

水中全氟與多氟烷基物質檢測方法—液相層析串聯式質譜儀法(NIEA W542.53B)草案總說明

為執行水中全氟與多氟烷基物質(PFAS)檢測，參考美國環保署方法(U.S. M1633A、Method 533)，且考量檢測實務需求，爰依水污染防治法第六十八條、土壤及地下水污染整治法第十條第三項、飲用水管理條例第十二條之一第三項，整併現行檢測相關規定，擬具「水中全氟與多氟烷基物質檢測方法—液相層析串聯式質譜儀法(NIEA W542.53B)」草案，其要點如下：

- 一、本方法草案適用於飲用水、飲用水水源、放流水、地面水體、地下水、廢(污)水中全氟與多氟烷基物質檢測。
- 二、本方法草案係將樣品離心後直接注射，或經固相萃取管匣萃取、濃縮、過濾後，注入液相層析串聯式質譜儀檢測全氟與多氟烷基物質。

水中全氟與多氟烷基物質檢測方法－液相層析串聯式質譜儀法(NIEA W542.53B)草案

公 告	說 明
主旨：訂定「水中全氟與多氟烷基物質檢測方法－液相層析串聯式質譜儀法(NIEA W542.53B)」，並自中華民國一百十六年一月十五日生效。	方法名稱及生效日期。
依據：水污染防治法第六十八條、土壤及地下水污染整治法第十條第三項、飲用水管理條例第十二條之一第三項。	法源依據。
公告事項：環境檢測標準方法內容詳如附件。	方法內容。

水中全氟與多氟烷基物質檢測方法

—液相層析串聯式質譜儀法草案

NIEA W542.53B

一、方法概要

樣品離心後直接注射，或經固相萃取管匣萃取、濃縮、過濾後，注入液相層析串聯式質譜儀(Liquid chromatography – tandem mass spectrometer, LC/MS/MS)檢測全氟與多氟烷基物質(Per- and polyfluoroalkyl substances, PFAS)。

二、適用範圍

本方法適用於檢測飲用水、飲用水水源、放流水、地面水體（註1）、地下水、廢(污)水中全氟與多氟烷基物質檢測，待測物如表一與表二所示。

三、干擾

- (一) 本方法的干擾可能來自於溶劑、試劑、玻璃器皿及樣品處理過程中所使用的設備之污染，可能導致層析圖基線之漂移，須執行方法空白樣品的測試，以確認無干擾情形。
- (二) 干擾物質亦可能是樣品中之其他物質，干擾的程度隨樣品而不同。如果有干擾發生，可用適當的前處理程序去除。
- (三) 在 LC/MS/MS 中如層析管柱材質種類、管柱的長度、內徑、層析移動相的流率、移動相及添加劑的選擇，都可能影響層析效果及偵測靈敏度。電灑法游離法效率和待測物、移動相組成及流率關係密切，需考量移動相本身的電導率及介電常數，以減少離子抑制的情況，最佳化 MS/MS 的分析效率。
- (四) 所有實驗器皿、溶劑洗瓶及管路避免使用鐵氟龍材質，建議採用聚乙烯(Polyethylene, PE)或聚丙烯(Polypropylene, PP)材質。實驗器皿先用甲醇潤洗，存放於乾淨之環境自然風乾。儀器內部含鐵氟龍材質的配件，置換成其他如不鏽鋼或聚醚醚酮(Polyetheretherketone, PEEK)材質，以降低來自儀器設備的背景值，必要時可裝遲滯管柱(Delay column)，以延遲液相層析儀系統中釋出之 PFAS 之滯留時間，分開其與上機樣品內 PFAS，降低干擾。
- (五) 避免水樣與任何玻璃材質的容器或移液管接觸，因為 PFAS 待測

物可能會吸附在玻璃表面。

四、設備與材料

- (一) 樣品瓶：聚丙烯或聚乙烯材質，250 mL 或其他適當體積，使用前先用試劑水及甲醇清洗並乾燥之。
- (二) 藥瓶：瓶身、瓶蓋為 PP 或 PE 材質，1.8 mL 以上，用於保存儲備標準品。
- (三) 離心管：瓶身、瓶蓋為 PP 或 PE 材質，15 mL 或其他體積，用於離心、收集沖提液或保存儲備標準品。
- (四) 上機用 vial 瓶：瓶身、瓶蓋為 PP 或 PE 材質，0.5 mL 以上。
- (五) 定量瓶：玻璃材質，10 mL、100 mL 或其他體積。
- (六) 分析天平：可精稱至 0.1 mg。
- (七) 丟棄式玻璃滴管：用於玻璃安瓶標準品的轉移。
- (八) 丟棄式塑膠滴管。
- (九) 微量移液管：10 μ L、25 μ L、50 μ L、100 μ L、250 μ L、1000 μ L 或其他體積，微量吸管尖(Pipette tips)建議使用 PP 或 PE 材質，或其他不易產生干擾之材質。
- (十) 液相層析串聯式質譜儀裝置。
 - 1.液相層析儀。
 - 2.自動注射系統：依不同注射體積搭配注射迴圈(Loop)與注射針。
 - 3.層析管柱：ACQUITY UPLC HSS T3 管柱，1.8 μ m (粒徑)，2.1 mm (內徑) $\times$ 100 mm (長度) 或同級品。
 - 4.遲滯管柱 (視需要)：Poroshell 120，EC-C18 管柱，2.7 μ m (粒徑)，3.0 mm (內徑) $\times$ 50 mm (長度) 或其他適當管柱，安裝於液相層析儀幫浦(Pump)與自動注射系統(Autosampler)之間。
 - 5.電灑游離串聯式質譜儀。
 - 6.數據處理系統：能顯示 PFAS 的滯留時間及尖峰面積之定性及定量系統。
- (十一) 離心機：離心力可達到 $980 \times g$ 。
- (十二) pH 試紙或 pH 測定儀：pH 量測範圍至少為 5 至 9。
- (十三) 萃取裝置：
 - 1.固相萃取管匣 (Solid phase extraction, SPE)：Oasis WAX 150

mg、Oasis WAX Plus 225 mg 或同級品。基質複雜樣品(例如含腐質之水樣)可使用添加碳的弱陰離子交換(Weak anion exchange, WAX)固相萃取管匣，例如 Oasis WAX/GCB (WAX 為上層，GCB 為下層)或同級品。

2.固相萃取槽：附閥可調整流率。

3.真空幫浦。

4.蠕動馬達：可調整流率。

5.樣品載入管：不鏽鋼或 PP 材質。

(十四) 氮氣吹乾裝置：可調整加熱溫度和氮氣吹出量。

(十五) 塑膠針筒及針頭：1 mL 或以上。

(十六) 針頭式過濾膜：0.22 μm 或更小孔徑，Nylon 材質。

(十七) 濾紙：1 μm 或 4 μm 孔徑，棉質纖維素成分或同級品。

(十八) 冷藏設施：儲放樣品，溫度可達 4 $^{\circ}\text{C}$ 。

(十九) 冷凍設施：儲放標準品，溫度可達 -20 $^{\circ}\text{C}$ 。

五、試劑

(一) 試劑水：不含 PFAS 之純水。

(二) 甲醇：LC 級或 LC/MS 級。

(三) 醋酸銨：LC 級或 LC/MS 級。(註 2)

(四) 甲酸：LC 級或 LC/MS 級。

(五) 5 mM 醋酸銨水溶液：移動相，取 0.39 g 醋酸銨加試劑水至 1 L，混合均勻。(註 3)

(六) 5 mM 醋酸銨之甲醇溶液：移動相，取 0.39 g 醋酸銨加甲醇至 1 L，混合均勻。(註 3)

(七) 2 mM 醋酸銨水溶液：移動相，取 0.156 g 醋酸銨加試劑水至 1 L，混合均勻。(註 3)

(八) 氨水：市售約 28% 至 30% 氨水溶液，美國化學學會標準試藥或同等級。

(九) 試劑：用於固相萃取法方式一

1. 含 1.96% 至 2.1% 氨水之甲醇溶液：取 7 mL 約 28 % 至 30 % 氨水溶液加甲醇至 100 mL，使用前配製。

2. 0.1 % 甲酸水溶液：取 1 mL 甲酸加試劑水至 1 L。

(十) 試劑：用於固相萃取法方式二

1. 含 0.924% 至 0.99% 氨水之甲醇溶液：取 3.3 mL 約 28% 至 30 % 氨水溶液加甲醇至 100 mL，使用前配製。
2. 1.131 % (0.3 M) 甲酸水溶液：取 1.131 mL 甲酸加試劑水至 100 mL。
3. 0.377 % (0.1 M) 甲酸水溶液：取 0.377 mL 甲酸加試劑水至 100 mL。
4. 1:1 的 0.1 M 甲酸/甲醇 (v/v)：取同體積的 0.1 M 甲酸水溶液與甲醇兩者混合。

(十一) 標準溶液：

1. 儲備標準溶液：購買市售可追溯濃度證明文件之標準溶液，標準溶液可能封裝於玻璃安瓶中，開瓶後須轉移至 PP 或 PE 材質之藥瓶或離心管，於 -20 °C 以下保存。
2. 中間標準溶液配製：將儲備標準溶液以甲醇稀釋，依需求配製成適當濃度，保存於 PP 或 PE 材質之藥瓶，於 -20 °C 以下保存，用於檢量線標準溶液之配製與前處理。

(十二) 內標準品溶液：內標準品名稱如表三。

1. 儲備內標準品溶液：購買市售可追溯濃度證明文件之標準溶液，標準溶液可能封裝於玻璃安瓶中，開瓶後須轉移至 PP 或 PE 材質之藥瓶或離心管，於 -20 °C 以下保存。
2. 中間內標準品溶液配製：將儲備內標準溶液以甲醇稀釋，依需求配製成適當濃度，保存於 PP 或 PE 材質之藥瓶，於 -20 °C 以下保存。用於檢量線標準溶液之配製與前處理。

六、採樣與保存

- (一) 採樣時，應製備現場空白樣品。
- (二) 若以固相萃取法檢驗長鏈 PFAS 時(C10 以上)需全量分析，應執行重複採樣。
- (三) 樣品使用樣品瓶進行採集，若樣品含餘氯，依採樣體積加入醋酸銨，使其濃度為 1 g/L。樣品採集後，置於大於 0 °C 至 6 °C 以下冷藏並在 14 天內完成前處理。前處理後之萃取液如無法立即上機分析，應置於 -20 °C 保存，上機前充分震盪，並於 28 日內完成上機。

七、步驟

(一) 本方法係為效能基準(Performance-based)分析方法，分析人員可依使用固相萃取管匣、前處理程序、液相層析儀、層析管柱及串聯式質譜儀之不同，適當修改本方法之檢測程序，惟修改後之方法其執行檢測所有步驟及程序，應符合本方法品質管制規範。

(二) 液相層析串聯式質譜儀操作條件：

1.移動相組成與梯度：

(1) 參考條件一(適用於固相萃取法與直接注入法)

A.流率：0.4 mL/min。

B.樣品注入量：10 μ L(固相萃取法)或 300 μ L (直接注入法)。

C.移動相 A：5 mM 醋酸銨水溶液。

移動相 B：5 mM 醋酸銨之甲醇溶液。

管柱再平衡時間(Post time)：4 分鐘

時間(min)	移動相A (%)	移動相B (%)
0	70	30
6	70	30
12	0	100
18	0	100
20	70	30

(2) 參考條件二(適用於固相萃取法)

A.流率：0.3 mL/min。

B.樣品注入量：10 μ L

C.移動相 A：2 mM 醋酸銨水溶液。

移動相 B：甲醇。

管柱再平衡時間(Post time)：4 分鐘

時間(min)	移動相A (%)	移動相B (%)
0.0	98	2
0.5	98	2
1.5	50	50
11.0	2	98
14.0	2	98
15.0	98	2

2.管柱溫度：35 °C。

3.負電荷模式串聯式質譜儀條件（電噴灑法）：

(1) 乾燥氣體溫度(Drying gas temperature)：150 °C。

(2) 乾燥氣體流率(Drying gas flow rate)：18 L/min。

(3) 霧化氣體壓力(Nebulizer gas pressure)：25 psi。

(4) 鞘氣溫度(Sheath gas temperature)：390 °C。

(5) 鞘氣流率(Sheath gas flow rate)：11 L/min。

(6) 毛細管電壓(Capillary voltage)：2000 V。

4.多重反應監測前驅物/產物離子偵測離子對如表四。

（三）檢量線製備

1.檢量線製備：配製至少 5 種不同濃度之標準品，各待測物對應之內標準品如表四，可依儀器廠牌的偵測靈敏度及線性範圍適當地修正。

(1) 固相萃取法：以甲醇或適當溶劑稀釋中間標準溶液與中間內標準品溶液。

(2) 直接注入法：以甲醇或適當溶劑稀釋中間標準溶液，取前述溶液加入中間內標準品溶液與試劑水。注意檢量線標準溶液中甲醇或適當溶劑與水的比例固定。

2.檢量線確認：檢量線製備完成後，應即以不同廠牌或同廠牌不同批號標準品作為第二來源標準品，配製接近檢量線中點濃度，進行檢量線確認，所測得濃度之相對誤差在 ± 30 % 以內。

- 3.依內標法，以線性迴歸法(Linear regression)製備檢量線（註4），其線性相關係數(Correlation coefficient, r)，必須大於或等於0.995。

（四）樣品前處理

1.固相萃取法：可依下列二種條件

(1) 固相萃取法方式一：採用含 2 % 氨水之甲醇溶液。

- A.取適量樣品(100 mL 至 250 mL)，若採全量分析，先於樣品瓶上標示水樣之位置，以便事後測量水樣體積（註5），查核樣品與添加樣品加入適量的中間標準溶液，所有樣品添加相同體積的中間內標準品溶液。
- B.以 pH 試紙或 pH 測定儀量測樣品，若樣品 pH 值未於 6 至 7 之間，以甲酸或氨水調整 pH 值至 6 至 7 之間後，進行固相萃取（註6）（註7）。
- C.固相萃取管匣以 6 mL 含 2 % 氨水之甲醇溶液與 6 mL 甲醇分別流洗，續以 6 mL 試劑水流洗，管匣未乾之前，關閉閥門。加入 2 mL 含 0.1 % 甲酸之水溶液浸泡約 2 分鐘後進行流洗，管匣快乾之前關閉閥門，使管匣保持濕潤狀態。
- D.樣品以大約 3 mL/min 至 5 mL/min 之流率流經固相萃取管匣。
- E.續以 3 mL 之 0.1 % 甲酸水溶液清洗管匣，接著加入 2 mL 試劑水清洗管匣。抽乾固相萃取管匣約 15 分鐘，以肉眼判斷管匣是否乾燥，若還有水分，續抽至乾燥為止。
- F.取 6 mL 甲醇分多次潤洗原盛裝樣品的管壁，再將潤洗用的甲醇移入固相萃取管匣沖提，流率約每秒一滴，以離心管收集沖提液。續加入 6 mL 含 2 % 氨水之甲醇溶液潤洗管壁並沖提管匣，流率約每秒一滴，用前述離心管合併收集沖提液。若沖提液不易流出，可以針筒之活塞略施壓力壓出，惟壓出後流率維持約每秒一滴。
- G.沖提液於 50 °C 下溫和氣流吹氮濃縮但不至乾，甲醇定量至 1 mL 至 2 mL 充分震盪均勻後，以針頭式過濾膜過濾之，取濾液至上機用 vial 瓶後以液相層析串聯式質譜儀分析。

(2) 固相萃取法方式二：採用含 1 % 氨水之甲醇溶液。

- A.取適量樣品(100 mL 至 250 mL)，若採全量分析，先於樣

品瓶上標示水樣之位置，以便事後測量水樣體積（註5），查核樣品與添加樣品加入適量的中間標準溶液，所有樣品添加相同體積的中間內標準品溶液。

- B. 以 pH 試紙或 pH 測定儀量測樣品，若樣品 pH 值未於 6 至 7 之間，以甲酸或氨水調整 pH 值至 6 至 7 之間後，進行固相萃取（註6）（註7）
- C. 固相萃取管匣以 15 mL 含 1 % 氨水之甲醇溶液流洗。
- D. 續以 5 mL 之 0.3 M 甲酸流洗，管匣未乾之前，關閉閥門。此步驟避免使用真空，管匣快乾之前關閉閥門，使管匣保持濕潤狀態。
- E. 樣品以大約 3 mL/min 至 5 mL/min 之流率流經固相萃取管匣。
- F. 以 5 mL 試劑水（2 次）沖洗固相萃取管匣，續以 5 mL 之 1:1 (v/v) 的 0.1 M 甲酸/甲醇 3 mL 之 0.1 % 甲酸水溶液清洗管匣。使用真空抽乾固相萃取管匣 15 秒以上，以肉眼判斷管匣是否乾燥，若還有水分，續抽至乾燥為止。
- G. 取 5 mL 含 1 % 氨水之甲醇分多次潤洗原盛裝樣品的管壁，再將潤洗用含 1 % 氨水之甲醇移入固相萃取管匣沖提，流率約每秒一滴，以離心管收集沖提液。若沖提液不易流出，可以針筒之活塞略施壓力壓出，惟壓出後流率維持約每秒一滴。
- H. 沖提液於 50 °C 下溫和氣流吹氮濃縮但不至乾，甲醇定量至 1 mL 至 2 mL 充分震盪均勻後，以針頭式過濾膜過濾之，取濾液至上機用 vial 瓶後以液相層析串聯式質譜儀分析。（註8）（註9）

2. 直接注入法：適用於表一 19 種 PFAS 目標待測物。

- (1) 樣品中如果含有微粒或是懸浮物時，可先取離心管加入樣品與適量甲醇（註10），查核樣品與添加樣品加入適量中間標準溶液，每個樣品添加相同體積的中間內標準品溶液，以離心力至少 $980 \times g$ ，離心約 15 分鐘後，或以針頭式過濾膜過濾，取澄清液以液相層析串聯式質譜儀分析。樣品如果無微粒或懸浮物，可省略離心或過濾步驟。

- (2) 檢量線標準溶液中甲醇與水的比例儘量與樣品一致。

（五）定性與定量

- 1.使用液相層析串聯質譜系統之多重反應監測模式(Multiple reaction monitoring mode, MRM)，前驅物/產物離子對如表四、表五所示。原則上以感度較高的前驅物/產物離子對作為定量，第二前驅物/產物離子對作為定性的依據。多重反應監測模式下前驅物/產物離子對層析圖如附圖所示。
- 2.待測物之兩監測前驅物/產物離子對（積分面積或高度）的相對比率(Ion ratio)須落在可接受的離子比例範圍之內（如表六所示），其相對比率須以檢量線查核分析或品管樣品的前驅物/產物離子對的比率為基準計算之。
- 3.PFBA 只有一前驅物/產物離子對，其滯留時間須落在檢量線查核標準品、檢量線確認標準品或添加樣品待測物之滯留時間 $\pm 2.5\%$ 範圍之內。另樣品之峰型與滯留時間應與其同位素內標準品之峰型相似，若仍有疑慮則以標準品添加後觀察峰型是否有變化。
- 4.分析物若含支鏈同分異構物(Branched and linear isomers)，且相對面積與直鏈化合物有顯著差異時，可以直鏈化合物作為定性判定之依據，定量時須將直鏈與支鏈異構物的訊號（面積）加總(如附圖所示)。PFOA、PFOS、PFHxS、PFOSA、PFNA 在市面上已有販售同時含有直鏈與支鏈異構物的定量標準品，實驗室應使用該標準品進行定性與定量。若第一來源標準品部分待測物無支鏈異構物，則應另備含有該待測物直鏈與支鏈異構物共存標準品，每批次樣品上機前分析以供支鏈異構物滯留時間參考。
- 5.當樣品待測物濃度超過檢量線，應取較少樣品量，重新前處理後上機分析。

八、結果處理

$$C_w = \frac{C \times V \times D \times 1,000}{M}$$

其中

C_w ：樣品濃度 (ng/L)

C ：由檢量線求得之待測物濃度 ($\mu\text{g/L}$)

V ：最終定量體積 (mL)

M ：樣品取用體積 (mL)

D ：稀釋因子，無單位。若未經稀釋， $D = 1$ 。

九、品質管制

- (一) 檢量線查核：檢量線應至少每 12 小時執行檢量線查核，所測得濃度之相對誤差值在 $\pm 30\%$ 以內。
- (二) 空白樣品分析：每批次或每 10 個樣品，應執行空白樣品分析，空白樣品分析值應小於方法偵測極限值之 2 倍。
- (三) 查核樣品分析：每批次或每 10 個樣品，應執行查核樣品分析，其回收率應在 50% 至 150% 範圍內。
- (四) 添加樣品分析：每批次或每 10 個樣品，應執行添加樣品分析，其回收率應在 40% 至 160% 範圍內。
- (五) 重複樣品分析：每批次或每 10 個樣品，應執行重複樣品分析，其相對差異百分比應在 30% 以內。
- (六) 內標準品監測：實驗室應評估每個樣品的內標準品離子尖峰面積並與本身所建立的品管要求比較，觀察樣品內標回收率是否異常。

十、精密度與準確度

單一實驗室查核及添加樣品分析之精密度與準確度的結果如表七至表十。

十一、參考資料

- (一) 行政院環境保護署，水中極性有機物檢測方法—液相層析／串聯式質譜儀法，NIEA W547.51B，中華民國 111 年。
- (二) U.S. EPA. Analysis of Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS) in Aqueous, Solid, Biosolids, and Tissue Samples by LC-MS/MS. Method 1633A, 2024.
- (三) U.S. EPA. Determination of Per- and Polyfluoroalkyl Substances in Drinking Water by Isotope Dilution Anion Exchange Solid Phase Extraction and Liquid Chromatography/Tandem Mass Spectrometry. Method 533, 2019.
- (四) Official Journal of the European Union. Commission Notice - Technical Guidelines Regarding Methods of Analysis for Monitoring of Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS) in Water Intended for Human Consumption (C/2024/4910).
- (五) DIN. Water Quality - Determination of Selected Per- and Polyfluoroalkyl Substances in Drinking Water - Method Using Liquid Chromatography/Tandem-Mass Spectrometry (LC-MS/MS). German

version EN 17892, 2024.

(六) U.S. EPA. Determination of Selected Per-and Polyfluorinated Alkyl Substances in Drinking Water by Solid Phase Extraction and Liquid Chromatography/Tandem Mass Spectrometry (LC/MS/MS). Method 537.1, 2020.

(七) U.S. FDA. Determination of 30 Per and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS) in Food and Feed using Liquid Chromatography-Tandem Mass Spectrometry (LC-MS/MS). Method C-010.03, 2024.

註 1：本方法驗證範圍未包含海域地面水體。

註 2：醋酸銨易潮解，應依原廠建議存放，或置於 2 °C 至 8 °C 環境。

註 3：若偵測靈敏度降低或滯留時間改變，可增加更換移動相頻率。

註 4：可使用 1/x 加權進行校正，以提高低濃度數值之準確性。

註 5：於樣品瓶中加入試劑水至水樣標線，再以量筒量測試劑水之體積，此即為水樣體積。

註 6：可用 50 % 甲酸水溶液與市售 28 % 至 30 % 氨水溶液調整 pH 值，或可用 5 % 甲酸水溶液與 2.8 % 至 3.0 % 氨水水溶液調整 pH 值。

註 7：樣品如果含有微粒或是懸浮物時，造成固相萃取匣阻塞，可將水樣分成 2 份以上，分別進行固相萃取，再合併萃取液進行後續分析。

註 8：渦旋(Vortex)震盪可避免長碳鏈 PFAS 暫時吸附於瓶壁；濃縮過程中可暫停 1 次至 2 次安排震盪再繼續濃縮，渦旋範圍儘量涵蓋使用高度。

註 9：固相萃取法上機的萃取液與檢量線標準品溶液中可添加醋酸（比率建議為 0.5 % 至 1.0 % (v/v)），添加比率儘量一致，有助改善目標待測物在層析圖的峰形。

註 10：添加甲醇可以降低長碳鏈的 PFAS 因離心或過濾時所造成的損失，建議甲醇的比例至少為 30 % 至 50 %。直接注入法樣品萃取液與檢量線標準品中可添加醋酸（比率建議為 0.1 % (v/v)），有助改善目標待測物在層析的峰形。

表一 全氟與多氟烷基物質中英文名稱及簡稱(一)

英文名稱	中文名稱	CAS No.	簡寫
Perfluorobutanoic acid	全氟丁酸	375-22-4	PFBA
Perfluoropentanoic acid	全氟戊酸	2706-90-3	PFPeA
Perfluorohexanoic acid	全氟己酸	307-24-4	PFHxA
Perfluoroheptanoic acid	全氟庚酸	375-85-9	PFHpA
Perfluorooctanoic acid	全氟辛酸	335-67-1	PFOA
Perfluorononanoic acid	全氟壬酸	375-95-1	PFNA
Perfluorodecanoic acid	全氟癸酸	335-76-2	PFDA
Perfluoroundecanoic acid	全氟十一烷酸	2058-94-8	PFUnA (PFUnDA) (PFUDa)
Perfluorododecanoic acid	全氟十二烷酸	307-55-1	PFDoA (PFDoDA)
Perfluorotridecanoic acid	全氟十三烷酸	72629-94-8	PFTTrDA
Perfluorotetradecanoic acid	全氟十四烷酸	376-06-7	PFTeDA
Perfluorobutanesulfonic acid	全氟丁基磺酸	375-73-5	PFBS
Perfluorohexanesulfonic acid	全氟己烷磺酸	355-46-4	PFHxS
Perfluoroheptanesulfonic acid	全氟庚烷磺酸	375-92-8	PFHpS
Perfluorooctanesulfonic acid	全氟辛烷磺酸	1763-23-1	PFOS
Perfluorodecanesulfonic acid	全氟癸烷磺酸	335-77-3	PFDS
1H,1H,2H,2H - perfluorooctane sulfonic acid (6:2) (6:2 Fluorotelomer sulfonic acid)	全氟 1H,1H,2H,2H, 辛烷磺酸 (6:2) (6:2 氟調聚物磺酸)	27619-97-2	6:2 FTS
1H,1H,2H,2H-perfluorodecane sulfonic acid (8:2) (8:2 Fluorotelomer sulfonic acid)	全氟 1H,1H,2H,2H, 癸烷磺酸(8:2) (8:2 氟調聚物磺酸)	39108-34-4	8:2 FTS
Perfluorooctanesulfonamide	全氟辛烷磺(醯)胺	754-91-6	PFOSA (FOSA)

表二 全氟與多氟烷基物質中英文名稱及簡稱(二)

英文名稱	中文名稱	CAS No.	簡寫
Perfluoropentanesulfonic acid	全氟戊烷磺酸	2706-91-4	PFPeS
Perfluorononanesulfonic acid	全氟壬烷磺酸	68259-12-1	PFNS
Perfluorododecanesulfonic acid	全氟十二烷磺酸	79780-39-5	PFDoS
1H,1H,2H,2H-Perfluorohexane-sulphonic acid (4:2) (4:2 Fluorotelomer sulfonic acid)	全氟 1H,1H,2H,2H, 己烷磺酸(4:2) (4:2 氟調聚物磺酸)	757124-72-4	4:2 FTS
Hexafluoropropylene oxide dimer acid	六氟環氧丙烷二聚酸	13252-13-6	HFPO-DA (GenX)
4,8-dioxa-3H-perfluorononanoic acid	4,8-二氧雜-3H-全氟壬酸	919005-14-4	ADONA
Perfluoro-3-methoxypropanoic acid	全氟-3-甲氧基丙酸	377-73-1	PFMPA (PF4OPeA)
Perfluoro-4-methoxybutanoic acid	全氟-4-甲氧基丁酸	863090-89-5	PFMBA
Nonafluoro-3,6-dioxaheptanoic acid	全氟-3,6-二氧雜庚酸	151772-58-6	NFDHA
9-Chloro-perfluoro-3-oxanonanesulfonic acid	9-氯-全氟-3-氧雜壬烷磺酸	756426-58-1	9Cl-PF3ONS
11-Chloroeicosafluoro-3-oxaundecane-1-sulfonic acid	11-氯-全氟-3-氧雜十一烷磺酸	763051-92-9	11Cl-PF3OUdS
Perfluoro(2-ethoxyethane)sulphonic acid	全氟-2-乙氧基乙烷	113507-82-7	PFEESA
Perfluoroundecanesulfonic acid	全氟十一烷磺酸	749786-16-1	PFUnS (PFUnDS) (PFUdS)
Perfluorotridecanesulfonic acid	全氟十三烷磺酸	791563-89-8	PFTTrS (PFTTrDS)

表三 內標準品英文名稱及簡稱

英文名稱	簡寫
Perfluoro-n-[¹³ C ₄]butanoic acid	¹³ C ₄ -PFBA
Perfluoro-n-[¹³ C ₅]pentanoic acid	¹³ C ₅ -PFPeA
Perfluoro-n-[1,2,3,4,6- ¹³ C ₅]hexanoic acid	¹³ C ₅ -PFHxA
Perfluoro-n-[1,2,3,4- ¹³ C ₄]heptanoic acid	¹³ C ₄ -PFHpA
Perfluoro-n-[¹³ C ₈]octanoic acid	¹³ C ₈ -PFOA
Perfluoro-n-[¹³ C ₉]nonanoic acid	¹³ C ₉ -PFNA
Perfluoro-n-[1,2,3,4,5,6- ¹³ C ₆]decanoic acid	¹³ C ₆ -PFDA
Perfluoro-n-[1,2,3,4,5,6,7- ¹³ C ₇]undecanoic acid	¹³ C ₇ -PFUnA
Perfluoro-n-[1,2- ¹³ C ₂]dodecanoic acid	¹³ C ₂ -PFD ₂ O ₂ A
Perfluoro-n-[1,2- ¹³ C ₂]tetradecanoic acid	¹³ C ₂ -PFTeDA
Perfluoro-1-[2,3,4- ¹³ C ₃]butanesulfonic acid	¹³ C ₃ -PFBS
Perfluoro-1-[1,2,3- ¹³ C ₃]hexanesulfonic acid	¹³ C ₃ -PFHxS
Perfluoro-1-[¹³ C ₈]octanesulfonic acid	¹³ C ₈ -PFOS
Perfluoro-1-[¹³ C ₈]octanesulfonamide	¹³ C ₈ -PFOSA
1H,1H,2H,2H-Perfluoro-1-[1,2- ¹³ C ₂]hexane sulfonic acid	¹³ C ₂ -4:2FTS
1H,1H,2H,2H-Perfluoro-1-[1,2- ¹³ C ₂]octane sulfonic acid	¹³ C ₂ -6:2FTS
1H,1H,2H,2H-Perfluoro-1-[1,2- ¹³ C ₂]decane sulfonic acid	¹³ C ₂ -8:2FTS
Tetrafluoro-2-heptafluoropropoxy- ¹³ C ₃ -propanoic acid	¹³ C ₃ -HFPO-DA

註：隨著市場上出現更多新的同位素標記物，實驗室可將新上市的同位素標準品納入分析中。

表四 待測物前驅物/產物離子與相對應內標

待測物與內標	前驅物離子	產物離子	相對應內標
PFBA	213	169	$^{13}\text{C}_4\text{-PFBA}$
PFPeA	263	219*	$^{13}\text{C}_5\text{-PFPeA}$
	263	69	
PFHxA	313	269*	$^{13}\text{C}_5\text{-PFHxA}$
	313	119	
PFHpA	363	319	$^{13}\text{C}_4\text{-PFHpA}$
	363	169	
PFOA	413	369*	$^{13}\text{C}_8\text{-PFOA}$
	413	169	
PFNA	463	419*	$^{13}\text{C}_9\text{-PFNA}$
	463	219	
PFDA	513	469*	$^{13}\text{C}_6\text{-PFDA}$
	513	219	
PFUnA	563	519*	$^{13}\text{C}_7\text{-PFUnA}$
	563	269	
PFDoA	613	569*	$^{13}\text{C}_2\text{-PFDoA}$
	613	319	
PFTeDA	663	619*	$^{13}\text{C}_2\text{-PFTeDA}$ 或 $^{13}\text{C}_2\text{-PFTeDA}$ 與 $^{13}\text{C}_2\text{-PFDoA}$ 平均
	663	169	
PFTeDA	713	669*	$^{13}\text{C}_2\text{-PFTeDA}$
	713	169	
PFBS	299	99	$^{13}\text{C}_3\text{-PFBS}$
	299	80*	
PFPeS	349	99	$^{13}\text{C}_3\text{-PFHxS}$
	349	80*	
PFHxS	399	99	$^{13}\text{C}_3\text{-PFHxS}$
	399	80*	
PFHpS	449	99	$^{13}\text{C}_8\text{-PFOS}$
	449	80*	

表四 待測物前驅物/產物離子與相對應內標(續)

待測物與內標	前驅物離子	產物離子	相對應內標
PFOS	499	99	$^{13}\text{C}_8\text{-PFOS}$
	499	80*	
PFNS	549	99	$^{13}\text{C}_8\text{-PFOS}$
	549	80*	
PFDS	599	99	$^{13}\text{C}_8\text{-PFOS}$
	599	80*	
PFDoS	699	99	$^{13}\text{C}_8\text{-PFOS}$
	699	80*	或 $^{13}\text{C}_2\text{-PFDoA}$
4:2 FTS	327	307*	$^{13}\text{C}_2\text{-4:2FTS}$
	327	81	
6:2 FTS	427	407*	$^{13}\text{C}_2\text{-6:2FTS}$
	427	81	
8:2 FTS	527	507*	$^{13}\text{C}_2\text{-8:2FTS}$
	527	80	
PFOSA	498	478	$^{13}\text{C}_8\text{-PFOSA}$
	498	78*	
HFPO-DA	285	185	$^{13}\text{C}_3\text{-HFPO-DA}$
	285	169*	
ADONA	377	251*	$^{13}\text{C}_3\text{-HFPO-DA}$
	377	85	
PFMPA	299	85	$^{13}\text{C}_5\text{-PFPeA}$
PFMBA	279	85	$^{13}\text{C}_5\text{-PFPeA}$
NFDHA	295	201*	$^{13}\text{C}_4\text{-PFHpA}$
	295	85	
9Cl-PF3ONS	533	353	$^{13}\text{C}_3\text{-HFPO-DA}$
	531	351*	
11Cl-PF3OUdS	633	453	$^{13}\text{C}_3\text{-HFPO-DA}$
	631	451*	
PFEESA	315	135*	$^{13}\text{C}_5\text{-PFHxA}$
	315	83	

表四 待測物前驅物/產物離子與相對應內標(續)

待測物與內標	前驅物離子	產物離子	相對應內標
PFUnS	649	99	¹³ C ₇ -PFUnA
	649	80*	
PFTrS	749	99	¹³ C ₂ -PFDoA
	749	80*	

註：*號者為建議之定量用前驅物/產物離子。

表五 內標準品前驅物/產物離子

待測物與內標	前驅物離子	產物離子
$^{13}\text{C}_4\text{-PFBA}$	217	172
$^{13}\text{C}_5\text{-PFPeA}$	268	223
$^{13}\text{C}_5\text{-PFHxA}$	318	273
$^{13}\text{C}_4\text{-PFHpA}$	367	322
$^{13}\text{C}_8\text{-PFOA}$	421	376
$^{13}\text{C}_9\text{-PFNA}$	472	427
$^{13}\text{C}_6\text{-PFDA}$	519	474
$^{13}\text{C}_7\text{-PFUnA}$	570	525
$^{13}\text{C}_2\text{-PFDaA}$	615	570
$^{13}\text{C}_2\text{-PFTeDA}$	715	670
$^{13}\text{C}_3\text{-PFBS}$	302	99
	302	80*
$^{13}\text{C}_3\text{-PFHxS}$	402	99
	302	80*
$^{13}\text{C}_8\text{-PFOS}$	507	99
	507	80*
$^{13}\text{C}_2\text{-4:2FTS}$	329	309
	329	81*
$^{13}\text{C}_2\text{-6:2FTS}$	429	409
	429	81*
$^{13}\text{C}_2\text{-8:2FTS}$	529	509
	529	81*
$^{13}\text{C}_8\text{-PFOSA}$	506	78
$^{13}\text{C}_3\text{-HFPO-DA}$	287	185
	287	169*

註 1：隨著市場上出現更多新的同位素標記物，實驗室可將新上市的同位素標準品納入分析中。

註 2：可視需求增加檢測內標準品第二對前驅物/產物離子。

表六 LC/MS/MS前驅物/產物離子對之離子強度比率(Ion ratio)規範

相對強度 (% of Base peak)	兩離子對比率的最大允許誤差 (%)
> 50	± 20
> 20 至 50	± 25
> 10 至 20	± 30
≤ 10	± 50

表七 直接注入法之查核及添加樣品分析精密度與準確度

待測物	查核樣品回收率 (n=5)		添加樣品回收率 (n=5)	
	平均 (%)	標準偏差 (%)	平均 (%)	標準偏差 (%)
PFBA	88.3	4.4	96.6	6.6
PFPeA	100	12.6	97.0	12.5
PFBS	96.4	11.0	94.4	17.2
PFHxA	89.3	6.7	86.1	2.0
PFHxS	94.4	17.5	92.8	12.6
PFHpA	78.4	6.6	92.3	12.0
PFHpS	110	12.9	104	25.4
6:2 FTS	114	12.4	102	18.1
PFOA	90.9	16.6	85.0	19.2
PFOS	90.0	10.1	100	13.0
PFNA	104	15.5	96.5	10.5
8:2 FTS	85.5	11.1	92.0	13.9
PFDA	99.7	12.6	102	10.6
PFDS	105	14.9	122	32.3
PFOSA	94.8	19.3	97.0	18.0
PFUnA	98.0	14.0	94.6	9.5
PFDoA	89.8	15.1	92.4	19.2
PFTTrDA	89.6	16.2	74.9	25.7
PFTeDA	95.5	7.6	86.6	6.1

註：配製查核樣品與添加樣品濃度為 0.141 µg/L，樣品內標準品濃度 0.141 µg/L。

表八 固相萃取法(方式一)查核及添加樣品分析之精密度與準確度

待測物	查核樣品回收率 (n=4)		添加樣品回收率 (n=5)	
	平均 (%)	標準偏差 (%)	平均 (%)	標準偏差 (%)
PFBA	96.0	1.2	101	1.2
PFPeA	96.5	2.8	95.2	0.5
PFHxA	91.7	2.6	94.8	2.6
PFHpA	94.0	5.3	98.5	2.8
PFOA	90.4	3.9	91.7	7.6
PFNA	99.4	0.3	100	7.6
PFDA	103	6.2	105	4.4
PFUnA	101	4.4	98.1	5.6
PFDoA	97.3	5.0	100	2.9
PFTTrDA	64.2	10.6	92.2	4.5
PFTeDA	100	11.6	95.3	4.3
PFBS	96.9	3.4	98.1	4.3
PFPeS	97.9	4.0	97.1	3.1
PFHxS	94.7	3.0	95.6	3.5
PFHpS	96.3	2.0	98.3	4.0
PFOS	86.1	2.3	89.8	4.3
PFNS	88.6	3.1	93.2	5.7
PFDS	105	2.6	103	2.9
PFDoS	59.1	25.0	122	27.5
4:2 FTS	92.0	3.3	93.3	3.9
6:2 FTS	92.4	3.3	92.1	0.3
8:2 FTS	98.5	4.3	103	1.7
PFOSA	92.0	3.9	96.3	2.1
HFPO-DA	95.2	1.9	97.2	3.5
ADONA	117	3.0	126	4.1
PFMPA	90.9	1.7	79.1	2.0
PFMBA	94.5	2.3	101	3.3
NFDHA	89.5	5.9	58.5	3.5
9Cl-PF3ONS	98.9	7.5	111	5.3
11Cl-PF3OUdS	70.7	13.6	98.3	12.1
PFEEESA	63.6	9.4	87.1	3.3
PFUnS	97.9	9.8	100	4.9
PFTTrS	90.6	5.9	101	1.7

註：配製查核樣品與添加樣品濃度為 0.020 µg/L，取 250 mL 飲用水樣品，濃縮 250 倍。

表八 固相萃取法(方式一)查核及添加樣品分析之精密度與準確度(續)

待測物	查核樣品回收率 (n=3)		添加樣品回收率 (n=3)	
	平均 (%)	標準偏差 (%)	平均 (%)	標準偏差 (%)
PFBA	94.3	1.7	101	5.2
PFPeA	92.0	0.7	94.9	2.4
PFHxA	91.2	3.0	93.9	6.5
PFHpA	88.1	1.1	89.3	4.6
PFOA	88.2	2.8	95.8	5.4
PFNA	90.8	3.0	91.7	4.0
PFDA	86.0	3.6	92.9	7.5
PFUnA	101	2.8	89.6	6.7
PFDoA	97.8	2.0	100	5.1
PFTTrDA	84.6	12.6	81.6	6.4
PFTeDA	103	7.3	98.3	3.4
PFBS	89.6	4.6	95.4	8.2
PFPeS	91.7	2.0	88.4	4.0
PFHxS	90.5	3.0	87.5	9.4
PFHpS	92.3	2.1	92.9	2.8
PFOS	86.7	10.7	92.3	1.2
PFNS	86.8	2.4	89.7	2.8
PFDS	90.8	2.3	96.8	3.4
PFDoS	91.5	21.0	55.7	12.7
4:2 FTS	88.7	3.1	90.3	2.7
6:2 FTS	86.2	10.9	88.7	2.4
8:2 FTS	88.8	8.8	95.3	4.2
PFOSA	85.3	0.7	91.5	2.9
HFPO-DA	91.2	6.3	93.8	5.8
ADONA	112	2.4	112	4.8
PFMPA	85.2	0.6	65.6	1.3
PFMBA	92.9	1.7	101	2.4
NFDHA	86.9	4.4	45.8	3.0
9Cl-PF3ONS	101.2	2.5	137	4.7
11Cl-PF3OUdS	91.8	3.6	128	5.6
PFEEA	70.5	3.8	109	4.6
PFUnS	87.3	1.2	90.3	3.1
PFTTrS	87.3	6.7	95.5	11.0

註：配製查核樣品與添加樣品濃度為 0.020 µg/L，取 250 mL 湖水樣品，濃縮 250 倍。

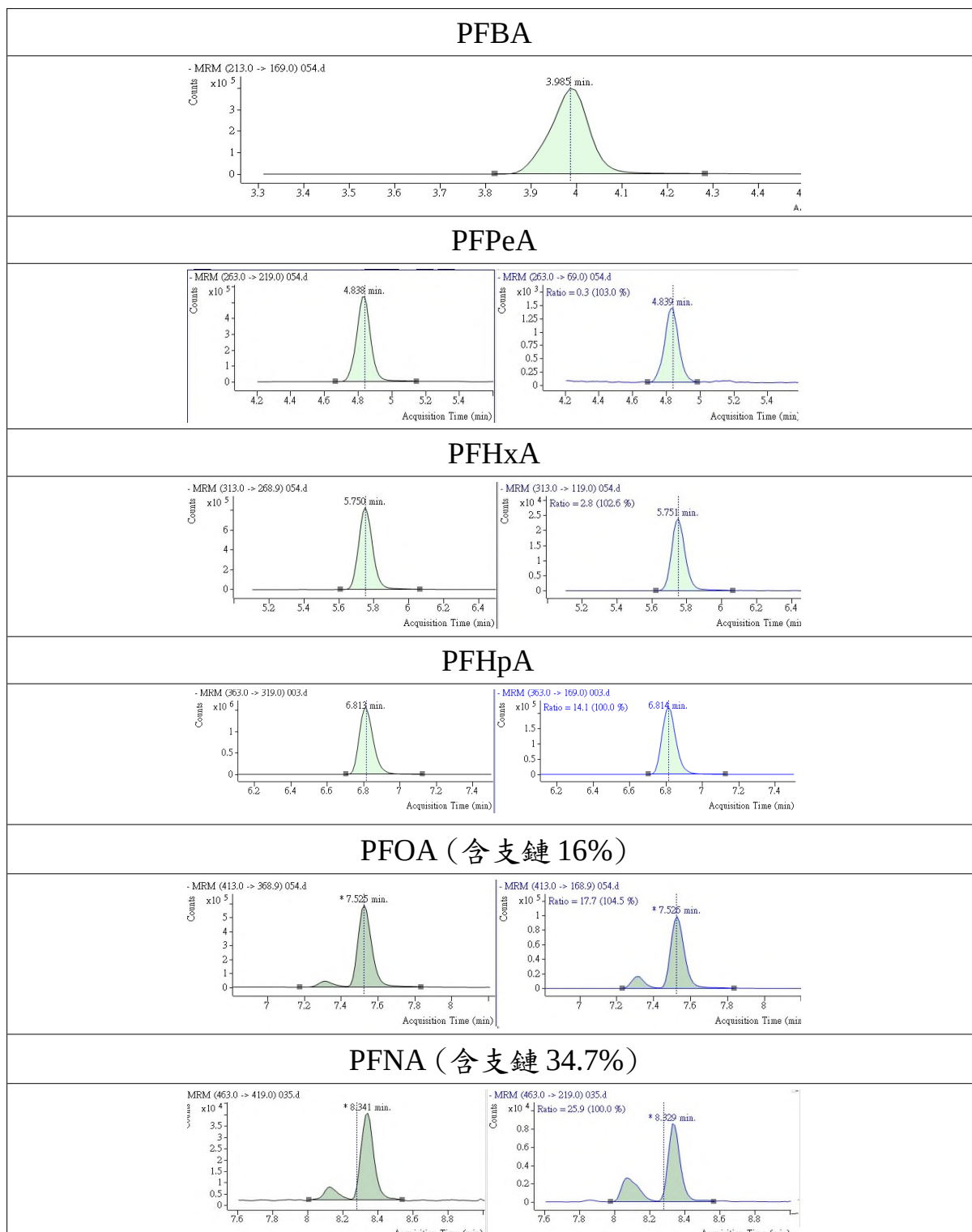
表九 參考之方法偵測極限(固相萃取法與直接注入法)

待測物	固相萃取法方式二 ^{註2} MDL (ng/L)	固相萃取法方式一 ^{註3} MDL (ng/L)	直接注入法 MDL (ng/L)
PFBA	0.329	2.48	0.466
PFPeA	0.399	1.18	0.206
PFHxA	0.229	1.06	0.103
PFHpA	0.242	1.01	0.164
PFOA	0.600	1.87	0.590
PFNA	0.203	1.04	0.193
PFDA	0.276	1.03	0.296
PFUnA	0.248	1.10	0.401
PFDoA	0.375	0.853	0.414
PFTTrDA	0.444	0.991	0.667
PFTeDA	0.570	0.982	0.586
PFBS	0.194	1.05	0.071
PFPeS	0.383	*	*
PFHxS	0.221	1.04	0.162
PFHpS	0.153	0.914	0.110
PFOS	0.255	2.10	0.127
PFNS	0.321	*	*
PFDS	0.361	0.993	0.217
PFDoS	1.45	*	*
4:2 FTS	0.195	*	*
6:2 FTS	0.277	1.05	0.237
8:2 FTS	0.228	0.962	0.351
PFOSA	0.258	0.917	0.381
HFPO-DA	0.264	*	*
ADONA	0.263	*	*
PFMPA	0.211	*	*
PFMBA	0.221	*	*
NFDHA	0.941	*	*
9Cl-PF3ONS	0.584	*	*
11Cl-PF3OUdS	0.640	*	*
PFEEA	0.157	*	*
PFUnS	0.510	*	*
PFTTrS	1.15	*	*

註1：方法偵測極限：依據「環境檢驗方法偵測極限測定指引(NIEA-PA107)」製作。

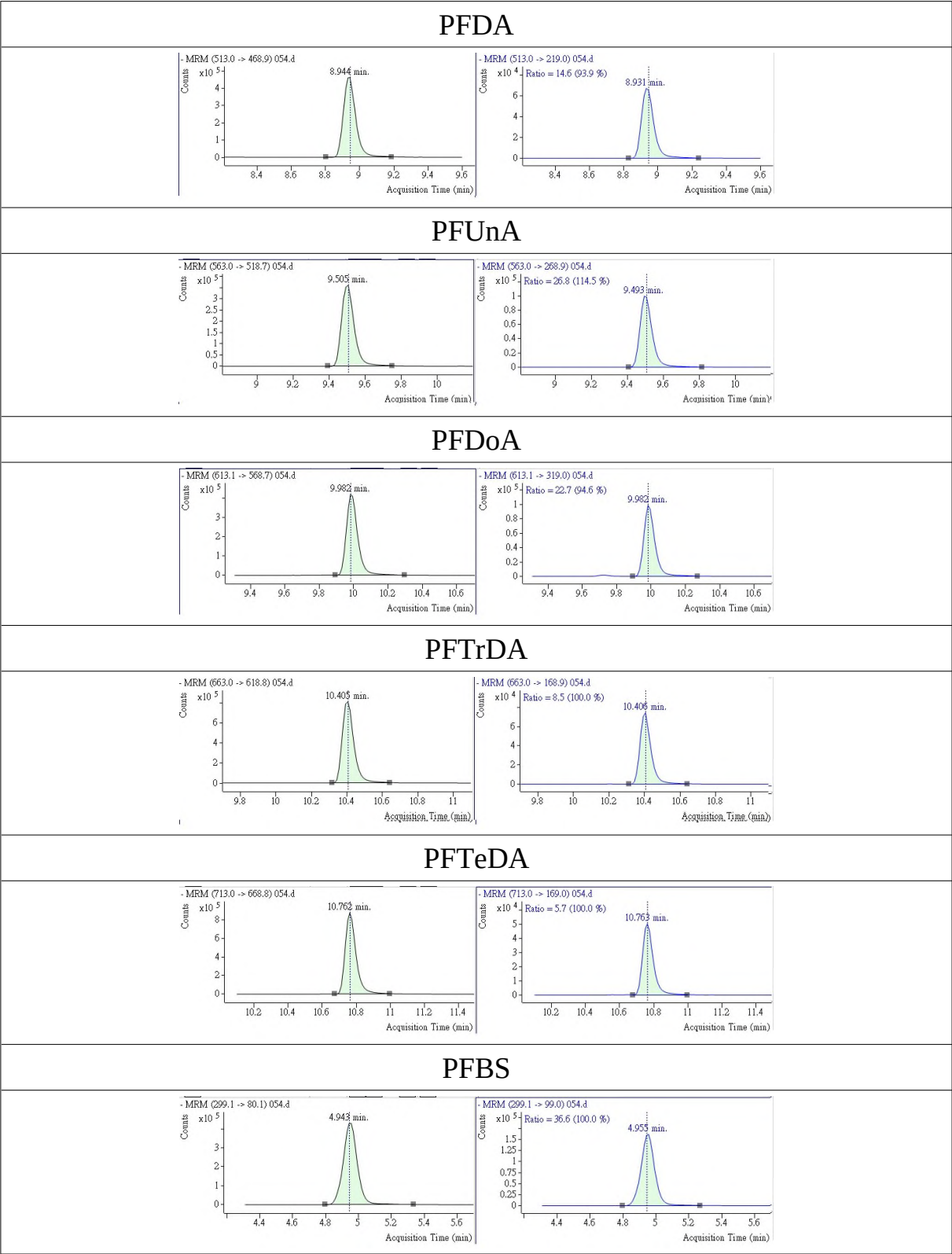
註2：固相萃取法方式二，樣品體積 250 mL，濃縮 125 倍。

註3：固相萃取法方式一，樣品體積 10 mL，濃縮 10 倍。

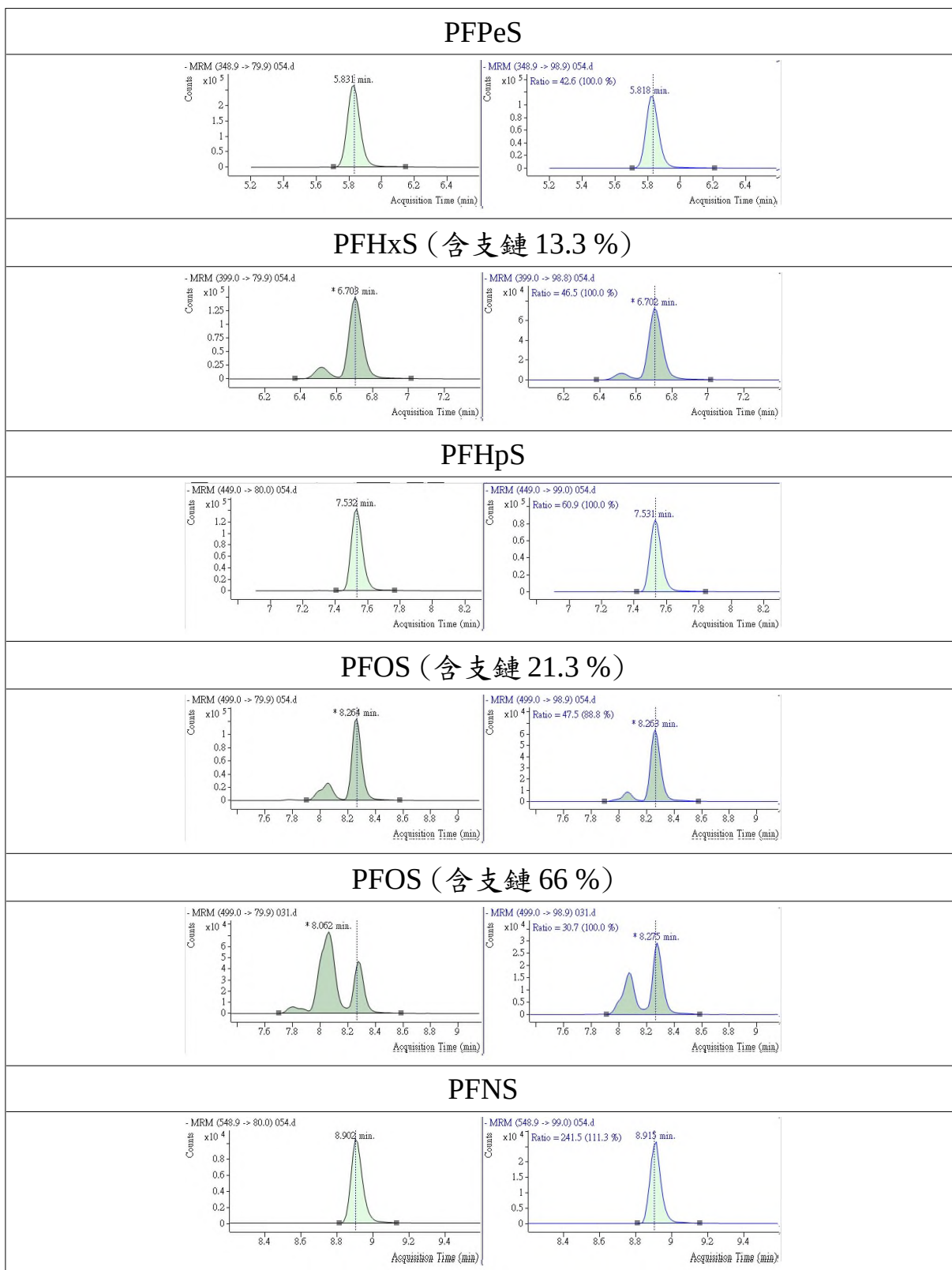


附圖 待測物及內標準品多重反應監測模式(MRM)前驅物/產物離子對之層析圖

註：不同來源的標準品或真實樣品，同分異構物的比例和附圖所列的比例可能並不相同。

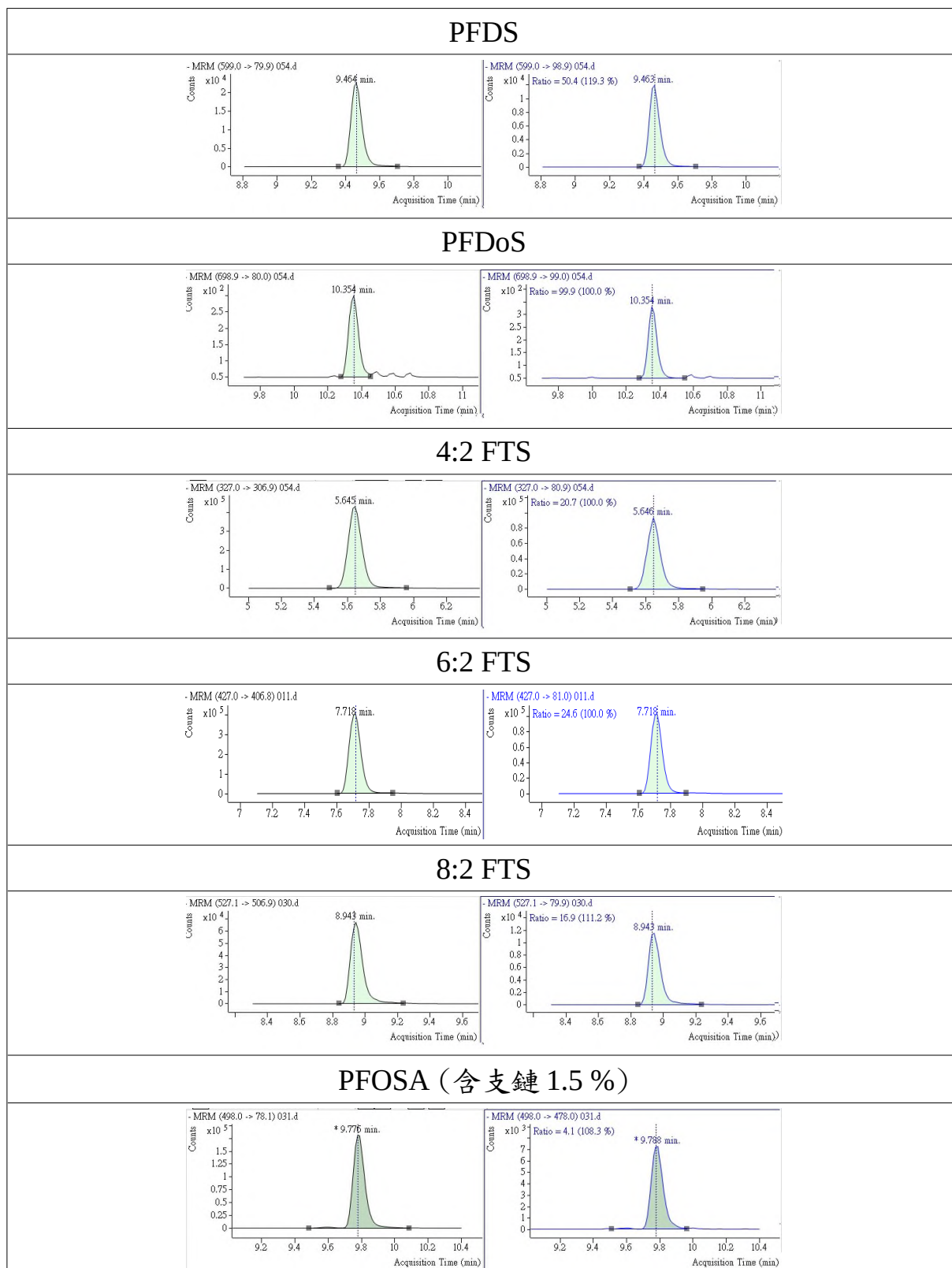


附圖 待測物及內標準品多重反應監測模式(MRM)前驅物/產物離子對之層析圖(續)



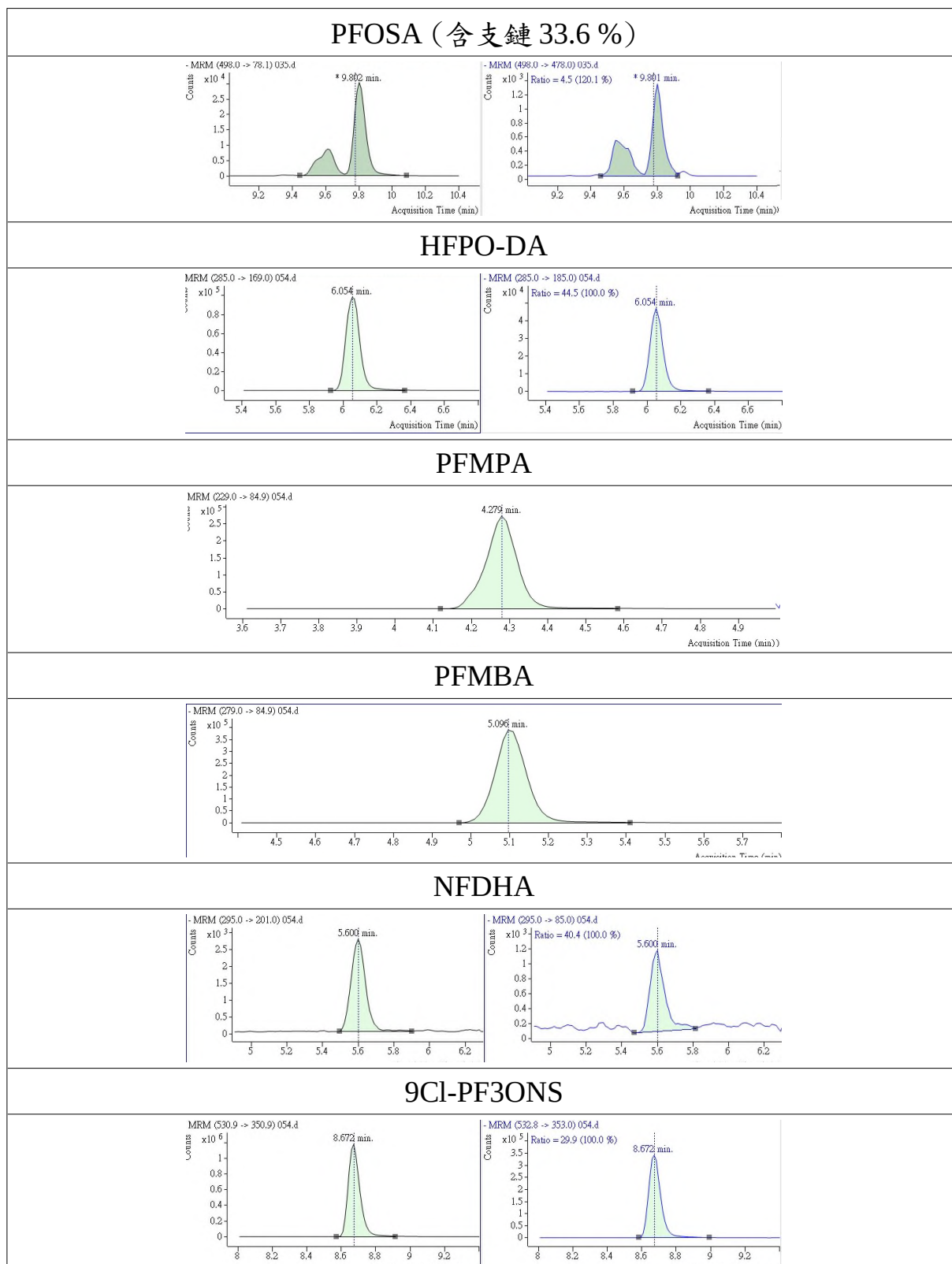
附圖 待測物及內標準品多重反應監測模式(MRM)前驅物/產物離子對之層析圖

註：不同來源的標準品或真實樣品，同分異構物的比例和附圖所列的比例可能並不相同。



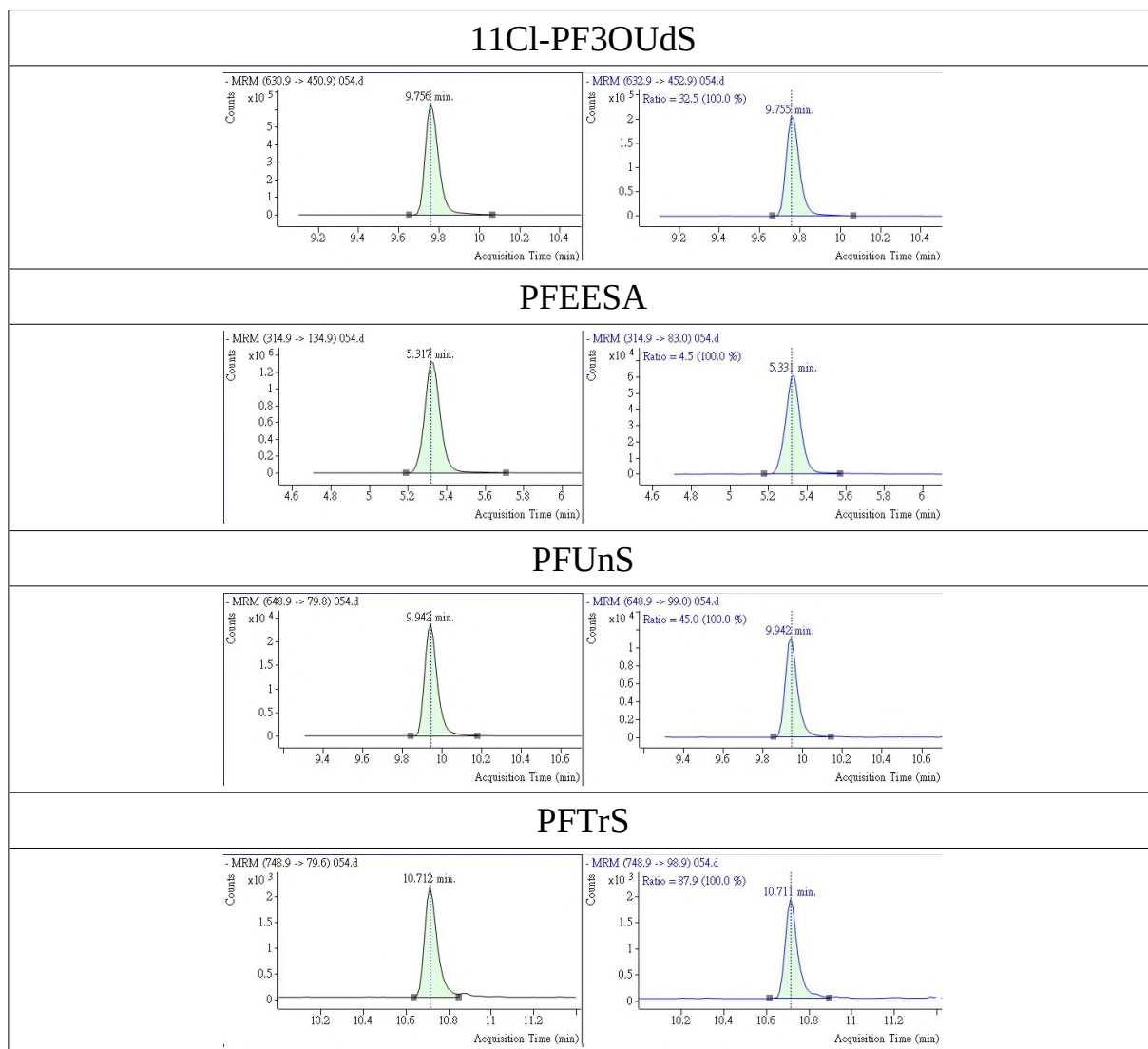
附圖 待測物及內標準品多重反應監測模式(MRM)前驅物/產物離子對之層析圖

註：不同來源的標準品或真實樣品，同分異構物的比例和附圖所列的比例可能並不相同。



附圖 待測物及內標準品多重反應監測模式(MRM)前驅物/產物離子對之層析圖

註：不同來源的標準品或真實樣品，同分異構物的比例和附圖所列的比例可能並不相同。



附圖 待測物及內標準品多重反應監測模式(MRM)前驅物/產物離子對之層析圖(續)