

# 毒性及關注化學物質中有機化合物檢測方法—氣相層析質譜儀法

中華民國 112 年 9 月 21 日環部授研字第 1125100802 號

自中華民國 113 年 1 月 15 日生效

NIEA T706.25B

## 一、方法概要

本方法係樣品經「毒性及關注化學物質中有機化合物檢測方法—樣品製備法(NIEA T704.2)」(註 1)製備後的樣品溶液，以氣相層析質譜儀(Gas chromatograph mass spectrometer, GC/MS)檢測有機化合物成分。

## 二、適用範圍

本方法適用於毒性及關注化學物質、毒性有害事業廢棄物樣品中所含有機化合物之檢測，可檢測之有機化合物如表一所列，其他未在表列中的毒性及關注化學物質及毒性有害事業廢棄物(註 2)經驗證，亦可適用本方法。

## 三、干擾

- (一) 處理分析數據時，必須對空白樣品、真實樣品及重複樣品分析所得之原始數據仔細評估，確認樣品在前處理過程中，並未遭到污染，若發現可能有污染的情況，必須採取修正措施以解決污染問題。
- (二) 當分析高濃度樣品後緊接著分析低濃度樣品，可能會發生高濃度樣品殘留情形，可用不含待測物之有機溶劑注入儀器系統，進行確認。

## 四、設備與材料

- (一) 氦氣(He)：純度為 99.999 % 以上。
- (二) 氣相層析質譜儀系統
  - 1. 氣相層析儀：具升溫程式系統及進樣分流裝置
  - 2. 層析管柱(可視實際需要適當調整)：
    - (1) DB-5 MS，30 m (長) × 0.25 mm (內徑)，膜厚 1 μm 的毛細管柱或同級品。
    - (2) DB-17 HT，30 m (長) × 0.25 mm (內徑)，膜厚 0.15 μm 的毛細管柱或同級品。
  - 3. 質譜儀：具每秒掃描 35 amu 至 450 amu 及使用 70 eV 電子游離方式的質譜偵測器。

4. 數據處理：應有檢測數據處理及定量的軟體，並附有美國國家標準技術研究所(National Institute of Standards and Technology, NIST)的圖譜資料庫或類似資料庫用以比對。

(三) 微量注射針。

(四) 量瓶：10 mL，具磨砂口瓶塞。

(五) 分析天平：可精稱至 0.1 mg。

## 五、試劑

(一) 儲備標準溶液：分別稱取約 50 mg（精確稱至 0.1 mg）之標準品（需具有濃度確認報告書），置於 10 mL 之量瓶，分別以適當溶劑溶解後，稀釋至刻度，其濃度約為 5,000 mg/L，或使用經濃度確認之標準溶液，此溶液應保存於附鐵氟龍墊片螺旋蓋棕色瓶中，儲存於約 -10 °C 以下。

(二) 內標準溶液：購買或配製內標準溶液（可選用表二所列內標準溶液或其他內標準溶液），其濃度約在 2,000 mg/L 至 4,000 mg/L 之間。在標準品、真實樣品、空白樣品及品管樣品的製備溶液中，添加適量的內標準品，使內標準品的注入量約為 40 ng，當使用不分流注射模式時，可降低及調整適當注入量，此溶液應保存於附鐵氟龍墊片螺旋蓋棕色瓶中，儲存於約 -10 °C 以下。

(三) 質譜儀校正標準溶液：配製 5 mg/L 至 50 mg/L 的十氟三苯化磷(Decafluorotriphenyl phosphine, DFTPP)溶液，使用較靈敏儀器則可降低濃度，此溶液應保存於附鐵氟龍墊片螺旋蓋棕色瓶中，儲存於約 -10 °C 以下。

(四) 檢量線標準溶液：以儲備標準溶液，混合置於量瓶中，以適當溶劑配製至少 5 種不同濃度之標準溶液，並添加適量內標準溶液；本方法檢量線濃度範圍為注入量 10 ng 至 250 ng 之間（依儀器感度可適當調整），此溶液應保存於附鐵氟龍墊片螺旋蓋棕色瓶中，儲存於約 -10 °C 以下。

## 六、採樣與保存

略

## 七、步驟

(一) 氣相層析質譜儀條件如下，可視實際需要適當調整：

烘箱升溫程式：35 °C 維持 4 分鐘，再以每分鐘 15 °C 升溫至 310 °C 維持 10 分鐘。

注射口溫度：280 °C

傳輸管溫度：300 °C

載流氣體及流速：氮氣，每分鐘 1 mL

分流比率：1：10

分流時間：注射 0.6 分鐘後開始分流

進樣量：以自動進樣器抽取 1 µL 樣品分析

離子化方式：70 eV 電子游離法

掃描速率：大於 1 次／秒

## (二) 績效測試及檢量線製備

1. DFTPP 績效測試：以氣相層析質譜儀進行分析前，應先分析 50 ng 或更小量之 DFTPP，確定其質譜能符合表三 DFTPP 質量強度規範之要求。
2. 檢量線製備：配製至少 5 種不同濃度之檢量線標準溶液，可添加固定量之內標準品，注入氣相層析質譜儀進行分析，建立檢量線可採用感應因子 (Response factor, RF)、校正因子 (Calibration factor, CF) 或線性迴歸校正法。
  - (1) 感應因子法：參考表二選擇各待測化合物對應之內標準品，並依照表四所列化合物之定量離子，以下列公式計算各待測物在五種不同濃度中的感應因子 (Response factor, RF)。

$$RF = \frac{A_x \times C_{is}}{A_{is} \times C_x}$$

其中

$A_x$ ：檢量線溶液中待測物之波峰面積

$A_{is}$ ：檢量線溶液中內標準品之波峰面積

$C_x$ ：檢量線溶液中待測物之濃度(µg/mL)

$C_{is}$ ：檢量線溶液中內標準品之濃度(µg/mL)

由上述求得之 RF 再算出每一化合物的平均感應因子 ( $\overline{RF}$ )、RF 值標準偏差(SD)及相對標準偏差(RSD %)，其計算如下：

$$\overline{RF} = \frac{\sum_{i=1}^n RF_i}{n}$$

$$SD = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (RF_i - \overline{RF})^2}{n-1}}$$

$$RSD \% = \frac{SD}{\overline{RF}} \times 100 \%$$

(2) 校正因子法：

$$CF = \frac{A_x}{W_x}$$

其中

$A_x$ ：檢量線溶液中待測物之波峰面積

$W_x$ ：檢量線溶液注入儀器之待測物重量(ng)

平均校正因子公式為

$$\overline{CF} = \frac{\sum_{i=1}^n CF_i}{n}$$

由上述求得之 CF 及  $\overline{CF}$  再算出每一待測物的校正因子標準偏差(SD)及相對標準偏差(RSD %)，計算如下：

$$SD = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (CF_i - \overline{CF})^2}{n-1}}$$

$$\text{RSD \%} = \frac{\text{SD}}{\text{CF}} \times 100 \%$$

(3) 線性迴歸校正法：

$$y = ac + b$$

其中

y：訊號面積

a：斜率

c：濃度

b：截距

3. 感應因子或校正因子之 RSD % 必須  $\leq 20 \%$ ，線性迴歸校正法之線性相關係數(r)應大於或等於 0.995。如果無法達到上述需求，則應檢查氣相層析質譜儀，找出問題來源，作適當修正後，重新建立檢量線，直到符合要求為止。
4. 檢量線確認：檢量線製備完成，須以第二來源標準品配製接近檢量線中點濃度之標準溶液或另行配製之標準溶液進行確認，其分析結果相對誤差值應在  $\pm 20 \%$  以內。

### (三) 樣品分析 (註 3)

1. 量取依「毒性及關注化學物質中有機化合物檢測方法—樣品製備法」製備後的樣品溶液，加入適量內標準溶液使樣品和檢量線標準品中內標準品濃度相同。
2. 使用與檢量線建立時相同的儀器條件來分析樣品，建議由大稀釋倍數樣品先分析。
3. 以上敘述的方法來定性及計算待測物的濃度，如果樣品製備溶液中待測物濃度超出檢量線範圍，則必須將樣品稀釋，通常樣品中待測物之濃度應於檢量線最高濃度之 20 % 至 80 % 間之濃度為適當。
4. 若樣品中含干擾物，致使化合物無法以原設定之定量離子定量時，應以其他感度較強且不受干擾之次要離子重新計算其感應

因子，再加以定量；若樣品所含物質嚴重干擾分析，造成待測物無法定性與定量時，則樣品需經適當淨化步驟以去除干擾物，再重新分析。

## 八、結果處理

### (一) 定性分析

樣品中待測物的認定可經由比較其相對滯留時間和質譜後確認。標準質譜可從 NIST 質譜資料庫或檢量線標準品的分析取得，以作為樣品定性的依據。樣品中待測物確認方式參考如下：

1. 待測物與標準品的相對滯留時間(Relative retention time, RRT)的差異須在  $\pm 0.06$  RRT 內或  $\pm 0.03$  分鐘滯留時窗(Retention time windows)之內，滯留時間則應以 12 小時內和樣品分析同一批次的檢量線查核分析為基準來比較。相對滯留時間的計算方式如下：

$$RRT = \frac{RT_x}{RT_{is}}$$

其中

$RT_x$ ：待測物滯留時間

$RT_{is}$ ：相對應內標準品滯留時間

2. 比較特性離子時質譜圖應符合下列要求：
  - (1) 待測物在標準質譜中相對強度大於 10 % 的離子存在於樣品的質譜。
  - (2) 表四為待測化合物之主要定量離子與次要離子中各特性離子的相對強度，其與參考質譜之相對強度建議應符合表五相對離子強度之容許誤差之規範。
  - (3) 參考圖譜可取自此氣相層析質譜所分析之標準品或參考資料庫。
3. 樣品中待測物以添加標準品方式進行定性確認。

### (二) 定量分析

1. 當待測物定性確認後，該化合物必須根據其定量離子層析圖，以內標準品校正法進行定量（註 4）。
2. 採用感應因子：

待測物濃度計算公式

$$C(\mu\text{g/mL}) = \frac{A_s \times C_{is}}{A_{is} \times \overline{RF}}$$

其中

$A_s$ ：待測物之定量離子波峰面積

$C_{is}$ ：注入內標準品濃度( $\mu\text{g/mL}$ )

$A_{is}$ ：內標品的定量離子波峰面積

$\overline{RF}$ ：待測物的平均感應因子

3. 採用校正因子：

$$C(\mu\text{g/mL}) = \frac{A}{V_i \times \overline{CF}}$$

其中

$A$ ：樣品中待測物之波峰面積

$V_i$ ：注入儀器之萃取液體積( $\mu\text{L}$ )

$\overline{CF}$ ：平均校正因子（面積/ng）

4. 採用線性迴歸校正法：

待測物濃度計算公式

$$c = \frac{y - b}{a}$$

其中

$c$ ：待測物濃度

$y$ ：待測物波峰面積

$b$ ：截距

$a$ ：斜率

5. 計算樣品中每一個待測物濃度如下：

$$\text{待測物}(\%, w/w) = \frac{C \times V \times D_f}{W} \times 10^{-6} \times 100\%$$

其中

C：待測物之濃度( $\mu\text{g/mL}$ )

V：樣品定容體積( $\text{mL}$ )

$D_f$ ：稀釋倍數

W：樣品取樣量( $\text{g}$ )

## 九、品質管制

- (一) 檢量線查核：每批次或每 12 小時須執行檢量線查核，所測得濃度之相對誤差值應在  $\pm 20\%$  以內。
- (二) 空白樣品分析：每批次（當該批樣品少於 20 個時）或每 20 個樣品至少執行 1 個空白樣品分析，應小於檢量線最低點濃度之 1/10。
- (三) 重複樣品分析：每批樣品（至多 20 個樣品）分析時，須執行一個重複樣品分析。（註 5）

## 十、精密度與準確度

單一實驗室以 28 種不同濃度毒性化學物質樣品，測試所得的準確性及精密度結果如表六。

## 十一、參考資料

- (一) 行政院環境保護署，研訂毒性化學物質中有機物質前處理方法及有機物質檢測方法，EPA-95-1401-02-02，中華民國 95 年。
- (二) 行政院環境保護署，研訂毒性化學物質中有機物質前處理方法及有機物質檢測方法（第二年），EPA-96-1401-02-01，中華民國 96 年。
- (三) 行政院環境保護署，特殊性毒性化學物質中及環境用藥禁止含有之成分檢測技術建立，EPA-100-1604-02-02，中華民國 101 年。
- (四) 行政院環境保護署，事業廢棄物檢測方法總則 NIEA R101.03C，中華民國 110 年。

- (五) U.S. EPA, Semivolatile Organic Compounds by Gas Chromatography/Mass Spectrometry (GC/MS): Capillary Column Technique. Method 8270E, 2018.
- (六) Mingjiang S.; Lin B.; David Q. L. A generic approach for the determination of trace hydrazine in drug substances using in situ derivatization-headspace GC-MS, Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis. 2009, 49, 529-533.

註1：本文引用之公告方法名稱及編碼，以環境部最新公告者為準。

註2：本方法所稱之「毒性及關注化學物質」或「毒性有害事業廢棄物」，係環保法規所定義之專有名詞。

註3：本方法所產生之廢液均為有機溶劑，請依各實驗室之規定處理。

註4：本方法必要時可選擇外標準法定量待測物濃度，其各項品值管制規範均與內標準法一致。

註5：其他溶出程序萃出液樣品於符合前述品質管制時，亦可參考適用。

表一 方法適用之有機化合物

| 列管編號   | CAS No.    | 中文名稱              | 英文名稱                                           | 適用管柱<br>(參考) |
|--------|------------|-------------------|------------------------------------------------|--------------|
| 001-01 | 1336-36-3  | 多氯聯苯              | Polychlorinated biphenyls                      | DB5-MS       |
| 002-01 | 57-74-9    | 可氯丹               | Chlordane                                      | DB5-MS       |
| 004-01 | 60-57-1    | 地特靈               | Dieldrin                                       | DB5-MS       |
| 005-01 | 50-29-3    | 滴滴涕               | 4,4-Dichlorodiphenyl-<br>trichloroethane (DDT) | DB5-MS       |
| 006-01 | 8001-35-2  | 毒殺芬               | Toxaphene                                      | DB5-MS       |
| 007-01 | 87-86-5    | 五氯酚               | Pentachlorophenol                              | DB5-MS       |
| 008-01 | 131-52-2   | 五氯酚鈉 <sup>a</sup> | Sodium pentachlorophenate                      | DB5-MS       |
| 010-01 | 72-20-8    | 安特靈               | Endrin                                         | DB5-MS       |
| 011-01 | 76-44-8    | 飛佈達               | Heptachlor                                     | DB5-MS       |
| 012-01 | 319-84-6   | 蟲必死               | Hexachlorocyclohexane                          | DB5-MS       |
| 013-01 | 309-00-2   | 阿特靈               | Aldrin                                         | DB5-MS       |
| 014-01 | 96-12-8    | 二溴氯丙烷             | 1,2-Dibromo-3-<br>Chloropropane (DBCP)         | DB5-MS       |
| 015-01 | 21609-90-5 | 福賜松               | Leptophos                                      | DB5-MS       |
| 016-01 | 510-15-6   | 克氯苯               | Chlorobenzilate                                | DB5-MS       |
| 017-01 | 1836-75-5  | 護谷                | Nitrofen                                       | DB5-MS       |
| 019-01 | 58-89-9    | 靈丹                | Lindane ( $\gamma$ -BHC, or $\gamma$ -HCH)     | DB5-MS       |
| 023-01 | 82-68-8    | 五氯硝苯              | Pentachloronitrobenzene                        | DB5-MS       |
| 025-01 | 21725-46-2 | 氰乃淨               | Cyanazine                                      | DB5-MS       |
| 026-01 | 299-84-3   | 樂乃松               | Fenchlorphos                                   | DB5-MS       |
| 028-01 | 133-06-2   | 蓋普丹               | Captan                                         | DB5-MS       |
| 029-01 | 133-07-3   | 福爾培               | Folpet                                         | DB5-MS       |
| 032-01 | 542-88-1   | 二氯甲醚              | Bis-Chloromethyl ether                         | DB-624       |
| 033-01 | 92-93-3    | 對-硝基聯苯            | P-Nitrobiphenyl                                | DB5-MS       |
| 034-01 | 92-67-1    | 對-胺基聯苯            | P-Aminobiphenyl                                | DB5-MS       |
| 035-01 | 91-59-8    | 2-萘胺              | 2-Naphthylamine                                | DB5-MS       |
| 036-01 | 92-87-5    | 聯苯胺               | Benzidine                                      | DB5-MS       |
| 038-01 | 62-53-3    | 苯胺                | Aniline                                        | DB5-MS       |
| 039-01 | 95-53-4    | 鄰-甲苯胺             | o-Aminotoluene                                 | DB5-MS       |

表一 方法適用之有機化合物（續）

| 列管編號   | CAS No.  | 中文名稱            | 英文名稱                                       | 適用管柱<br>(參考) |
|--------|----------|-----------------|--------------------------------------------|--------------|
| 039-02 | 108-44-1 | 間-甲苯胺           | m-Aminotoluene                             | DB5-MS       |
| 039-03 | 106-49-0 | 對-甲苯胺           | p-Aminotoluene                             | DB5-MS       |
| 040-01 | 134-32-7 | 1-萘胺            | 1-Naphthylamine                            | DB5-MS       |
| 041-01 | 119-90-4 | 二甲氧基聯苯胺         | 3,3'-Dimethoxybenzidine                    | DB5-MS       |
| 042-01 | 91-94-1  | 二氯聯苯胺           | 3,3'-Dichlorobenzidine                     | DB5-MS       |
| 043-01 | 119-93-7 | 鄰-二甲基聯苯胺        | 3,3'-Dimethyl-[1,1'-biphenyl]-4,4'-diamine | DB5-MS       |
| 044-01 | 98-07-7  | 三氯甲苯            | Trichloromethyl benzene                    | DB5-MS       |
| 050-01 | 79-06-1  | 丙烯醯胺            | Acrylamide                                 | DB5-MS       |
| 051-01 | 107-13-1 | 丙烯腈             | Acrylonitrile                              | DB-624       |
| 052-01 | 71-43-2  | 苯               | Benzene                                    | DB-624       |
| 053-01 | 56-23-5  | 四氯化碳            | Carbon tetrachloride                       | DB-624       |
| 054-01 | 67-66-3  | 三氯甲烷            | Chloroform                                 | DB-624       |
| 056-01 | 88-06-2  | 2,4,6-三氯酚       | 2,4,6-Trichlorophenol                      | DB5-MS       |
| 056-02 | 95-95-4  | 2,4,5-三氯酚       | 2,4,5-Trichlorophenol                      | DB5-MS       |
| 057-01 | 107-30-2 | 氯甲基甲基醚          | Chloromethyl methyl ether                  | DB-624       |
| 058-01 | 118-74-1 | 六氯苯             | Hexachlorobenzene                          | DB5-MS       |
| 060-01 | 106-93-4 | 二溴乙烷（二溴乙烯）      | Ethylene dibromide                         | DB5-MS       |
| 061-01 | 75-21-8  | 環氧乙烷            | Ethylene oxide                             | DB-624       |
| 062-01 | 106-99-0 | 1,3-丁二烯         | 1,3-Butadiene                              | DB-624       |
| 063-01 | 127-18-4 | 四氯乙烯            | Tetrachloroethylene                        | DB-624       |
| 064-01 | 79-01-6  | 三氯乙烯            | Trichloroethylene                          | DB-624       |
| 065-01 | 75-01-4  | 氯乙烯             | Vinyl chloride                             | DB-624       |
| 066-01 | 50-00-0  | 甲醛              | Formaldehyde                               | DB-17HT      |
| 067-01 | 101-14-4 | 4,4'-亞甲雙（2-氯苯胺） | 4,4'-Methylenebis(2-chloroaniline)         | DB5-MS       |
| 068-01 | 117-81-7 | 鄰苯二甲酸二（2-乙基己基）酯 | Di(2-ethylhexyl) phthalate (DEHP)          | DB5-MS       |
| 068-02 | 117-84-0 | 鄰苯二甲酸二辛酯        | Di-n-octyl phthalate (DNOP)                | DB5-MS       |

表一 方法適用之有機化合物（續）

| 列管編號   | CAS No.                  | 中文名稱                            | 英文名稱                                                                            | 適用管柱<br>(參考) |
|--------|--------------------------|---------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------|--------------|
| 068-03 | 85-68-7                  | 鄰苯二甲酸丁基苯甲酯                      | Benzyl butyl phthalate (BBP)                                                    | DB5-MS       |
| 068-04 | 28553-12-0<br>68515-48-0 | 鄰苯二甲酸二異壬酯                       | Di-isononyl phthalate (DINP)                                                    | DB5-MS       |
| 068-05 | 26761-40-0<br>68515-49-1 | 鄰苯二甲酸二異癸酯                       | Di-isodecyl phthalate (DIDP)                                                    | DB5-MS       |
| 068-06 | 84-66-2                  | 鄰苯二甲酸二乙酯                        | Diethyl phthalate (DEP)                                                         | DB5-MS       |
| 068-07 | 68515-42-4               | 鄰苯二甲酸二烷基酯<br>(C7-11 支鏈及直鏈)      | 1,2-Benzenedicarboxylic acid, di-C7-11-branched and linear alkyl esters (DHNUP) | DB5-MS       |
| 068-08 | 71888-89-6               | 鄰苯二甲酸二烷基酯<br>(C6-8 支鏈及直鏈，富含 C7) | 1,2-Benzenedicarboxylic acid, di-C6-8-branched alkyl esters, C7-rich (DIHP)     | DB5-MS       |
| 068-09 | 131-16-8                 | 鄰苯二甲酸二丙酯                        | Di-n-propyl Phthalate (DPP)                                                     | DB5-MS       |
| 068-10 | 84-69-5                  | 鄰苯二甲酸二異丁酯                       | Di-iso-butyl Phthalate (DIBP)                                                   | DB5-MS       |
| 068-11 | 131-18-0                 | 鄰苯二甲酸二戊酯                        | Di-n-pentyl Phthalate (DNPP)                                                    | DB5-MS       |
| 068-12 | 84-75-3                  | 鄰苯二甲酸二己酯                        | Di-n-hexyl Phthalate (DNHP)                                                     | DB5-MS       |
| 068-13 | 84-61-7                  | 鄰苯二甲酸二環己酯                       | Dicyclohexyl Phthalate (DCHP)                                                   | DB5-MS       |
| 068-14 | 27554-26-3               | 鄰苯二甲酸二異辛酯                       | Di-iso-octyl Phthalate (DIOP)                                                   | DB5-MS       |
| 068-15 | 84-76-4                  | 鄰苯二甲酸二正壬酯                       | Di-n-nonyl phthalate (DNP)                                                      | DB5-MS       |
| 068-16 | 146-50-9                 | 鄰苯二甲酸二(4-甲基-2-戊基)酯              | Bis(4-methyl-2-pentyl) phthalate (BMPP)                                         | DB5-MS       |
| 068-17 | 117-82-8                 | 鄰苯二甲酸二甲氧乙酯                      | Bis(2-methoxyethyl) phthalate (BMEP)                                            | DB5-MS       |
| 068-18 | 605-54-9                 | 鄰苯二甲酸雙-2-乙氧基乙酯                  | Bis(2-ethoxyethyl) phthalate (BEEP)                                             | DB5-MS       |

表一 方法適用之有機化合物（續）

| 列管編號   | CAS No.                | 中文名稱                | 英文名稱                                                                 | 適用管柱<br>(參考) |
|--------|------------------------|---------------------|----------------------------------------------------------------------|--------------|
| 068-19 | 75673-16-4             | 鄰苯二甲酸己基-2-乙基<br>己基酯 | Hexyl 2-ethylhexyl<br>phthalate (HEHP)                               | DB5-MS       |
| 068-20 | 117-83-9               | 鄰苯二甲酸二丁氧基乙<br>酯     | Bis(2-n-butoxyethyl)<br>phthalate (BBEP)                             | DB5-MS       |
| 068-21 | 84-62-8                | 鄰苯二甲酸二苯酯            | Diphenyl phthalate (DPP)                                             | DB5-MS       |
| 068-22 | 523-31-9               | 鄰苯二甲酸二苄酯            | Dibenzyl phthalate (DBZP)                                            | DB5-MS       |
| 068-23 | 4376-20-9              | 鄰苯二甲酸單（2-乙基<br>己基）酯 | Mono(2-ethylhexyl)<br>phthalate (MEHP)                               | DB5-MS       |
| 068-24 | 131-70-4               | 鄰苯二甲酸單丁酯            | Mono-n-Butyl phthalate<br>(MNBP)                                     | DB5-MS       |
| 069-01 | 541-73-1               | 1,3-二氯苯             | 1,3-Dichlorobenzene                                                  | DB5-MS       |
| 069-02 | 95-50-1                | 鄰-二氯苯               | o-Dichlorobenzene<br>(1,2-Dichloro benzene)                          | DB5-MS       |
| 070-01 | 120-82-1               | 1,2,4-三氯苯           | 1,2,4-Trichlorobenzene                                               | DB5-MS       |
| 071-01 | 110-80-5               | 乙二醇乙醚               | 2-Ethoxyethanol<br>(Ethylene glycol monoethyl<br>ether)              | DB5-MS       |
| 071-02 | 109-86-4               | 乙二醇甲醚               | 2-Methoxyethanol<br>(Ethylene glycol monoethyl<br>ether)             | DB-624       |
| 072-01 | 106-89-8               | 環氧氯丙烷               | Epichlorohydrin (1-Chloro-<br>2,3-epoxypropane)                      | DB-624       |
| 073-01 | 85-44-9                | 鄰苯二甲酐               | Phthalic anhydride                                                   | DB5-MS       |
| 074-01 | 26471-62-5<br>584-84-9 | 二異氰酸甲苯              | Toluene diisocyanate<br>(mixed isomers) Toluene-<br>2,4-diisocyanate | DB5-MS       |
| 075-01 | 107-06-2               | 1,2-二氯乙烷            | 1,2-Dichloroethane<br>(Ethylene dichloride)                          | DB5-MS       |
| 076-01 | 79-34-5                | 1,1,2,2-四氯乙烷        | 1,1,2,2-Tetrachloroethane                                            | DB5-MS       |
| 077-01 | 540-59-0               | 1,2-二氯乙烯            | 1,2-Dichloroethylene                                                 | DB-624       |

表一 方法適用之有機化合物（續）

| 列管編號   | CAS No.                 | 中文名稱                   | 英文名稱                                                       | 適用管柱<br>(參考) |
|--------|-------------------------|------------------------|------------------------------------------------------------|--------------|
| 077-02 | 75-35-4                 | 1,1-二氯乙烯               | 1,1-Dichloroethylene                                       | DB-624       |
| 078-01 | 74-87-3                 | 氯甲烷                    | Chloromethane<br>(Methyl chloride)                         | DB-624       |
| 079-01 | 75-09-2                 | 二氯甲烷                   | Dichloromethane<br>(Methylenechloride)                     | DB-624       |
| 080-01 | 131-11-3                | 鄰苯二甲酸二甲酯               | Dimethyl phthalate                                         | DB5-MS       |
| 080-02 | 84-74-2                 | 鄰苯二甲酸二丁酯               | Dibutyl phthalate                                          | DB5-MS       |
| 081-01 | 98-82-8                 | 異丙苯                    | Cumene                                                     | DB5-MS       |
| 082-01 | 110-82-7                | 環己烷                    | Cyclohexane                                                | DB5-MS       |
| 083-01 | 79-11-8                 | 氯乙酸 <sup>b</sup>       | Chloroacetic acid                                          | DB17-HT      |
| 084-01 | 541-41-3                | 氯甲酸乙酯                  | Ethyl chloroformate                                        | DB5-MS       |
| 085-01 | 51-28-5                 | 2,4-二硝基酚               | 2,4-Dinitrophenol                                          | DB5-MS       |
| 086-01 | 77-78-1                 | 硫酸二甲酯                  | Dimethyl sulfate                                           | DB5-MS       |
| 088-01 | 108-60-1                | 二氯異丙醚                  | Bis(2-chloro-1-methylethyl)<br>ether                       | DB5-MS       |
| 089-01 | 75-15-0                 | 二硫化碳                   | Carbon disulfide                                           | DB-624       |
| 090-01 | 108-90-7                | 氯苯                     | Chlorobenzene                                              | DB5-MS       |
| 091-01 | 1163-19-5               | 十溴二苯醚                  | Decabromobiphenyl ether                                    | DB-5HT       |
| 091-02 | 32536-52-0              | 八溴二苯醚                  | Octabromodiphenyl ether                                    | DB-5HT       |
| 091-03 | 32534-81-9              | 五溴二苯醚                  | Pentabromodiphenyl ether                                   | DB-5HT       |
| 091-04 | 40088-47-9<br>5436-43-1 | 四溴二苯醚                  | Tetrabromodiphenyl ether<br>(BDE-47)                       | DB-5HT       |
| 091-05 | 68631-49-2              | 2,2',4,4',5,5'-六溴二苯醚   | 2,2',4,4',5,5'-<br>hexabromodiphenyl ether<br>(BDE-153)    | DB-5HT       |
| 091-06 | 207122-15-4             | 2,2',4,4',5,6'-六溴二苯醚   | 2,2',4,4',5,6'-<br>hexabromodiphenyl ether<br>(BDE-154)    | DB-5HT       |
| 091-07 | 446255-22-7             | 2,2',3,3',4,5',6-七溴二苯醚 | 2,2',3,3',4,5',6-<br>heptabromodiphenyl ether<br>(BDE-175) | DB-5HT       |

表一 方法適用之有機化合物（續）

| 列管編號   | CAS No.     | 中文名稱                   | 英文名稱                                                | 適用管柱<br>(參考) |
|--------|-------------|------------------------|-----------------------------------------------------|--------------|
| 091-08 | 207122-16-5 | 2,2',3,4,4',5',6-七溴二苯醚 | 2,2',3,4,4',5',6-heptabromodiphenyl ether (BDE-183) | DB-5HT       |
| 092-01 | 132-64-9    | 二苯駢呋喃                  | Dibenzofuran                                        | DB5-MS       |
| 093-01 | 123-91-1    | 1,4-二氧陸園               | 1,4-Dioxane                                         | DB-624       |
| 094-01 | 1825-31-6   | 二氯萘                    | Dichloronaphthalene                                 | DB5-MS       |
| 094-02 | 1321-65-9   | 三氯萘                    | Trichloronaphthalene                                | DB5-MS       |
| 094-03 | 1335-88-2   | 四氯萘                    | Tetrachloronaphthalene                              | DB5-MS       |
| 094-04 | 1321-64-8   | 五氯萘                    | Pentachloronaphthalene                              | DB5-MS       |
| 094-05 | 1335-87-1   | 六氯萘                    | Hexachloronaphthalene                               | DB5-MS       |
| 094-06 | 32241-08-0  | 七氯萘                    | Heptachloronaphthalene                              | DB5-MS       |
| 094-07 | 2234-13-1   | 八氯萘                    | Octachloronaphthalene                               | DB5-MS       |
| 095-01 | 74-88-4     | 碘甲烷                    | Methyl iodide                                       | DB-624       |
| 096-01 | 57-57-8     | $\beta$ -丙內酯           | $\beta$ -Propiolactone                              | DB17-HT      |
| 097-01 | 110-86-1    | 吡啶 <sup>b</sup>        | Pyridine                                            | DB5-MS       |
| 098-01 | 68-12-2     | 二甲基甲醯胺                 | N,N-Dimethyl formamide                              | DB5-MS       |
| 100-01 | 107-02-8    | 丙烯醛                    | Acrolein                                            | DB-624       |
| 101-01 | 107-18-6    | 丙烯醇                    | Allyl alcohol                                       | DB-624       |
| 102-01 | 122-66-7    | 1,2-二苯基聯胺              | 1,2-Diphenylhydrazine                               | DB5-MS       |
| 104-01 | 75-07-0     | 乙醛                     | Acetaldehyde                                        | DB-17HT      |
| 105-01 | 75-05-8     | 乙腈                     | Acetonitrile                                        | DB-624       |
| 106-01 | 100-44-7    | 苯甲氯                    | Benzyl chloride                                     | DB5-MS       |
| 107-01 | 141-32-2    | 丙烯酸丁酯                  | Butyl acrylate                                      | DB5-MS       |
| 108-01 | 123-72-8    | 丁醛                     | Butyraldehyde                                       | DB-17HT      |
| 110-01 | 115-28-6    | 六氯內-甲烯基-四氫苯二甲酸         | Chlorendic acid                                     | DB5-MS       |
| 111-01 | 126-99-8    | 氯丁二烯                   | Chloroprene                                         | DB-624       |
| 112-01 | 108-39-4    | 間-甲酚                   | m-Cresol                                            | DB5-MS       |
| 113-01 | 542-75-6    | 1,3-二氯丙烯               | 1,3-Dichloropropene                                 | DB5-MS       |
| 114-01 | 111-42-2    | 二乙醇胺                   | Diethanolamine                                      | DB17-HT      |

表一 方法適用之有機化合物（續）

| 列管編號   | CAS No.   | 中文名稱                                       | 英文名稱                                                                               | 適用管柱<br>(參考) |
|--------|-----------|--------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------|--------------|
| 115-01 | 122-39-4  | 二苯胺                                        | Diphenylamine                                                                      | DB5-MS       |
| 116-01 | 100-41-4  | 乙苯                                         | Ethylbenzene                                                                       | DB5-MS       |
| 117-01 | 108-10-1  | 甲基異丁酮                                      | Methyl isobutyl ketone                                                             | DB-624       |
| 118-01 | 101-77-9  | 4,4'-二胺基二苯甲烷                               | 4,4'-Methylenedianiline                                                            | DB5-MS       |
| 120-01 | 1120-71-4 | 1,3-丙烷磺內酯                                  | Propane sultone                                                                    | DB5-MS       |
| 121-01 | 121-44-8  | 三乙胺 <sup>b,c</sup>                         | Triethylamine                                                                      | DB17-HT      |
| 122-01 | 532-27-4  | $\alpha$ -苯氯乙酮 (w-苯氯乙酮)                    | $\alpha$ -Chloroacetophenone<br>(w-Chloroacetophenone)                             | DB17-HT      |
| 123-01 | 120-12-7  | 蒽                                          | Anthracene                                                                         | DB5-MS       |
| 124-01 | 74-95-3   | 二溴甲烷                                       | Dibromomethane<br>(Methylenebromide)                                               | DB-624       |
| 125-01 | 75-25-2   | 三溴甲烷 (溴仿)                                  | Bromoform<br>(Tribromomethane)                                                     | DB5-MS       |
| 126-01 | 75-00-3   | 氯乙烷                                        | Chloroethane<br>(Ethyl chloride)                                                   | DB-624       |
| 128-01 | 70-30-4   | 六氯芬<br>(2,2'-二羥-3,3',5,5',6,6'-<br>六氯二苯甲烷) | Hexachlorophene (2,2'-<br>dihydroxy-3, 3',5,5',6,6'-<br>hexachlorodiphenylmethane) | DB5-MS       |
| 129-01 | 98-95-3   | 硝苯                                         | Nitrobenzene                                                                       | DB5-MS       |
| 131-01 | 64-67-5   | 硫酸乙酯 (硫酸二乙酯)                               | Ethyl sulfate<br>(Diethyl sulfate)                                                 | DB5-MS       |
| 132-01 | 680-31-9  | 六甲基磷酸三胺                                    | Hexamethylphosphoramide<br>(HMPA)                                                  | DB5-MS       |
| 133-01 | 684-93-5  | N-亞硝-正-甲脲                                  | N-Nitroso-N-methylurea                                                             | DB5-MS       |
| 134-01 | 62-75-9   | N-亞硝二甲胺 (二甲亞<br>硝胺)                        | Nitrosodimethylamine<br>(DMNA)                                                     | DB17-HT      |
| 134-02 | 55-18-5   | N-亞硝二乙胺 (二乙亞<br>硝胺)                        | Diethylamine, N-nitroso-<br>(Nitrosamine diethyl)                                  | DB17-HT      |
| 136-01 | 593-60-2  | 溴乙烯                                        | Vinyl bromide                                                                      | DB-624       |
| 137-01 | 534-52-1  | 4,6-二硝基-鄰-甲酚                               | 4,6-Dinitro-o-cresol                                                               | DB5-MS       |
| 138-01 | 60-34-4   | 甲基聯胺                                       | Methyl hydrazine                                                                   | DB-624       |

表一 方法適用之有機化合物（續）

| 列管編號   | CAS No.    | 中文名稱                | 英文名稱                                                                       | 適用管柱<br>(參考) |
|--------|------------|---------------------|----------------------------------------------------------------------------|--------------|
| 139-01 | 640-19-7   | 氟乙醯胺                | Monofluoroacetamide                                                        | DB5-MS       |
| 140-01 | 107-19-7   | 炔丙醇 (2-丙炔-1-醇)      | Propargyl alcohol                                                          | DB-624       |
| 141-01 | 75-55-8    | 丙烯亞胺                | Propyleneimine                                                             | DB5-MS       |
| 144-01 | 62-56-6    | 硫脲                  | Thiourea (thiocarbamide)                                                   | DB17-HT      |
| 145-01 | 95-80-7    | 2,4- 甲苯二胺           | m-Toluylenediamine<br>(m-Tolylene-diamine;<br>toluene-2,4,-diamine)        | DB5-MS       |
| 145-02 | 25376-45-8 | 甲苯二胺 (同酚異構物<br>混合物) | Toluylenediamine (mixed<br>isomers); (toluene,diamino-)<br>(mixed isomers) | DB5-MS       |
| 146-01 | 108-05-4   | 醋酸乙烯酯               | Vinyl acetate                                                              | DB-624       |
| 147-01 | 78-87-5    | 1,2-二氯丙烷            | 1,2-Dichloropropane                                                        | DB-624       |
| 148-01 | 56-35-9    | 氧化三丁錫               | Tributyltin oxide<br>Bis(tributyltin)oxide                                 | DB-5         |
| 148-02 | 76-87-9    | 氫氧化三苯錫              | Triphenyltin hydroxide                                                     | DB-5         |
| 148-20 | 900-95-8   | 醋酸三苯錫               | Triphenyltin acetate                                                       | DB-5         |
| 149-01 | 67-72-1    | 六氯乙烷                | Hexachloroethane                                                           | DB5-MS       |
| 150-01 | 87-68-3    | 六氯-1,3-丁二烯          | Hexachloro-1,3-butadiene                                                   | DB5-MS       |
| 152-01 | 95-69-2    | 對-氯-鄰-甲苯胺           | p-Chloro-o-toluidine                                                       | DB5-MS       |
| 153-01 | 79-44-7    | 二甲基胺甲醯氯             | Dimethylcarbamyl chloride                                                  | DB17-HT      |
| 154-01 | 96-09-3    | 氧化苯乙烯               | Styrene oxide                                                              | DB5-MS       |
| 155-01 | 96-18-4    | 1,2,3-三氯丙烷          | 1,2,3-Trichloropropane                                                     | DB5-MS       |
| 159-01 | 79-19-6    | 胺基硫脲 <sup>a</sup>   | Thiosemicarbazide<br>1-amino-2-thiourea                                    | DB5-MS       |
| 160-01 | 1634-04-4  | 甲基第三丁基醚             | Methyl-tert-butyl ether                                                    | DB-624       |
| 161-01 | 120-83-2   | 2,4-二氯酚             | 2,4-Dichlorophenol                                                         | DB5-MS       |
| 162-01 | 75-27-4    | 二氯溴甲烷               | Dichlorobromomethane                                                       | DB5-MS       |
| 163-01 | 77-73-6    | 二環戊二烯               | Dicyclopentadiene                                                          | DB-5         |
| 164-01 | 302-01-2   | 聯胺 <sup>a</sup>     | Hydrazine                                                                  | DB5-MS       |
| 166-01 | 80-05-7    | 雙酚 A                | 4,4-isopropylidene diphenol<br>(Bisphenol A)                               | DB5-MS       |

表一 方法適用之有機化合物（續）

| 列管編號   | CAS No.                 | 中文名稱             | 英文名稱                                                                        | 適用管柱<br>(參考) |
|--------|-------------------------|------------------|-----------------------------------------------------------------------------|--------------|
| 167-01 | 2385-85-5               | 滅蟻樂              | Mirex                                                                       | DB5-MS       |
| 168-01 | 143-50-0                | 十氯酮              | Chlordecone                                                                 | DB5-MS       |
| 170-01 | 608-93-5                | 五氯苯              | Pentachlorobenzene                                                          | DB5-MS       |
| 171-01 | 36355-01-8              | 六溴聯苯             | Hexabromobiphenyl                                                           | DB-5HT       |
| 172-01 | 115-29-7                | 安殺番（工業級安殺番）      | Endosulfan<br>(Technical endosulfan)                                        | DB5-MS       |
| 172-02 | 959-98-8                | $\alpha$ -安殺番    | Alpha ( $\alpha$ ) endosulfan                                               | DB5-MS       |
| 172-03 | 33213-65-9              | $\beta$ -安殺番     | Beta ( $\beta$ ) endosulfan                                                 | DB5-MS       |
| 172-04 | 1031-07-8               | 安殺番硫酸鹽           | Endosulfan sulfate                                                          | DB5-MS       |
| 173-01 | 115-96-8                | 三 2-（氯乙基）磷酸酯     | Tris(2-chloroethyl) phosphate<br>(TCEP)                                     | DB-5         |
| 174-01 | 3194-55-6<br>25637-99-4 | 六溴環十二烷           | Hexabromocyclododecane<br>(HBCD)<br>1,2,5,6,9,10-<br>hexabromocyclododecane | DB5-MS       |
| 174-02 | 134237-50-6             | $\alpha$ -六溴環十二烷 | alpha-<br>hexabromocyclododecane                                            | DB5-MS       |
| 174-03 | 134237-51-7             | $\beta$ -六溴環十二烷  | beta-<br>hexabromocyclododecane                                             | DB5-MS       |
| 174-04 | 134237-52-8             | $\gamma$ -六溴環十二烷 | gamma-<br>hexabromocyclododecane                                            | DB5-MS       |
| 194-01 | 85535-84-8              | 短鏈氯化石蠟           | Short-chain chlorinated<br>paraffins (SCCPs)                                | DB5-MS       |
| 195-01 | 10606-46-9              | 大克蟎              | Dicofol                                                                     | DB-1701      |

- 五氯酚鈉於酸性環境下酸化形成五氯酚；胺基硫脲與聯胺以丙酮 (Acetone) 於酸性環境下進行衍生化，形成丙酮縮氨基硫脲 (Acetone Semicarbazone)，再以氣相層析質譜儀進行檢測。
- 吡啶與三乙胺於溶劑中易解離為鹼性融液，氯乙酸於溶劑中易解離為酸性溶液，分析時應特別注意避免儀器之損害。
- 三乙胺之滯留時間較溶劑為短，於分析時應特別注意質譜 detector off 及 on 之時間以避免溶劑對離子源中燈絲 (filament) 之損害。
- 本方法之層析分離管柱可適用於毒性及關注化學物質化合物項目，如有同等分離效果之層析管柱亦可選用。

表二 內標準品與對應之檢測化合物

---

1,4-dichlorobenzene-d<sub>4</sub>

乙二醇乙醚、二氯溴甲烷、環己烷、吡啶、二甲基甲醯胺、二溴乙烷（二溴乙烯）、氯苯、乙苯、硫酸二甲酯、丙烯醯胺、三溴甲烷（溴仿）、丙烯酸丁酯、二溴氯丙烷、1,1,2,2-四氯乙烷、硫酸乙酯（硫酸二乙酯）、1,2,3-三氯丙烷、異丙苯、苯胺、間-甲酚、1,3-二氯苯、苯甲氯、二氯異丙醚、對-甲苯胺、間-甲苯胺、六氯乙烷、鄰-甲苯胺、氯乙酸、β-丙內酯、三乙胺、N-亞硝二甲胺（二甲亞硝胺）、N-亞硝二乙胺（二乙亞硝胺）、二甲基胺甲醯氯、氧化苯乙烯、氯乙醯胺、聯胺 (Acetone Azine)

naphthalene-d<sub>8</sub>

硝苯、1,3-二氯丙烯、六氯-1,3-丁二烯、三氯甲苯、1,3-丙烷磺內酯、二乙醇胺、2,4-甲苯二胺、甲苯二胺（同分異構物混合物）、α-苯氯乙酮（ω-苯氯乙酮）、對-氯-鄰-甲苯胺

acenaphthene-d<sub>10</sub>

2,4-二異氰酸甲苯、2,4,6-三氯酚、2,4,5-三氯酚、鄰苯二甲酸二甲酯、六氯苯、2,4-二硝基酚、二苯駢呋喃、1-萘胺、4,6-二硝基-鄰-甲酚、硫脲、五氯苯、六氯內-甲烯基-四氫苯二甲酸、二氯萘、三氯萘

phenanthrene-d<sub>10</sub>

1,2-二苯基聯胺、2-萘胺、五氯酚、五氯硝苯、對-硝基聯苯、蒽、鄰苯二甲酸二辛酯、對-胺基聯苯、多氯聯苯 (AC1242)、飛佈達、蟲必死、阿特靈、福賜松、靈丹、氯乃淨、樂乃松、蓋普丹、福爾培、滅蟻樂、四氯萘、五氯萘、六氯萘

chrysene-d<sub>12</sub>

對-胺基聯苯、聯苯胺、4,4'-二胺基二苯甲烷、鄰-二甲基聯苯胺、二甲氧基聯苯胺、4,4'-亞甲雙（2-氯苯胺）、二氯聯苯胺、鄰苯二甲酸二（2-乙基己基）酯、鄰苯二甲酸二辛酯、多氯聯苯 (AC1254、AC1260)、地特靈、可氣丹、地特靈、滴滴涕、安特靈、克氯苯、護谷、雙酚 A、β-安殺番、十氯酮、α-安殺番、安殺番硫酸鹽、七氯萘、八氯萘

perylene-d<sub>12</sub>

六氯芬、六溴環十二烷

---

表三 DFTPP 質量強度規範

| 質量  | 強度標準                 |
|-----|----------------------|
| 51  | 質量 198 的 30 % 至 60 % |
| 68  | 小於質量 69 的 2 %        |
| 70  | 小於質量 69 的 2 %        |
| 127 | 質量 198 的 40 % 至 60 % |
| 197 | 小於質量 198 的 1 %       |
| 198 | 最大尖峰，100 % 相對強度      |
| 199 | 質量 198 的 5 % 至 9 %   |
| 275 | 質量 198 的 10 % 至 30 % |
| 365 | 大於質量 198 的 1 %       |
| 441 | 存在但小於質量 443          |
| 442 | 大於質量 198 的 40 %      |
| 443 | 質量 442 的 17 % 至 23 % |

表四 待測化合物之主要定量離子與次要離子

| 毒性及關注化學<br>物質列管編號 | 化合物名稱                   | 主要定量<br>離子 | 次要離子        |
|-------------------|-------------------------|------------|-------------|
|                   | 多氯聯苯 <sup>a</sup>       |            |             |
| 001-01            | AC1242                  | 75         | 74,50,186   |
|                   | AC1254                  | 394        | 396,324,326 |
|                   | AC1260                  | 44         | 396,394,324 |
| 002-01            | 可氯丹 <sup>b</sup>        | 375        | 373,377,237 |
| 004-01            | 地特靈                     | 79         | 81,82,77    |
| 005-01            | 滴滴涕                     | 235        | 237,165,236 |
| 006-01            | 毒殺芬 <sup>c</sup>        | 159        | 231,233,83  |
| 007-01            | 五氯酚                     | 266        | 268,264,165 |
| 008-01            | 五氯酚鈉 <sup>d</sup>       | 266        | 268,264,165 |
| 010-01            | 安特靈                     | 81         | 79,263,67   |
| 011-01            | 飛佈達                     | 100        | 272,274,270 |
|                   | 蟲必死                     |            |             |
| 012-01            | $\alpha$ -BHC(319-84-6) | 183        | 181,219,217 |
|                   | $\beta$ -BHC(319-85-7)  | 219        | 181,109,183 |
|                   | $\delta$ -BHC(319-86-8) | 109        | 219,183,181 |
| 013-01            | 阿特靈                     | 66         | 263,79,91   |
| 014-01            | 二溴氯丙烷                   | 157        | 75,155,39   |
| 015-01            | 福賜松                     | 171        | 77,377,375  |
| 016-01            | 克氯苯                     | 251        | 139,253,111 |
| 017-01            | 護谷                      | 283        | 50,285,63   |
| 019-01            | 靈丹                      | 181        | 183,219,217 |
| 023-01            | 五氯硝苯                    | 237        | 295,249,239 |
| 025-01            | 氰乃淨                     | 68         | 225,44,43   |
| 026-01            | 樂乃松                     | 285        | 287,125,109 |
| 028-01            | 蓋普丹                     | 79         | 149,80,117  |
| 029-01            | 福爾培                     | 260        | 262,104,76  |
| 032-01            | 二氯甲醚                    | 79         | 49,81       |
| 033-01            | 對-硝基聯苯                  | 199        | 152,169,151 |
| 034-01            | 對-胺基聯苯                  | 169        | 168,170,167 |

表四 待測化合物之主要定量離子與次要離子（續）

| 毒性及關注化學<br>物質列管編號 | 化合物名稱               | 主要定量<br>離子 | 次要離子        |
|-------------------|---------------------|------------|-------------|
| 035-01            | 2-萘胺                | 143        | 115,116,144 |
| 036-01            | 聯苯胺                 | 184        | 185,92,183  |
| 038-01            | 苯胺                  | 93         | 66,65,39    |
| 039-01            | 鄰-甲苯胺               | 107        | 106,77,79   |
| 039-02            | 間-甲苯胺               | 106        | 107,77,79   |
| 039-03            | 對-甲苯胺               | 106        | 107,77,79   |
| 040-01            | 1-萘胺                | 143        | 115,116,144 |
| 041-01            | 二甲氧基聯苯胺             | 244        | 201,229,245 |
| 042-01            | 二氯聯苯胺               | 252        | 254,253,126 |
| 043-01            | 鄰-二甲基聯苯胺            | 212        | 211,213,196 |
| 044-01            | 三氯甲苯                | 159        | 161,89,163  |
| 050-01            | 丙烯醯胺                | 44         | 71,55,43    |
| 051-01            | 丙烯腈                 | 53         | 52,51       |
| 052-01            | 苯                   | 78         | —           |
| 053-01            | 四氯化碳                | 117        | 119         |
| 054-01            | 三氯甲烷                | 83         | 85          |
| 056-01            | 2,4,6-三氯酚           | 196        | 198,200,97  |
| 056-02            | 2,4,5-三氯酚           | 196        | 198,97,200  |
| 057-01            | 氯甲基甲基醚              | 45         | 29,15       |
| 058-01            | 六氯苯                 | 284        | 286,282,142 |
| 060-01            | 二溴乙烷（二溴乙烯）          | 107        | 109,81,79   |
| 061-01            | 環氧乙烷                | 44         | 43,42       |
| 062-01            | 1,3-丁二烯             | 39         | 54,53,27    |
| 063-01            | 四氯乙烯                | 164        | 129,131,166 |
| 064-01            | 三氯乙烯                | 95         | 97,130,132  |
| 065-01            | 氯乙烯                 | 62         | 64          |
| 066-01            | 甲醛 <sup>e</sup>     |            |             |
| 067-01            | 4,4'-亞甲雙<br>（2-氯苯胺） | 231        | 266,140,268 |
| 068-01            | 鄰苯二甲酸二（2-乙基己<br>基）酯 | 149        | 167,57,279  |

表四 待測化合物之主要定量離子與次要離子（續）

| 毒性及關注化學<br>物質列管編號 | 化合物名稱                          | 主要定量<br>離子 | 次要離子        |
|-------------------|--------------------------------|------------|-------------|
| 068-02            | 鄰苯二甲酸二辛酯                       | 149        | 279,43,57   |
| 068-03            | 鄰苯二甲酸丁基苯甲酯                     | 149        | 91,206,65   |
| 068-04            | 鄰苯二甲酸二異壬酯                      | 149        | 71,57,293   |
| 068-05            | 鄰苯二甲酸二異癸酯                      | 149        | 307,71,167  |
| 068-06            | 鄰苯二甲酸二乙酯                       | 149        | 177,150,105 |
| 068-07            | 鄰苯二甲酸二烷基酯（C7-<br>11 支鏈及直鏈）     | 149        | 150,43      |
| 068-08            | 鄰苯二甲酸二烷基酯（C6-8<br>支鏈及直鏈，富含 C7） | 149        | 265,57      |
| 068-09            | 鄰苯二甲酸二丙酯                       | 149        | 41,43,76    |
| 068-10            | 鄰苯二甲酸二異丁酯                      | 149        | 57,41,223   |
| 068-11            | 鄰苯二甲酸二戊酯                       | 149        | 43,150,41   |
| 068-12            | 鄰苯二甲酸二己酯                       | 149        | 43,41,150   |
| 068-13            | 鄰苯二甲酸二環己酯                      | 149        | 167,55,150  |
| 068-14            | 鄰苯二甲酸二異辛酯                      | 149        | 167,57,71   |
| 068-15            | 鄰苯二甲酸二正壬酯                      | 149        | 293,71,57   |
| 068-16            | 鄰苯二甲酸二（4-甲基-2-戊<br>基）酯         | 149        | 43,85,150   |
| 068-17            | 鄰苯二甲酸二甲氧乙酯                     | 59         | 58,45,149   |
| 068-18            | 鄰苯二甲酸雙-2-乙氧基乙<br>酯             | 72         | 73,45,149   |
| 068-19            | 鄰苯二甲酸己基 2-乙基己基<br>酯            | 149        | 150,43      |
| 068-20            | 鄰苯二甲酸二丁氧基乙酯                    | 149        | 57,56,101   |
| 068-21            | 鄰苯二甲酸二苯酯                       | 225        | 226,77,76   |
| 068-22            | 鄰苯二甲酸二苄酯                       | 91         | 107,149,92  |
| 068-23            | 鄰苯二甲酸單（2-乙基己<br>基）酯            | 149        | 167,70,150  |
| 068-24            | 鄰苯二甲酸單丁酯                       | 149        | 167,150,65  |
| 069-01            | 1,3-二氯苯                        | 146        | 148,111,75  |

表四 待測化合物之主要定量離子與次要離子（續）

| 毒性及關注化學<br>物質列管編號 | 化合物名稱                             | 主要定量<br>離子 | 次要離子        |
|-------------------|-----------------------------------|------------|-------------|
| 069-02            | 鄰-二氯苯                             | 146        | 148,111,75  |
| 070-01            | 1,2,4-三氯苯                         | 180        | 182,145,184 |
| 071-01            | 乙二醇乙醚                             | 59         | 45,72,43    |
| 071-02            | 乙二醇甲醚                             | 45         | 29,30       |
| 072-01            | 環氧氯丙烷                             | 57         | 49,62,51    |
| 073-01            | 鄰苯二甲酐                             | 104        | 76,50,148   |
| 074-01            | 二異氰酸甲苯                            | 174        | 145,146,173 |
| 075-01            | 1,2-二氯乙烷                          | 62         | 64,49,63    |
| 076-01            | 1,1,2,2-四氯乙烷                      | 83         | 85,95,87    |
| 077-01            | 1,2-二氯乙烯                          | 61         | 96,98,63    |
| 077-02            | 1,1-二氯乙烯                          | 96         | 61,63       |
| 078-01            | 氯甲烷                               | 50         | 52          |
| 079-01            | 二氯甲烷                              | 84         | 86,49       |
| 080-01            | 鄰苯二甲酸二甲酯                          | 163        | 77,164,76   |
| 080-02            | 鄰苯二甲酸二丁酯                          | 149        | 150,41,57   |
| 081-01            | 異丙苯                               | 105        | 120,77,79   |
| 082-01            | 環己烷                               | 56         | 84,41,55    |
| 083-01            | 氯乙酸                               | 50         | 52,49,45    |
| 084-01            | 氯甲酸乙酯                             | 63         | 65,45,44    |
| 085-01            | 2,4-二硝基酚                          | 184        | 63,53,107   |
| 086-01            | 硫酸二甲酯                             | 95         | 96,45,66    |
| 088-01            | 二氯異丙醚                             | 45         | 121,41,77   |
| 089-01            | 二硫化碳                              | 76         | 78          |
| 090-01            | 氯苯                                | 112        | 77,114,51   |
| 091-01            | 十溴二苯醚 <sup>f</sup>                |            |             |
| 091-02            | 八溴二苯醚 <sup>f</sup>                |            |             |
| 091-03            | 五溴二苯醚 <sup>f</sup>                |            |             |
| 091-04            | 四溴二苯醚 <sup>f</sup>                |            |             |
| 091-05            | 2,2',4,4',5,5'-六溴二苯醚 <sup>f</sup> |            |             |
| 091-06            | 2,2',4,4',5,6'-六溴二苯醚 <sup>f</sup> |            |             |

表四 待測化合物之主要定量離子與次要離子（續）

| 毒性及關注化學<br>物質列管編號 | 化合物名稱                               | 主要定量<br>離子 | 次要離子        |
|-------------------|-------------------------------------|------------|-------------|
| 091-07            | 2,2',3,3',4,5',6-七溴二苯醚 <sup>f</sup> |            |             |
| 091-08            | 2,2',3,4,4',5',6-七溴二苯醚 <sup>f</sup> |            |             |
| 092-01            | 二苯駢呋喃                               | 168        | 139,169,84  |
| 093-01            | 1,4-二氧陸圀                            | 88         | 58,43,57    |
| 094-01            | 二氯萘                                 | 196        | 198,126,161 |
| 094-02            | 三氯萘                                 | 230        | 232,160,234 |
| 094-03            | 四氯萘                                 | 266        | 264,268,194 |
| 094-04            | 五氯萘                                 | 300        | 302,298,228 |
| 094-05            | 六氯萘                                 | 334        | 336,332,264 |
| 094-06            | 七氯萘                                 | 368        | 370,298,372 |
| 094-07            | 八氯萘                                 | 402        | 404,332,334 |
| 095-01            | 碘甲烷                                 | 142        | 127,141     |
| 096-01            | β-丙內酯                               | 42         | 28,43,15    |
| 097-01            | 吡啶                                  | 79         | 52,51,50    |
| 098-01            | 二甲基甲醯胺                              | 73         | 44,42,43    |
| 100-01            | 丙烯醛                                 | 56         | 55,58       |
| 101-01            | 丙烯醇                                 | 57         | 58,39       |
| 102-01            | 1,2-二苯基聯胺                           | 184        | 92,77,65    |
| 104-01            | 乙醛 <sup>e</sup>                     |            |             |
| 105-01            | 乙腈                                  | 41         | 40,39       |
| 106-01            | 苯甲氯                                 | 91         | 126,65,128  |
| 107-01            | 丙烯酸丁酯                               | 55         | 56,73,41    |
| 108-01            | 丁醛 <sup>e</sup>                     |            |             |
| 110-01            | 六氯內-甲烯基-四氫苯二甲<br>酸                  | 141        | 106,140,143 |
| 111-01            | 氯丁二烯                                | 53         | 88,90,51    |
| 112-01            | 間-甲酚                                | 108        | 107,79,77   |
| 113-01            | 1,3-二氯丙烯                            | 75         | 39,77,110   |
| 114-01            | 二乙醇胺                                | 30         | 74,56,42    |
| 115-01            | 二苯胺                                 | 169        | 168,167,51  |

表四 待測化合物之主要定量離子與次要離子（續）

| 毒性及關注化學<br>物質列管編號 | 化合物名稱                                  | 主要定量<br>離子 | 次要離子        |
|-------------------|----------------------------------------|------------|-------------|
| 116-01            | 乙苯                                     | 91         | 106,51,65   |
| 117-01            | 甲基異丁酮                                  | 100        | 43,58,85    |
| 118-01            | 4,4'-二胺基二苯甲烷                           | 198        | 197,106,182 |
| 120-01            | 1,3-丙烷磺內酯                              | 28         | 58,29,57    |
| 121-01            | 三乙胺                                    | 86         | 58,30,101   |
| 122-01            | $\alpha$ -苯氯乙酮（w-苯氯乙酮）                 | 105        | 77,51,106   |
| 123-01            | 蔥                                      | 178        | 179,176,177 |
| 124-01            | 二溴甲烷                                   | 93         | 95,174      |
| 125-01            | 三溴甲烷（溴仿）                               | 173        | 171,175,91  |
| 126-01            | 氯乙烷                                    | 64         | 66          |
| 128-01            | 六氯芬（2,2'-二羥-3,3',<br>5,5',6,6'-六氯二苯甲烷） | 196        | 198,209,211 |
| 129-01            | 硝苯                                     | 77         | 123,51,50   |
| 131-01            | 硫酸乙酯（硫酸二乙酯）                            | 45         | 59,125,139  |
| 132-01            | 六甲基磷酸三胺                                | 44         | 135,45,42   |
| 133-01            | N-亞硝-正-甲脲                              | 60         | 28,44,30    |
| 134-01            | N-亞硝二甲胺（二甲亞硝<br>胺）                     | 74         | 42,43,15    |
| 134-02            | N-亞硝二乙胺（二乙亞硝<br>胺）                     | 102        | 44,42,29    |
| 136-01            | 溴乙烯                                    | 27         | 106,108     |
| 137-01            | 4,6-二硝基-鄰-甲酚                           | 198        | 105,51,121  |
| 138-01            | 甲基聯胺                                   | 46         | 28,45       |
| 139-01            | 氟乙醯胺                                   | 44         | 77,60       |
| 140-01            | 炔丙醇（2-丙炔-1-醇）                          | 55         | 39,38,53    |
| 141-01            | 丙烯亞胺                                   | 28         | 56,57,30    |
| 144-01            | 硫脲                                     | 76         | 42,60,44    |
| 145-01            | 2,4-甲苯二胺                               | 122        | 121,94,105  |
|                   | 甲苯二胺（同分異構物混合物）                         |            |             |
| 145-02            | 2,3-甲苯二胺<br>(CAS No.2687-25-4)         | 122        | 121,104,94  |

表四 待測化合物之主要定量離子與次要離子（續）

| 毒性及關注化學<br>物質列管編號 | 化合物名稱                          | 主要定量<br>離子 | 次要離子        |
|-------------------|--------------------------------|------------|-------------|
| 145-02            | 2,5-甲 苯二胺<br>(CAS No.95-70-5)  | 122        | 121,94,106  |
|                   | 2,6-甲 苯二胺<br>(CAS No.823-40-5) | 122        | 121,104,94  |
|                   | 3,4-甲 苯二胺<br>(CAS No.496-72-0) | 122        | 121,94,106  |
| 146-01            | 醋酸 乙烯酯                         | 43         | 86          |
| 147-01            | 1,2-二 氯丙烷                      | 63         | 112         |
| 148-01            | 氧化三 丁錫                         | 179        | 539,177     |
| 148-02            | 氫氧化三 苯錫                        | 351        | 349,197     |
| 148-20            | 醋酸三 苯錫                         | 333        | 331,329     |
| 149-01            | 六 氯乙烷                          | 117        | 119,201,203 |
| 150-01            | 六 氯-1,3-丁二烯                    | 225        | 227,223,190 |
| 152-01            | 對-氯-鄰-甲 苯胺                     | 141        | 106,140,143 |
| 153-01            | 二 甲基胺甲鹽 氯                      | 72         | 107,15,42   |
| 154-01            | 氧化 苯乙 烯                        | 91         | 120,90,92   |
| 155-01            | 1,2,3-三 氯丙烷                    | 75         | 110,77,61   |
| 159-01            | 胺基硫脲 <sup>d</sup>              | 72         | 57,41,42    |
| 160-01            | 甲 基第三丁基 醚                      | 73         | 43,57       |
| 161-01            | 2,4-二 氯酚                       | 162        | 164,63,98   |
| 162-01            | 二 氯溴 甲 烷                       | 83         | 85,47,48    |
| 163-01            | 二環戊二 烯                         | 66         | 39,65       |
| 164-01            | 聯 胺 <sup>d</sup>               | 56         | 97,112,39   |
| 166-01            | 雙 酚 A                          | 213        | 228,214,119 |
| 167-01            | 滅 蟻 樂                          | 272        | 274,270,237 |
| 168-01            | 十 氯 酮                          | 272        | 274,237,270 |
| 170-01            | 五 氯 苯                          | 250        | 248,252,215 |
| 171-01            | 六 溴 聯 苯 <sup>g</sup>           |            |             |
| 172-01            | 安殺番(工業級安殺番)                    | 195        | 197,241,237 |
| 172-02            | $\alpha$ -安殺番                  | 241        | 239,195,237 |
| 172-03            | $\beta$ -安殺番                   | 195        | 241,237,239 |

表四 待測化合物之主要定量離子與次要離子（續）

| 毒性及關注化學物質列管編號 | 化合物名稱               | 主要定量離子 | 次要離子        |
|---------------|---------------------|--------|-------------|
| 172-04        | 安殺番硫酸鹽              | 387    | 272,274,389 |
| 173-01        | 三 2-（氯乙基）磷酸酯        | 63     | 249,143     |
| 174-01        | 六溴環十二烷              | 67     | 79,41,157   |
| 194-01        | 短鏈氯化石蠟 <sup>h</sup> |        |             |
| 195-01        | 大克螨                 | 139    | 251,253     |

- a 多氯聯苯為混合物，AC1242 之主成分 2,4',5-trichloro-1,1'-biphenyl (CAS No. 16606-02-3)，AC1254 之主成分 2,2',4,5',6-pentachloro-1,1'-biphenyl (CAS No. 60145-21-3)，AC1260 之主成分 2,2',3,3',6,6'-hexachloro-1,1'-biphenyl (CAS No. 38411-22-2)。
- b 可氯丹為混合物，RT=17.76 者為主成分 cis-chlordane (CAS No. 5103-71-9)。
- c 毒殺芬為混合物，RT=19.60 者為主成分 2,2,5-Endo,6-exo,8,9,9,10-octachlorobor-nane (CAS No. 58002-19-0)。
- d 五氯酚鈉於酸性環境下酸化形成五氯酚；胺基硫脲與聯胺以丙酮 (Acetone) 於酸性環境下進行衍生化，形成丙酮縮氨基硫脲 (Acetone Semicarbazone) 與二丙酮脒 (Acetone Azine)，再以氣相層析質譜儀進行檢測。表中所列相關離子為五氯酚、Acetone Semicarbazone、Acetone Azine 所具有之離子。
- e 質譜分析條件及特性離子選擇可參考「毒性化學物質中醛類檢測方法－氣相層析質譜儀法(NIEA T707.2)」。
- f 質譜分析條件及特性離子選擇可參考「毒性化學物質中多溴二苯醚類檢測方法－氣相層析質譜儀法(NIEA T506.3)」。
- g 質譜分析條件及特性離子選擇可參考「六溴聯苯檢測方法－氣相層析高解析或串聯式質譜儀法(NIEA M503.6)」。
- h 質譜分析條件及特性離子選擇可參考「短鏈氯化石蠟檢測方法－氣相層析／電子捕捉負離子－質譜儀法(NIEA M502.0)」。
- i 本表列之混合物其主要離子與次要離子，為主成分之定量離子與定性離子。

表五 相對離子強度之容許誤差

| 相對強度<br>(% of Base Peak) | 兩離子相對強度之<br>允許誤差% |
|--------------------------|-------------------|
| >50                      | ± 10              |
| >20 至 50                 | ± 15              |
| >10 至 20                 | ± 20              |
| ≤10                      | ± 50              |

註：例如在參考質譜資料中某一離子相對強度為 20 %，則樣品分析中同一離子之相對強度須 16 % ~ 24 % 之間。

表六 單一實驗室測試之準確度與精密度

| 化合物       | 添加濃度(μg/mL) | 平均值(μg/mL) | 標準差(μg/mL) |
|-----------|-------------|------------|------------|
| 1,3-二氯苯   | 10          | 9.89       | 0.24       |
|           | 100         | 99.70      | 1.97       |
|           | 250         | 249.45     | 1.97       |
| 1,2,4-三氯苯 | 10          | 10.08      | 0.64       |
|           | 100         | 100.24     | 2.77       |
|           | 250         | 251.07     | 2.62       |
| 鄰苯二甲酸二丁酯  | 10          | 9.69       | 0.35       |
|           | 100         | 100.42     | 2.24       |
|           | 250         | 249.63     | 1.49       |
| 異丙苯       | 10          | 9.71       | 0.25       |
|           | 100         | 100.64     | 2.50       |
|           | 250         | 249.96     | 3.01       |
| 丙烯酸丁酯     | 10          | 9.81       | 0.57       |
|           | 100         | 103.07     | 2.91       |
|           | 250         | 251.81     | 3.85       |
| 苯胺        | 10          | 10.02      | 0.26       |
|           | 100         | 98.84      | 1.63       |
|           | 250         | 248.39     | 0.80       |
| 二苯胺       | 10          | 10.37      | 0.35       |
|           | 100         | 99.84      | 3.19       |
|           | 250         | 250.67     | 3.70       |
| 間-甲酚      | 10          | 9.41       | 0.22       |
|           | 100         | 99.12      | 2.76       |
|           | 250         | 249.89     | 4.12       |
| 2,4-二氯酚   | 10          | 9.92       | 0.08       |
|           | 100         | 99.81      | 0.71       |
|           | 250         | 250.76     | 1.66       |
| 地特靈       | 10          | 9.35       | 0.92       |
|           | 100         | 99.24      | 2.85       |
|           | 250         | 251.20     | 4.36       |
| 氯乙酸       | 300         | 300.44     | 6.73       |
|           | 500         | 499.60     | 3.87       |
|           | 700         | 698.46     | 4.80       |
| 二乙醇胺      | 300         | 293.77     | 3.49       |
|           | 500         | 492.45     | 5.18       |
|           | 700         | 695.61     | 5.81       |
| 1,3-丙烷磺內酯 | 10          | 10.04      | 0.40       |
|           | 100         | 99.93      | 2.51       |
|           | 250         | 250.53     | 2.25       |
| 三乙胺       | 10          | 9.15       | 0.53       |
|           | 100         | 95.67      | 3.82       |
|           | 250         | 245.89     | 1.81       |
| 硫脲        | 300         | 300.07     | 4.76       |
|           | 500         | 500.65     | 4.47       |
|           | 700         | 698.18     | 9.35       |

表六 單一實驗室測試之準確度與精密度（續）

| 化合物                         | 添加濃度(μg/mL) | 平均值(μg/mL) | 標準差(μg/mL) |
|-----------------------------|-------------|------------|------------|
| 甲苯二胺（同分異構物混合物） <sup>b</sup> | 10          | 9.20       | 0.47       |
|                             | 100         | 92.99      | 4.13       |
|                             | 250         | 241.03     | 2.61       |
| 雙酚 A                        | 10          | 8.26       | 0.57       |
|                             | 40          | 42.73      | 1.68       |
|                             | 100         | 112.33     | 3.52       |
| 氟乙醯胺                        | 4           | 4.20       | 0.28       |
|                             | 32          | 31.2       | 3.02       |
|                             | 60          | 73.9       | 3.16       |
| 對-氯-鄰-甲苯胺                   | 2           | 1.88       | 0.14       |
|                             | 16          | 16.36      | 1.51       |
|                             | 40          | 37.56      | 1.58       |
| 五氯苯                         | 2           | 1.84       | 0.04       |
|                             | 16          | 16.34      | 0.19       |
|                             | 40          | 38.79      | 0.19       |
| 六氯內-甲烯基-四氫苯二甲酸              | 8           | 8.73       | 0.05       |
|                             | 16          | 13.8       | 0.93       |
|                             | 40          | 38.2       | 2.63       |
| α-安殺番                       | 2           | 1.84       | 0.20       |
|                             | 16          | 16.7       | 0.20       |
|                             | 40          | 39.6       | 0.41       |
| β-安殺番                       | 2           | 1.69       | 0.18       |
|                             | 16          | 17.4       | 0.15       |
|                             | 40          | 39.7       | 0.56       |
| 十氯酮                         | 2           | 2.18       | 0.13       |
|                             | 16          | 17.3       | 1.33       |
|                             | 40          | 42.1       | 2.57       |
| 安殺番硫酸鹽                      | 2           | 1.83       | 0.05       |
|                             | 16          | 16.4       | 0.25       |
|                             | 40          | 39.3       | 0.47       |
| 滅蟻樂                         | 2           | 1.58       | 0.04       |
|                             | 16          | 17.0       | 0.20       |
|                             | 40          | 38.6       | 0.25       |
| 六溴環十二烷                      | 10          | 9.83       | 1.28       |
|                             | 20          | 17.56      | 1.15       |
|                             | 60          | 57.64      | 3.32       |

a 平均值、標準差為 7 次重複試驗之結果。

b 2,4-甲苯二胺（列管編號 145-01）以甲苯二胺（同分異構物混合物）驗證。