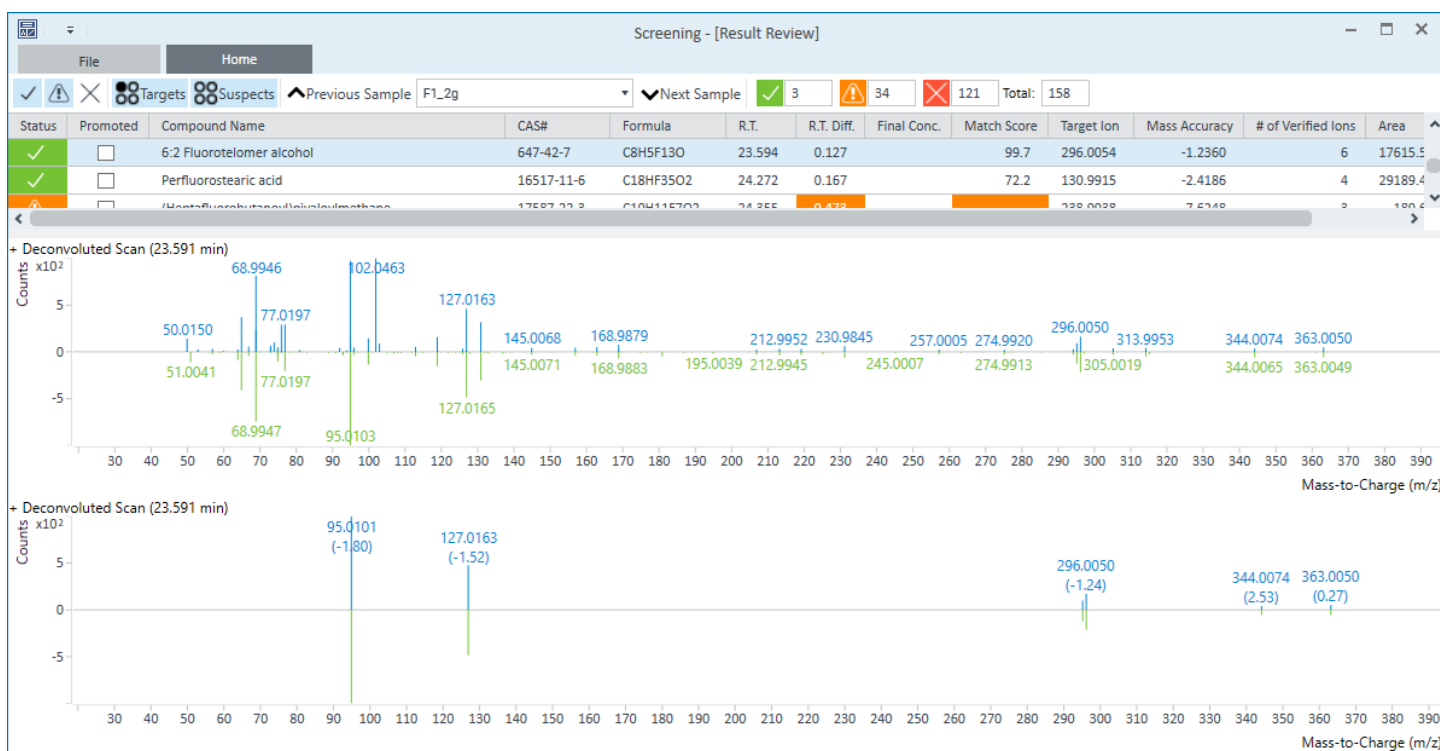


图 2. 使用基于 SPME 和 PFAS PCDL 的筛查方法从土壤中检测到的 6:2 FTOH。上面的镜像图显示了解卷积化合物谱图与 PFAS PCDL 谱图。下面的镜像图仅显示目标离子和定性离子

总体而言，HS-SPME 方法萃取 PFAS 效果更好，可鉴定出更多挥发性 PFAS 化合物。根据标准品进样估算检测到的 PFAS 的含量（总结见表 4），但尚未测定土壤和植物样品中的实际浓度。

土壤和燕麦植株中其他污染物的鉴定

针对 DCM 提取物和 SPME 鉴定了土壤和植物样品中的其他污染物。然而，虽然 SPME 可以更好地检测挥发性化合物，但在 DCM 提取物中检测到更多的环境污染物，包括 PCBs、PBDEs、农药、PAHs 和阻燃剂，因此将成为进一步讨论的重点。

使用 DB-5ms UI 色谱柱进行分离，以便能够使用广泛的 NIST23 谱库中的 RI 值，从而通过使用谱库匹配结果的 RI 罚分功能增加化合物鉴定的可信度。该色谱柱固定相也与 GC/Q-TOF 农药 PCDL 兼容，可考虑用于筛查农药和 PAHs 的 GC/Q-TOF 精确质量 EI 数据。经过快速预筛查，将鉴定出的污染物按污染物类别分组，并分别进行处理。

使用未知物分析和 NIST23 谱库，非靶向方法鉴定出 PCBs 和 PBDEs。为了在搜索单位质量谱库时消除基于精确质量 EI 数据的假阳性结果，使用了未知物分析 ExactMass 工具。图 4A 对该工具进行了进一步详细介绍，给出了在土壤提取物中检测到的一种 BDEs 的示例。

在土壤提取物中检测到 20 种不同的 PCBs 和 PBDEs（图 4B）。唯一检测到这组污染物 (BDE-47) 的燕麦植株提取物是在田地 F2 中生长的。

请注意，由于 PCBs 和 PBDEs 的沸点较高，SPME 未检测到它们。

在土壤提取物中鉴定出的另一组主要污染物是农药，使用基于农药 PCDL 的 GC/Q-TOF Screener 工作流程可快速、轻松地检测到这些污染物。基于 RT 的初始版本的农药 PCDL 增加了 RIs，以便能够在 Screener 工作流程中使用 PCDL 以及使用不同色谱方法采集的数据。根据 SANTE 指南设置 GC/Q-TOF Screener 方法。不过，扩大了 RT 窗口，以考虑到使用不同的色谱方法时产生的额外 RT 误差。

表 4. 使用精确质量 PFAS PCDL 和疑似物筛查方法，通过 HS-SPME 从土壤和植物中检测到的 PFAS。显示了估算量（以柱上量 pg 表示）

化合物	RT	定量离子	土壤样品							植物样品				
			F1 PreA	F1 Hvst	F2 Hvst	C&L Hvst	Comp Hvst	Org Hvst	Org Comp	F1	F2	Comp	C&L	Org
乙基全氟丁基醚	4.4	218.9851	150.2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
6:1 氟调聚醇	20.94	130.9915	-	2	-	-	-	-	-	2.2	-	-	-	-
6:2 氟调聚醇	23.59	296.0054	-	7.5	0.3	-	-	-	6.9	2.5	-	-	-	-
N-甲基全氟辛烷磺酰胺	43.1	93.9957	0.3	3.4	0.9	2.1	0.4	1.2	0.9	0.2	-	-	-	-

A 样品: 土壤, F1

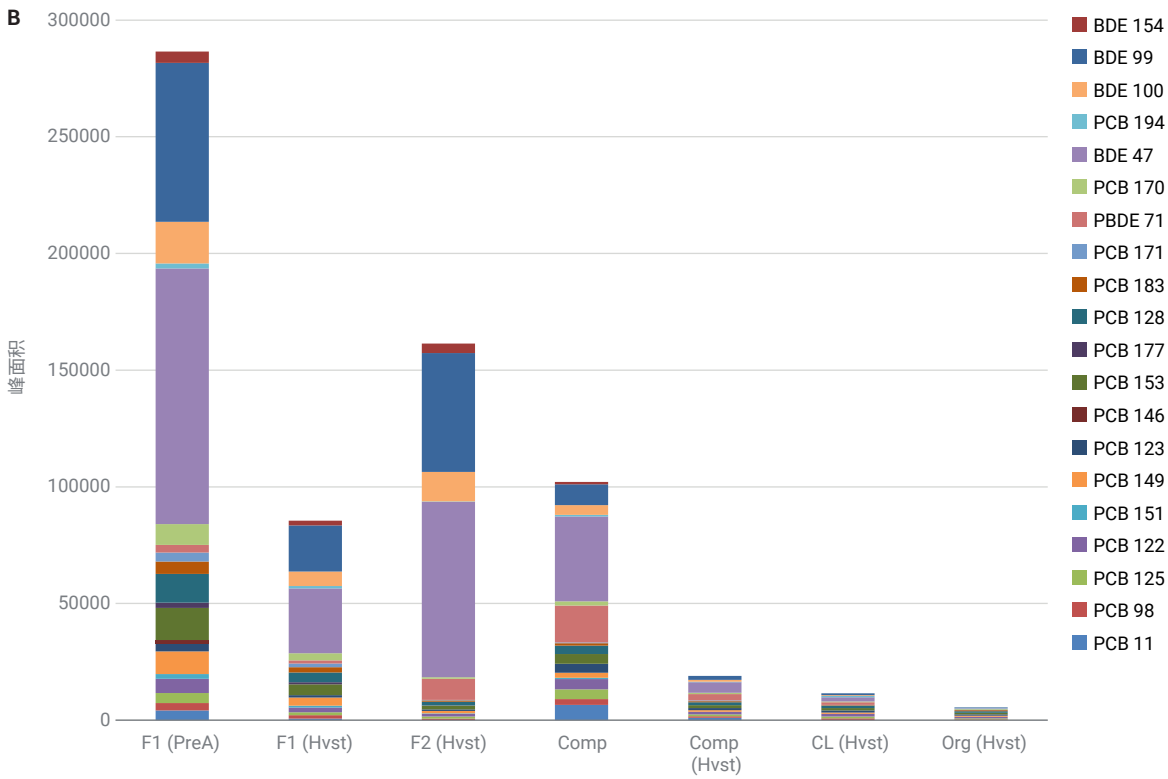
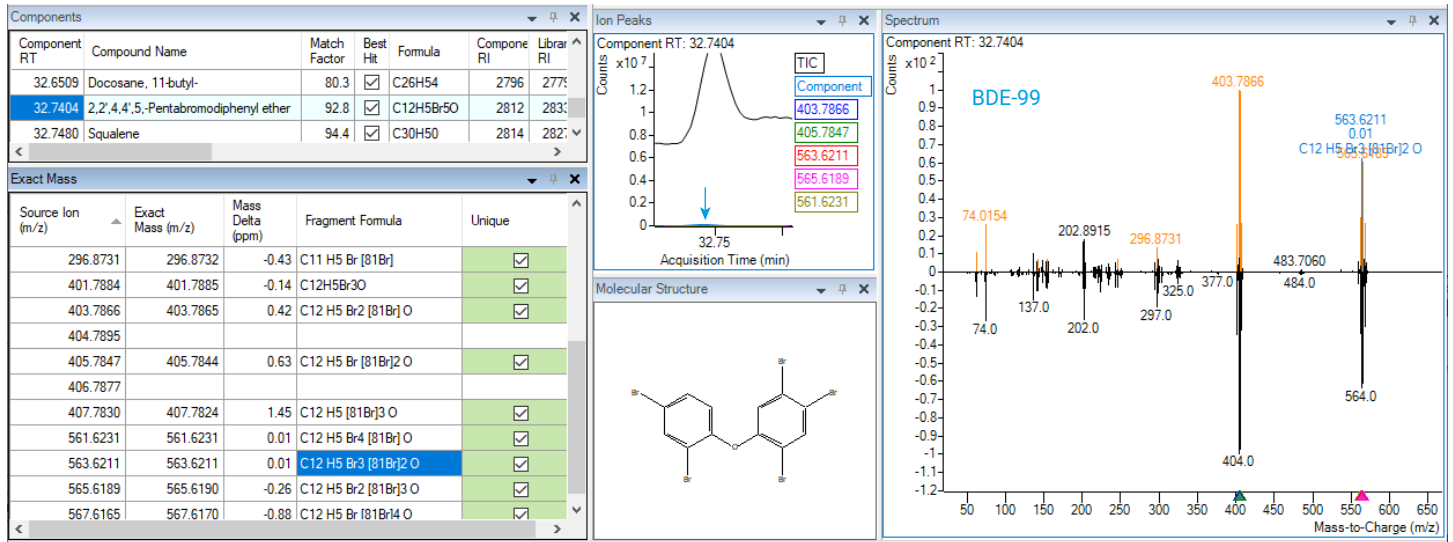


图 4. 使用 NIST23 从土壤 DCM 提取物中检测到的 PCBs 和 PBDEs。 (A) 在收割时从 F1 采集的土壤样品中检测到的 BDE 示例。ExactMass 表 (左下图) 显示了精确质量碎片离子与单位质量谱库的结果匹配程度, 从而进一步确认了化合物身份。当 m/z 与谱库匹配结果的分子式相对应时, 镜像图中将突出显示最具选择性和丰度最高的离子。组分色谱图中的箭头指向已鉴定出的组分 EICs。 (B) 柱状图显示了鉴定出 PCB 和 PBDE 的所有土壤样品中它们的响应

由于 DCM 萃取方法未专门针对从植物基质中回收农药进行优化，因此仅处理了土壤样品。在土壤提取物中共检测到超过 50 种农药（图 5 和表 5）。

在堆肥和堆肥处理的土壤中检测到大量农药，有机土壤提取物中也鉴定出少量农药。另一个有趣的现象是，总是在相同的土壤样品中检测到杀虫剂氟虫腈亚砷和氟虫腈砷。同时，丙环唑、腈菌唑和苯醚甲环唑等康唑类杀菌剂大多在堆肥和堆肥处理的土壤中检出。

样品：土壤，F1

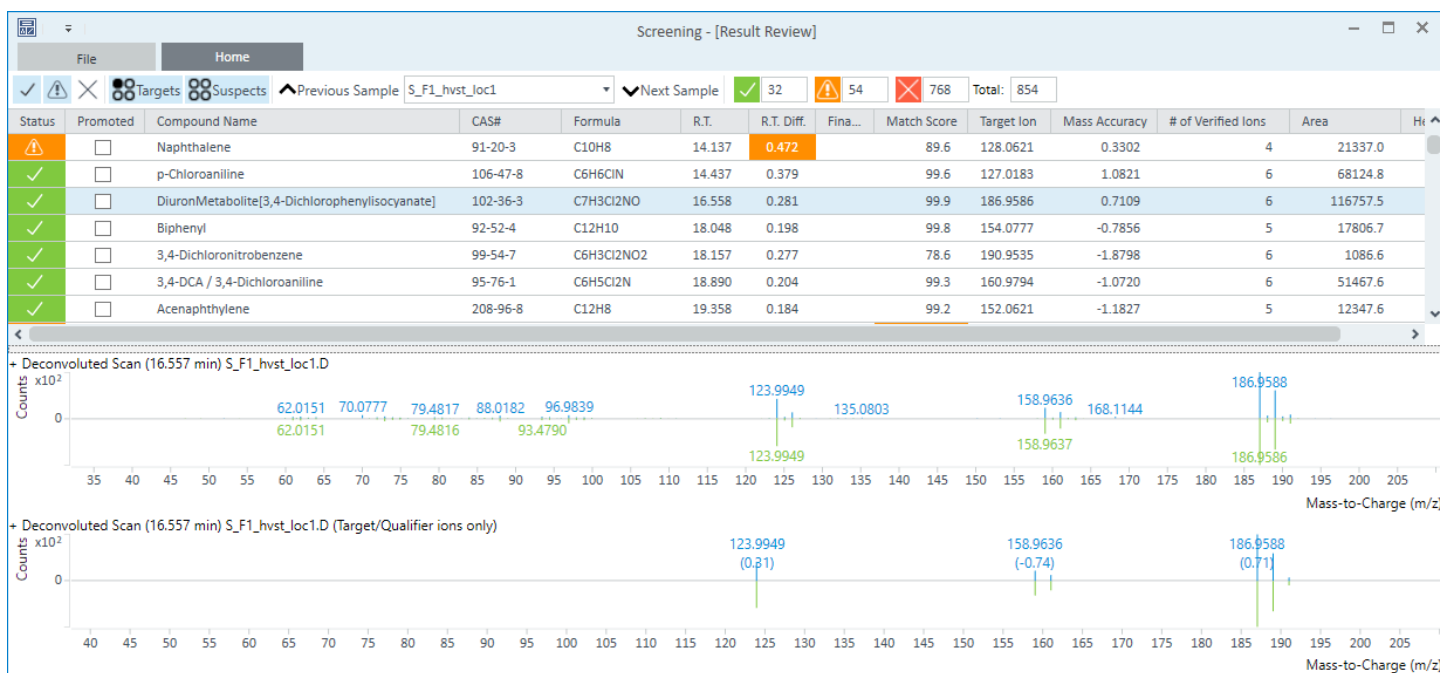


图 5. 使用农药 PCDL 筛查土壤提取物中的农药时，MassHunter 定量分析软件的 GC/Q-TOF Screener 窗口

表 5. 使用精确质量农药 PCDL 和疑似物筛查方法从土壤提取物中检测到的农药

化合物名称	RT	ΔRT*	谱库匹配得分	F1 PreA	F1 Hvst	F2 Hvst	C&L Hvst	Comp Hvst	Org Hvst	Org Comp
1,2,4-三氯苯	14.62	0.17	98.1	x						
敌草隆代谢物	16.56	0.28	99.9	x	x	x	x	x		x
1,2,3,5-四氯苯	16.98	0.32	90.7	x						
2,4,6-TCP/2,4,6-三氯苯酚	17.44	0.25	99.3				x	x	x	痕量
尼古丁	17.56	0.05	97.9							x
氯酚奴隆	18.71	0.22	99.7			x				x
3,4-DCA/3,4-二氯苯胺	18.88	0.21	99.9	x	x	x				
五氯苯	20.42	0.35	99.4	x	x					x
DEET/避蚊胺	21.46	0.22	82.1	痕量	痕量	痕量	x	x	痕量	x
2,3,4,5-四氯苯甲醚	22.74	0.32	99.8	x						x
溴苯腈	23.14	0.09	99.9	痕量			x	x		
HCB/六氯苯	23.52	0.36	99.7	x	x	x	痕量	x	x	x
氯硝胺	23.84	0.16	97.8		x	x				x
灭草灵 (MCC)	24.27	0.10	85.6	x	x	x				
PCP/五氯酚	24.27	0.24	99.7				痕量	x		x

化合物名称	RT	ΔRT*	谱库匹配得分	F1 PreA	F1 Hvst	F2 Hvst	C&L Hvst	Comp Hvst	Org Hvst	Org Comp
啉霉胺	25	0.10	82.5					痕量		x
六氯	25.1	0.03	98.5							x
五氯苯胺	25.74	0.24	99.7	x	x		x	x		x
氟硫草定	26.85	0.40	93.7	x	x	x	x	x		x
葱醌	27.59	0.05	99.7	x	x	x	x	x	x	x
4,4'-二氯二苯甲酮	27.86	0.02	80.3	x						x
氟虫腴亚砷	28.13	0.43	99.7			x	痕量	x		x
啉菌环胺	28.27	0.05	99.1				痕量	x		x
敌草隆	28.28	0.31	78.1				痕量	x		痕量
氟吡菌酰胺	28.49	0.18	93				x	x		x
氯杀螨	28.99	0.21	92.2	x	x	x				
反式氯丹 (γ-氯丹)	28.82	0.03	99.7	x	x	x	x	x	x	x
三氯生	28.85	0.03	99.3	x	x	x		x		x
顺式氯丹 (α-氯丹)	29.06	0.04	99.9	x	x	x	x	x	x	x
反式九氯	29.11	0.07	99.9	x	x	x	x	x	x	x
氟酰胺	29.23	0.11	85.2					x		x
咯菌腈	29.27	0.18	99.6							x
狄氏剂	29.5	0.05	84.6	x	痕量	痕量				
p,p'-DDE	29.42	0.04	99.2	x	x	x	x	x	x	x
恶草酮	29.43	0.14	97.7				x	x		x
o,p'-DDD (米托坦)	29.52	0.07	99.9	x	x	x	痕量	x	x	
氟虫腴砷	29.34	0.33	98.6	痕量		x	痕量	x		x
腈菌唑	29.48	0.11	98.8					x		x
p,p'-DDD	30.03	0.02	99.5	x	x	x	x	x	x	痕量
顺式九氯	30.03	0.04	99.9	x	x	x	痕量	痕量		x
唑草酮	30.32	0.13	98.8			x				
辛酰溴苯腈	30.39	0.06	88.4	x			x	痕量		
丙环唑 I	30.43	0.11	96.4				x	x	痕量	x
杀草敏 (PAC)	30.44	0.06	91.5					x		
丙环唑 II	30.5	0.04	96				x	x	痕量	x
戊唑醇	30.7	0.03	92.7				x	x		x
氯杀螨砷	30.7	0.39	89.6		痕量	痕量	x	x		x
联苯菊酯	31.08	0.09	98.6	痕量	x	痕量	x	x	x	x
顺式氯菊酯	32.19	0.00	99.1	x	x	x	痕量	x	x	x
反式氯菊酯	32.28	0.01	81			x			痕量	痕量
苯醚甲环唑 II	34.09	0.01	88.9					痕量		x

* 根据 RI 重新计算 ΔRT。

痕量表示谱库匹配因子低于 75。

PAHs 也纳入了农药 PCDL，并在同一工作流程中与农药一起进行筛查。PAHs 大多在土壤提取物中检出。然而，在大多数植物样品中也鉴定出菲和芘。考虑到菲和芘是土壤中检测到的丰度最高的 PAHs，这并不意外。

在土壤和燕麦植株中鉴定出一类主要污染物是阻燃剂。这些化合物中大多数的精确质量质谱图已包含在农药 PCDL 中。为了更全面地覆盖这组污染物，直接从未知物分析软件中将基

于 NIST23 谱库的未知物分析中发现的、农药 PCDL 中缺少的几种阻燃剂添加到定量方法中，从而与其他目标物一起进行筛查。对于这组污染物，在土壤和植物提取物之间观察到极其相似的响应（图 7）。

在土壤和植物样品中鉴定出的丰度最高的阻燃剂是磷酸三丁酯、磷酸三(2-氯丙基)酯和磷酸三(3-氯丙基)酯，都是常用的磷类阻燃剂。

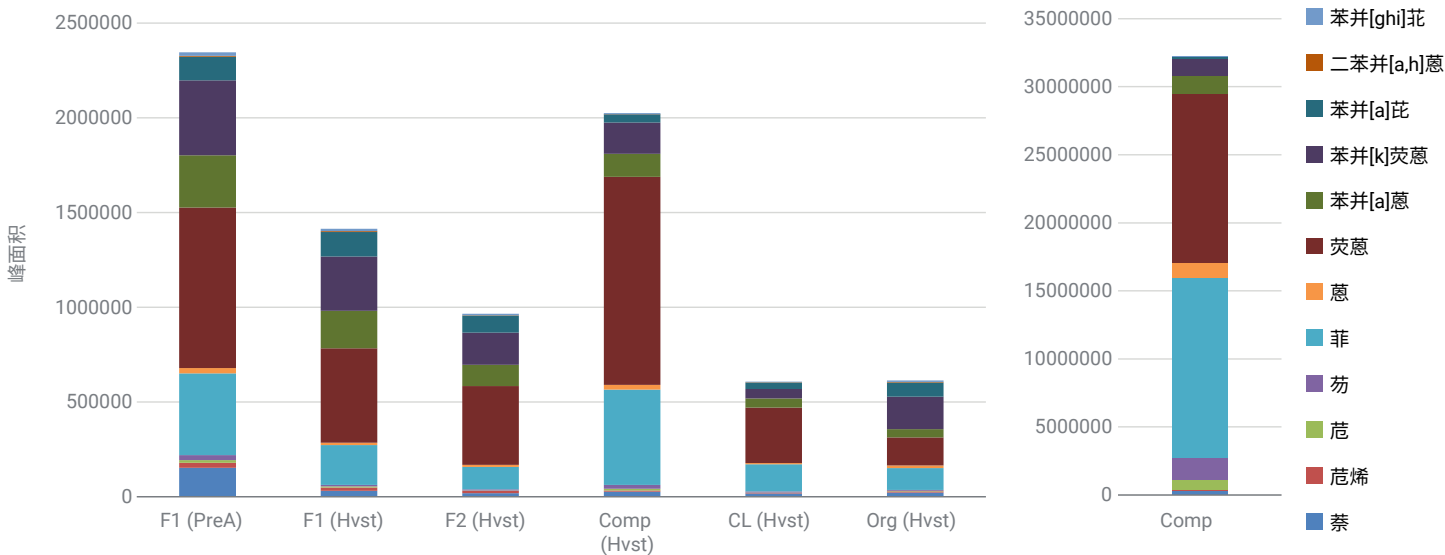


图 6. 使用精确质量农药 PCDL 和疑似物筛查方法从土壤 DCM 提取物中检测到的 PAHs。柱状图显示了 PAH 峰面积

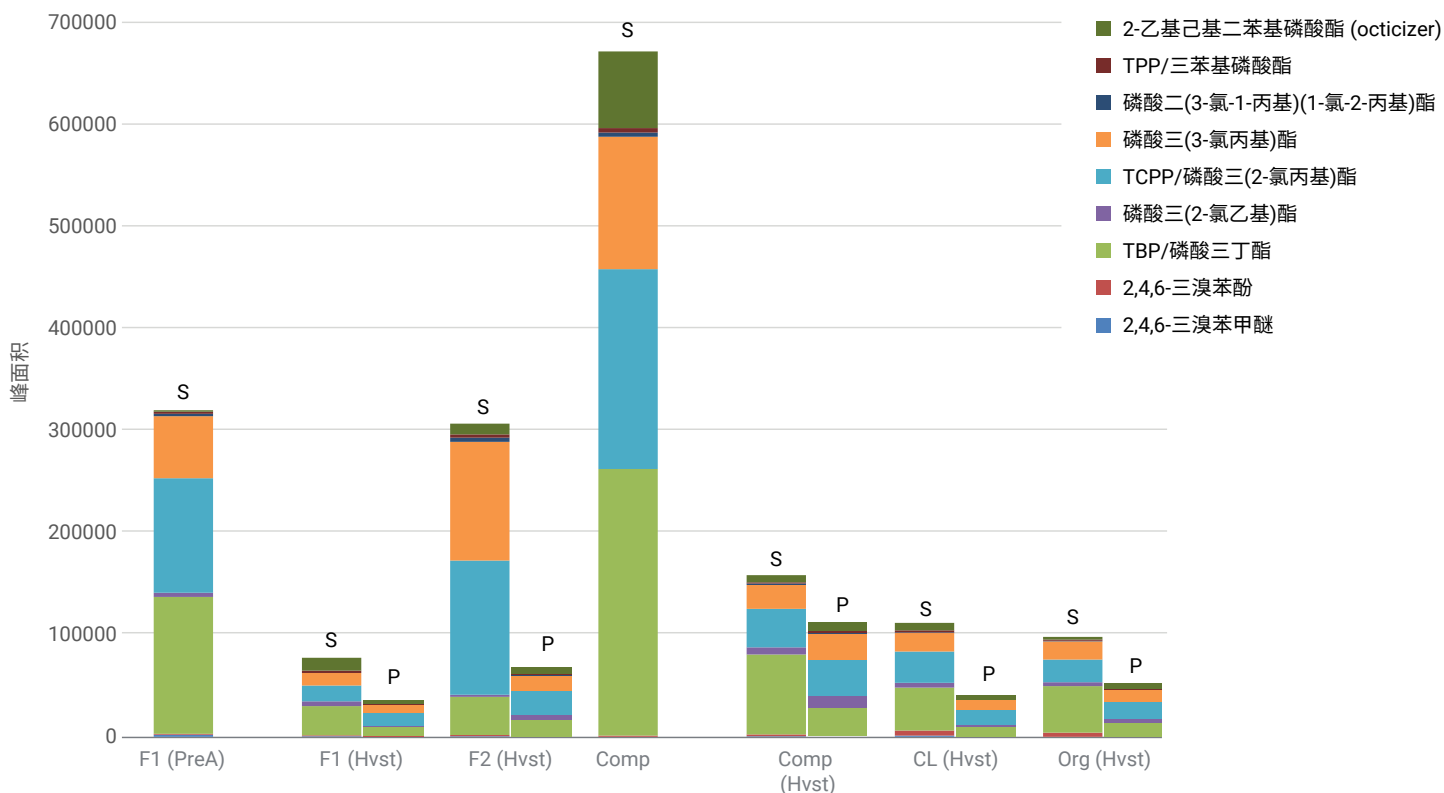


图 7. 使用包括精确质量 PCDL 和 NIST23 谱库的组合筛查方法从土壤和植物 DCM 提取物中检测到的阻燃剂。柱状图显示了土壤 (S) 和植物 (P) 提取物中的阻燃剂响应

结论

环境基质中的 PFAS 分析是一项具有挑战性的工作。在本应用简报中，介绍了从土壤和植物中提取 PFAS 的不同方法以及下游数据处理工作流程。本文建议的土壤和植物中挥发性 PFAS 分析更有效和更灵敏的方法是 HS-SPME 结合基于 PFAS 精确质量谱库和高分辨精确质量 GC/Q-TOF 的疑似物筛查。

此外，还筛查了土壤和植物提取物中的其他污染物，并使用靶向、非靶向和组合方法鉴定出了包括 PCBs、PBDEs、PAHs、农药和阻燃剂在内的各种污染物。

参考文献

1. Brusseau, M. L.; Anderson, R. H.; Guo, B. PFAS Concentrations in Soils: Background Levels versus Contaminated Sites. *Sci. Total Environ.* **2020**, Oct 20; 740, 140017. DOI: 10.1016/j.scitotenv.2020.140017
2. Lin, H.; Taniyasu, S.; Yamazaki, E.; Wu, N.; Lam, P. K. S.; Eun, H.; Yamashita, N. Fluorine Mass Balance Analysis and Per- and Polyfluoroalkyl Substances in the Atmosphere. *J. Hazard. Mater.* **2022**, Apr 28; 435, 129025. DOI: 10.1016/j.jhazmat.2022.129025
3. Spaan, K.; Van Noordenburg, C.; Plassman, M.; Schultes, L.; Shaw, S. D.; Berger, M.; Heide-Jørgensen, M. P.; Rosing-Asvid, A.; Granquist, S.; Dietz, R.; et al. Fluorine Mass Balance and Suspect Screening in Marine Mammals from the Northern Hemisphere. *Environ. Sci. Technol.* **2020**, Mar 12, 54(7), 4046–4058. DOI: 10.1021/acs.est.9b06773
4. Schildroth, S.; Rodgers, K. M.; Stynar, M.; McCord, J.; Poma, G.; Covaci, A.; Dodson, R. E. Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS) and Persistent Chemical Mixtures in Dust from U.S. Colleges. *Environ. Res.* **2021**, Apr 15, 206, 112530. DOI: 10.1016/j.envres.2021.112530
5. Williams, A. J.; Gaines, L. G. T.; Grulke, C. M.; Lowe, C. N.; Sinclair, G. F. B.; Samano, V.; Thillainadarajah, I.; Meyer, B.; Patlewicz, G.; et al. Assembly and Curation of Lists of Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS) to Support Environmental Science Research. *Front. Environ. Sci.* **2022**, Apr 5, 10, 1–13. DOI: 10.3389/fenvs.2022.850019
6. Sunderland, E. M.; HuHu, X. C.; Dassuncao, C.; Tokranov, A. K.; Wagner, C. C.; Allen, J. G. A Review of the Pathways of Human Exposure to Poly- and Perfluoroalkyl Substances (PFASs) and Present Understanding of Health Effects. *J. Expo. Sci. Environ. Epidemiol.* **2019** Mar 29, (2), 131–147. DOI: 10.1038/s41370-018-0094-1
7. Rice, P. A.; HuAungst, J.; Cooper, J.; Bandele, O.; Kabadi, S. V. A Comparative Analysis of the Toxicological Databases for 6:2 Fluorotelomer Alcohol (6:2 FTOH) and Perfluorohexanoic Acid (PFHxA). *Food Chem. Toxicol.* **2020** Apr, 138, 111210. DOI: 10.1016/j.fct.2020.111210
8. Wong, L.; Black, G.; Young, T.; Nieto, S. 用于环境样品 PFAS 分析的精确质量谱库以及使用 GC/Q-TOF 鉴定饮用水中污染物的工作流程, *安捷伦科技公司应用简报*, 出版号 5994-6966ZHNCN, **2023**
9. Van Gansbeke, W.; Albertsdóttir, A. D.; Polet, M.; Van Eenoo, P.; Nieto, S. 用于反兴奋剂检测的基于 AssayMAP Bravo 样品前处理平台的半自动 GC/Q-TOF 筛查, *安捷伦科技公司应用简报*, 出版号 5994-6702ZHNCN, **2023**

查找当地的安捷伦客户中心:

www.agilent.com/chem/contactus-cn

免费专线:

800-820-3278, 400-820-3278 (手机用户)

联系我们:

LSCA-China_800@agilent.com

在线询价:

www.agilent.com/chem/erfq-cn

www.agilent.com

DE45375629

本文中的信息、说明和指标如有变更,恕不另行通知。

© 安捷伦科技(中国)有限公司, 2024
2024年5月6日, 中国出版
5994-7351ZHNCN