

水中半揮發性有機化合物檢測方法—氣相層析質譜儀法

中華民國 106 年 6 月 8 日環署檢字第 1060041361 號公告

自中華民國 106 年 9 月 15 日生效

NIEA W801.53B

一、方法概要

水樣調整 pH 值後，以分液漏斗液相-液相萃取法或連續液相-液相萃取裝置，經二氯甲烷或其他溶劑連續萃取；或水樣以固相萃取材質吸附待測有機物，經適當溶劑沖提萃取；萃取液經去水、濃縮及定量後，以氣相層析質譜儀分析；萃取液中半揮發性有機化合物的定性分析，可以其滯留時間及數個特性離子的相對強度進行確認，定量分析則可採內標準品定量法，以待測物與內標準品的主要離子相對強度及所建立之檢量線來定量待測物。

二、適用範圍

本方法適用於飲用水、飲用水水源、地面水體、地下水、放流水、毒性特性溶出程序（Toxicity characteristic leaching procedure, TCLP）萃出液及製程冷卻水塔之冷卻水等，可檢測的化合物及適用之前處理如表一所示，未在表列中的化學物質經驗證後，在適當之前處理下亦可適用。

三、干擾

- （一）當使用的溶劑、試藥、玻璃器皿及其他樣品處理過程中的硬體設備含有污染物時，將會造成方法的干擾，其結果可能為單一的污染物或導致總離子圖譜的基線上升；檢驗室必要時可進行試劑空白分析，以確認其干擾來源。
- （二）鄰苯二甲酸酯會引起分析上嚴重之干擾，此類污染常源自塑膠器皿，故在採樣及分析過程中，不可使用塑膠器皿。
- （三）玻璃器皿必須清洗以避免干擾；玻璃器皿使用完畢，應以溶劑淋洗，然後以清潔劑清洗，再以自來水、試劑水或適當之有機溶劑淋洗。玻璃器皿晾乾或烘乾（僅限於非定容器皿）後，適當貯放，避免污染。
- （四）採用殘量分析級或高純度的試藥及溶劑，有助於減少干擾的問題，必要時，可將溶劑以玻璃蒸餾裝置予以純化。
- （五）當污染物質與待測物，同時自樣品中被萃出時，將會造成基質干擾，

其干擾程度，視樣品來源的不同而有相當大的差異。

- (六) 鹼/中性的萃取過程會大幅降低酚、2-甲基酚及2,4-二甲基酚的回收率，分析員應了解，在使用本方法敘述的條件下，所得到的分析結果為樣品中此類化合物的最低濃度。
- (七) 1,2-二苯基聯胺（1,2-Diphenylhydrazine）屬半衰期短暫之不穩定化合物，易轉換偶氮苯（Azobenzene）化合物，測定1,2-二苯基聯胺時可以偶氮苯代表該成分，因此測得之偶氮苯為1,2-二苯基聯胺成分和偶氮苯成分之和。
- (八) 分析過程如遇到濃度特別高的樣品，可緊隨著分析空白溶劑樣品以確認系統是否有跨次污染。
- (九) 萃取過程中發生乳化現象時，可加入適量氯化鈉、攪拌或進行連續式液相-液相萃取等方式去除乳化。

四、設備與材料

- (一) 採樣瓶：1 L，棕色玻璃材質，附螺旋瓶蓋，瓶蓋內襯為鐵氟龍墊片。若使用無色玻璃瓶，可以鋁箔紙包於瓶外，以避免照光。使用前，玻璃瓶及瓶蓋內襯應事先清洗乾淨，並以丙酮或二氯甲烷淋洗後晾乾，以避免污染。
- (二) 分液漏斗：2 L，硼矽玻璃材質，附鐵氟龍活栓，不得使用潤滑油脂。
- (三) 連續式液相-液相萃取設備（Kontes 584200-0000，584500-0000，583250-0000 或同級品）：附鐵氟龍或玻璃接頭及活栓，不得使用潤滑油脂。
- (四) 固相萃取管（solid phase extraction cartridge）或固相萃取膜（solid phase extraction disk）裝置：固相萃取管（膜）組合裝置含蠕動馬達及幫浦或自動固相萃取管（膜）裝置或相同功能裝置者。
- (五) 固相萃取管：1 g / 20 mL（Waters Oasis®），填充材質如 HLB（Hydrophilic N-vinylpyrrolidone and Lipophilic divinylbenzene Balanced）、DVB（divinylbenzene）或 C18（Octadecyl silica）等材質或同級品。

- (六) 活性碳萃取管：8 g / 20 mL (Horizon Technology, Inc.)，填充材質為 Activated carbon (Charcoal) particles 等材質或同級品。
- (七) 固相萃取膜：1 g / 47 mm (Horizon Technology, Inc. Atlantic™)，填充材質如 HLB、DVB 或 C18 (Octadecyl silica) 等材質或同級品。
- (八) 濃縮裝置：可使用 K.-D. 濃縮裝置、減壓濃縮裝置、加熱減壓吹氮濃縮定量裝置、振盪減壓濃縮裝置、離心減壓濃縮裝置；或其他相似功能之裝置。
- (九) 水浴裝置：可加熱至 90°C，溫度控制在 $\pm 2^\circ\text{C}$ 以內者。
- (十) 圓底燒瓶：500 mL，硼矽玻璃材質。
- (十一) 量瓶：10.0 mL，棕色，硼矽玻璃材質。
- (十二) 分析天平：可精秤至 0.1 mg。
- (十三) 注射針或微量移液管。
- (十四) 氮氣及氬氣：純度為 99.999% 以上，可使用去水、去有機物及去氧裝置淨化之。
- (十五) 氮氣吹乾裝置。
- (十六) pH 計或 pH 試紙。
- (十七) 除水裝置：無水硫酸鈉去水玻璃管柱、GoreTex 除水膜；或其他相似具除水功能之材料或裝置。
- (十八) 氣相層析質譜儀
1. 氣相層析儀—具設定昇溫程式功能之氣相層析儀，以及其它必須之附件，如注射針、層析管柱及氣體等的完整分析系統。
 2. 層析管柱：30 m (長度) \times 0.25 mm (內徑) \times 0.25 μm (膜厚) 之 DB-5MS、RtX-5MS 或同級品。
 3. 質譜儀：每 1 秒或更短時間內可由質量 40 amu 掃描至 500 amu，使用 Electron Impact (EI) 方式離子化，標準電子能量為 70 eV。

4. 如果 Ion-Trap MS（離子阱質譜儀）能產生符合 EPA/NIST Library 相似的電子碰撞質圖譜，Ion-Trap MS 亦可使用於本方法。
5. 數據處理系統：電腦系統必須有界面與質譜儀連接，且可持續在整個層析過程中，收集並儲存所有質譜資料。此電腦系統應具有可自任何層析質譜資料檔案中搜尋特定離子，並以離子強度對時間或掃描數繪出圖譜的功能，此種圖譜稱為 Extracted ion current profile（EICP）；此外，系統還需具備適當的軟體進行積分。
6. 前置管柱（可視需要而定）：0.25 mm ID × 6m 或其它相似之去活化熔矽管柱，可用管柱連接器連接注射器及分離管柱。

五、試劑

- （一）試劑水：不含有機物之去離子水，或不含有機物之市售水。
- （二）氫氧化鈉溶液，10 M：溶解約 40 g 試藥級氫氧化鈉於少量試劑水中，定容至 100 mL。
- （三）硫代硫酸鈉：顆粒狀，試藥級。
- （四）硫酸溶液（1+1）：緩慢將 50 mL 濃硫酸（比重 1.84）加入於 50 mL 試劑水中。
- （五）鹽酸：分析級。
- （六）丙酮、二氯甲烷、甲醇、乙醚、正己烷：殘量級或同級品（註 1）。
- （七）無水硫酸鈉：試藥級。
- （八）氯化鈉：試藥級。
- （九）儲備標準溶液：標準溶液可用高純度標準品配製或市售可追溯濃度證明文件之溶液。
 1. 精確稱取約 0.0100 g 之高純度標準品，以二氯甲烷或適當溶劑溶解此標準品於 10 mL 的定量瓶中，並定容至刻度；若該化合物的純度為 96% 或更高時，則所稱之重量，可直接計算儲備標準溶液之濃度，而不需考慮因標準品純度不足 100% 所造成之誤差。

2. 將儲備標準溶液移至襯有鐵氟龍墊片之螺旋蓋樣品瓶中，貯存在 -10°C 以下，並避免光線照射；分析員應經常檢查儲備標準溶液有無衰退或溶劑蒸發的跡象，尤其是每次在使用此標準溶液建立檢量線前應格外注意。
- (十) 中間標準溶液之配製：將儲備標準溶液以二氯甲烷或適當溶劑稀釋，配製成所需之單一或混合化合物之中間標準溶液。
- (十一) 擬似標準品添加溶液：依檢測項目要求，選用表二中酸性或（及）鹼性擬似標準品或選擇合適擬似標準品，以丙酮或適當溶劑配製擬似標準品添加溶液，添加適量體積於水樣中，使其中每一擬似標準品濃度相當於 $100\ \mu\text{g/L}$ （建議配製濃度）。
- (十二) 十氟三苯基磷（Decafluorotriphenylphosphine, DFTPP）標準溶液：以二氯甲烷或適當溶劑，配製濃度為 $50\ \text{mg/L}$ 或更低濃度的DFTPP溶液。
- (十三) 內標準品溶液：將表二所列之內標準品或依檢測項目選擇適當內標準品，以二氯甲烷或適當溶劑，配製為 $4000\ \text{mg/L}$ （建議濃度值），檢量標準溶液及樣品於上機前，每 $1\ \text{mL}$ 加入 $10\ \mu\text{L}$ （建議添加量）內標準溶液，各化合物對應之內標準品請參考表三。
- (十四) 系統績效查核化合物（System performance check compound, SPCC）包括 N-Nitroso-di-n-propylamine, HeXachlorocyclopentadiene, 2,4-Dinitrophenol 及 4-Nitrophenol（選擇性），其配製方法與儲備標準品相同。
- (十五) 檢量線標準溶液：以二氯甲烷或適當溶劑稀釋中間標準溶液。

六、採樣與保存

- (一) 以乾淨之棕色玻璃採樣瓶收集水樣 $1\ \text{L}$ 以上（採樣瓶不得以擬採之水預洗）。
- (二) 所有樣品在採集後到萃取前，必須冷藏在 $4\pm 2^{\circ}\text{C}$ 下；如樣品中含有餘氯，可將採樣瓶裝滿樣品後，每公升樣品加入約 $80\ \text{mg}$ 硫代硫酸鈉，並混合均勻。
- (三) 所有樣品必須在採集後 7 天之內萃取，並在萃取後 40 天之內完成分析，萃取液裝於密閉玻璃瓶，要避光並儲存於 -10°C 以下。

七、步驟

(一) 氣相層析質譜儀分析條件如下 (可視實際需要適當調整之) :

1. 層析管：30 m (長度) × 0.25 mm (內徑) × 0.25 μm (膜厚) 之 DB-5MS 或同級品。

注入器溫度：280°C (非分流，注入 1μL)。

傳輸管溫度：280°C。

層析管溫度：最初 40°C 保持 4 分鐘，以每分鐘 10°C 從 40°C 升溫至 160°C，保持 1 分鐘；次以每分鐘 10°C 從 160°C 升溫至 280°C，保持 4 分鐘；再以每分鐘 10°C 從 280°C 升溫至 300°C，最後保持 10 分鐘。

載流氣體 (氦氣) 流速：0.8 mL/分鐘。

2. 質譜儀績效

質譜掃描範圍 (Scan range)：40 ~ 500 amu

掃描時間：每個波峰至少有 5 筆掃描數據，且每次掃描不超過 1 秒鐘

離子化方式：電子撞擊法 (70 eV EI)

選擇離子監測模式 (SIM mode)：除了掃描模式 (Scan) 外，亦可使用選擇離子監測模式針對幾個預先選定的定量離子做掃描，進行資料擷取，次要離子可選擇性的加入或刪除，有些較新機型可進行掃描及選擇離子偵測模式同時進行，可視實際需要適當調整之。總掃描時間要小於 1000 毫秒，每根尖峰至少有 5~10 次掃描，每群停駐時間 (Dwell time for Group) 定義如下：

$$\text{每群停駐時間} = \frac{\text{掃描時間 (毫秒)}}{\text{同群離子數}}$$

(二) 樣品前處理 (實驗室依需要可調整酸鹼萃取順序)

建議參考表一選擇適當前處理方法，若僅分析鹼性/中性有機化合物，則可省略酸性萃取過程；若僅分析酸性有機化合物，則可省略鹼性

萃取過程。表四及表五列出鹼性/中性及酸性之半揮發性有機化合物。

1. 分液漏斗液相—液相或連續式液相—液相萃取

- (1) 在水樣瓶上標示水平刻度（以試劑水推算分析水樣之體積），將全量水樣倒入 2 L 之分液漏斗中，添加適當濃度之擬似標準品，以 10 M 之氫氧化鈉調 pH 值約至 12，量取 60 mL 二氯甲烷，倒入採樣瓶內沖洗之，然後將洗液倒入分液漏斗，搖動一分鐘，靜置，俟水樣分層後，收集有機層於三角瓶，再重覆二氯甲烷萃取步驟二次，有機層合併收集於三角瓶中。（此為鹼性/中性半揮發性有機化合物之萃取液）
- (2) 剩餘之水層再以 (1+1) 硫酸調 pH 值約至 2，量取 60 mL 二氯甲烷，倒入分液漏斗，搖動一分鐘，靜置，俟水樣分層後，收集有機層於三角瓶，再重覆二氯甲烷萃取步驟二次，有機層合併收集於三角瓶中。（此為酸性半揮發性有機化合物之萃取液）
- (3) 或同 (二) 1. (1)、(2) 節步驟，以連續式液相—液相萃取設備萃取。
- (4) 去水（擇一使用）：鹼性/中性半揮發性有機化合物之萃取液與酸性半揮發性有機化合物之萃取液，分別以下述方式除水後，再合併於濃縮瓶中。
 - a. 無水硫酸鈉去水管柱除水：

置少許玻璃棉於去水玻璃管柱底部，然後加入 5 至 10 cm 高之無水硫酸鈉，將有機萃取液通過此去水玻璃管，收集於圓底燒瓶；再以 20 至 30 mL 之二氯甲烷沖洗三角瓶及玻璃管，合併洗液於濃縮瓶。
 - b. 除水膜去水：如 GoreTex 除水膜。
 - c. 其他類似除水功能之材料或裝置。
- (5) 前處理流程如圖一所示。

2. 固相萃取膜 (Disk) 萃取 (依待測物特性選擇適當材質及沖提條件)

- (1) 自動固相萃取膜裝置可參考圖二。
- (2) 取萃取膜置於萃取膜固定座，並於萃取膜上方放置適當孔徑（1 μm ~ 5 μm ）之玻璃纖維濾紙。
- (3) 在約 1L 之水樣瓶上標示水平刻度（以試劑水推算分析水樣之體積），添加適當濃度之擬似標準品，視待分析之半揮發性有機物項目選擇以酸性、鹼/中性萃取程序。（濾紙上之懸浮物依序以約 10 mL 丙酮及二氯甲烷淋洗或超音波震盪萃取二次，去水後併入有機層上機）。

A. 酸性萃取程序：

- a. 以鹽酸將水樣 pH 值調整約至 2。
- b. 萃取膜依序以丙酮及試劑水進行活化。
- c. 將水樣在不溢出萃取膜固定座之清況下，使水樣通過 HLB 固相萃取膜進行過濾並吸附待測物，收集濾液供鹼/中性萃取程序備用。
- d. 以真空幫浦抽乾萃取膜中水份。
- e. 依序以丙酮及二氯甲烷作為沖提溶劑，收集萃取液於 125 mL 三角錐形瓶（此為酸性萃取液）。

B. 鹼/中性萃取程序：

取前述步驟 c 之濾液以 10M 氫氧化鈉溶液調整 pH 值約至 12，重複 b~e 步驟收集萃取液於 125 mL 三角錐形瓶（此為鹼/中性萃取液）。

- (4) 分別或依序將酸性萃取液、鹼性/中性萃取液進行除水。
 - (5) 合併萃取液並以濃縮裝置進行濃縮，以適當濃縮裝置濃縮萃取液至近乾，以二氯甲烷定容至適當體積。
 - (6) 固相萃取膜萃取流程如圖四所示。
3. 固相萃取管（Cartridge）萃取（依待測物特性選擇適當材質及沖提條件）

- (1) 參考圖三手動固相萃取管裝置進行組合。
- (2) 水樣搖盪混合均勻後，視需要以玻璃纖維濾紙過濾之，收集過濾水樣，在約 1L 之水樣瓶上標示水平刻度（以試劑水推算分析水樣之體積），添加適當濃度之擬似標準品，視待分析之半揮發性有機物項目選擇以酸性、鹼/中性萃取程序及活性碳管柱萃取程序。（濾紙上之懸浮物依序以約 10 mL 丙酮及二氯甲烷淋洗或震盪萃取二次，去水後併入有機層上機）。

A. 酸性萃取程序：

- a. 以 HCl 將水樣 pH 值調整約至 2。
- b. 萃取管柱依序以加入 5 mL 丙酮以 5 mL/min 之速率流洗，待管柱內之丙酮即將抽乾時，再加入 5 mL 試劑水以 5 mL/min 之速率流洗之進行活化。
- c. 水樣以蠕動馬達在約 400 mL/hr 流速下帶動水樣流經 HLB 固相萃取管柱，並收集濾液備用。
- d. 萃取完畢後，將其抽氣約 10 分鐘，儘可能令管柱內之水分抽乾，解除真空。
- e. 於固相萃取管柱裝置內置入適當之試管以收集流洗液，重新組合固相萃取管柱裝置。依序加入 5 mL 丙酮、5 mL 二氯甲烷二次，沖提管柱吸附之半揮發性有機物，並收集沖提液於試管中。

B. 鹼/中性萃取程序：

- a. 取前述步驟 c 之濾液以 NaOH 調整 pH 值約至 12，重複前述步驟 b~e 步驟並收集沖提液於試管中。（此為鹼/中性萃取液）。
- b. 若有回收率（可參考表十~十二）不佳之項目，可收集鹼性濾液再以活性碳管柱萃取程序萃取。

C. 鹼/中性萃取程序：

- a. 取 B 程序中之濾液以 400 mL/hr 流速通過活性碳管柱。

b. 依序以 5 mL 丙酮及 5 mL 二氯甲烷二次為沖提溶劑，收集萃取液於 125 mL 三角錐形瓶（此為活性碳管柱萃取液）。

(3) 分別或依序將酸性萃取液、鹼性/中性萃取液進行除水。

(4) 合併萃取液並以濃縮裝置進行濃縮，以適當濃縮裝置濃縮萃取液至近乾，以二氯甲烷定容至適當體積。

(5) 固相萃取管萃取流程如圖五所示。

(三) 績效測試及建立檢量線

1. DFTPP 績效測試及拖尾因子 (Tailing Factor) 確認：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六 之要求，且五氯酚及聯苯胺之尖峰拖尾因子須小於 2，若不符合要求，則須重新調整儀器狀態，至符合為止。此一分析應每 12 小時執行乙次。

$$\text{Tailing Factor} = \frac{BC}{AB}$$

尖峰高度為 DE，10% 高寬為 AC（A 在左，C 在右），AC 交 DE 於 B（如圖七）。

2. 系統績效查核測試：系統績效查核可確保達到最小的平均感應因子。在建立檢量線前，可先執行系統績效查核工作，選擇系統績效查核化合物 (SPCC) 可接受之最小平均感應因子為 0.050 (2,4-dinitrophenol 最低濃度之 RF 可不列入計算)。這些績效查核化合物，通常有較低的感應因子 (0.1 ~ 0.2)，且在層析系統或標準物質衰退時，最先出現降低的現象，因此當它們出現不正常時，須重新校正系統。並於進行樣品分析時，每 12 小時查核一次系統績效查核化合物。依下式計算感應因子 (Response factor, RF)：

$$\text{RF} = \frac{(A_s)(C_{is})}{(A_{is})(C_s)}$$

其中： A_s = 化合物特性離子之感應訊號

A_{is} = 內標準品特性離子之感應訊號

C_{is} = 內標準品之濃度 (mg/L)

C_s = 化合物之濃度 (mg/L)

3. 檢量線製作

以二氯甲烷稀釋半揮發性有機化合物之中間標準溶液，配製至少 5 種不同濃度之檢量線標準溶液，最低一點標準品的濃度宜與方法定量極限（約為 3 倍方法偵測極限）之濃度相當。每一濃度之檢量線標準溶液，於上機前需添加一定量（如：40 mg/L）的內標準品。注入 1 μ L（建議值）於氣相層析質譜儀中，以尖峰感應訊號面積或高度對化合物濃度及內標準品濃度計算感應因子。

依下式計算相對標準偏差：

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

其中 RSD：相對標準偏差

\overline{RF} ：檢量線標準溶液中每一個化合物的平均感應因子

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

RF_i ：檢量線標準溶液中，每一種濃度的感應因子

SD：每一化合物平均感應因子的標準偏差

若每一化合物之 RSD% 小於 25% 則其相對感應因子在其校正濃度範圍內可視為常數，如此可用平均感應因子進行定量。若某一化合物之 RSD% 大於 25%，則以訊號比 (A/A_{is}) 對濃度之一次或高次迴歸方式，繪製至少 5 點的校正濃度圖，其相關係數需大於或等於 0.99，使其定量時誤差最小。

檢量線製備完成，應即以第二來源標準品配製接近檢量線中點濃度之標準品（若無第二來源標準品時，至少應使用另一獨立配製之標準品）進行確認，其相對誤差需小於 30%。

4. 化合物查核測試：分析前及每 12 小時需以含有欲分析之半揮發性化合物的中點濃度標準溶液及擬似標準品以查核起始檢量線。若每一待測化合物之相對誤差值 (D) 在±30%內，則起始校正檢量線仍可使用，若有任一待測化合物相對誤差值大於前述規範，便須採取修正動作；若修正措施後仍無法找出問題，則須重新製作五點檢量線。

(1) 以感應因子計算化合物濃度：

$$D(\%) = (\text{RF} - \overline{\text{RF}}) \div \overline{\text{RF}} \times 100$$

$\overline{\text{RF}}$ ：起始校正標準品之平均感應因子

RF：待測化合物之感應因子

(2) 以迴歸方式計算化合物濃度：

$$D(\%) = \frac{\text{MA} - \text{TA}}{\text{TA}} \times 100$$

MA：待測化合物經檢量線計算所得濃度

TA：待測化合物之配製濃度

(四) 樣品分析

1. 樣品分析前，可先以相同層析管柱之 GC/FID 或 GC/PID 加以篩檢測試，此動作可減少氣相層析質譜儀，因高濃度有機化合物導致之污染。
2. 樣品上機前，先將定容之萃取液，回復至室溫，取適量體積，添加一定量（如：40 mg/L）的內標準品。
3. 以和建立檢量線相同之操作條件分析樣品。
4. 樣品上機分析流程如圖六所示。

八、結果與處理（註 2）

(一) 定性分析

1. 定性分析之原則，是以樣品與標準品之特性離子圖譜比較，且須符合下列條件：

(1)同一化合物各特性離子，必須在同一掃描或前後一個掃描之下強度達到最大值。

(2)待測物與標準品的相對滯留時間 (Relative retention time, RRT) 的差異必須在 ± 0.06 RRT 以內。

$$RRT = RT_s / RT_{is}$$

RT_s ：待測化合物之滯留時間。

RT_{is} ：對應內標準品之滯留時間。

(3)各特性離子的相對強度，必須與參考質譜的相對強度差異在 $\pm 30\%$ 以內。參考質譜可取自此氣相層析質譜所分析之標準品或參考資料庫。

2. 當同分異構物具相當類似的質譜時，則應視兩者在標準品分析圖譜的解析度是否可以接受，作為確認的依據；如果基線到峰谷間的高度小於最近波峰高度的 25%，則認為此兩異構物解析度，可接受且可分別定量；否則應判定其為所有異構物之總量。

(二) 定量分析

當確認一化合物後，可用表七中所列化合物之主要特性離子積分定量，如果主要特性離子在樣品中遭受干擾，可採用次要特性離子來定量。待測物濃度計算方式如下：

1. RSD% 小於 25% 時，使用內標準法定量：

$$\text{濃度 } (\mu\text{g/L}) = \frac{(A_s)(C_{is})(V_{ex})}{(A_{is})(RF)(V_o)}$$

其中：

A_s = 待測化合物特性離子之感應訊號

A_{is} = 內標準品特性離子之感應訊號

C_{is} = 內標準品之濃度 (mg/L)

V_o = 萃取水樣之體積 (L)

V_{ex} = 定容體積 (mL)

\overline{RF} = 平均感應因子

2. RSD%大於 25%時，使用一次或高次迴歸之曲線定量（其相關係數需大於或等於 0.99）：

$$\text{濃度 } (\mu\text{g/L}) = \frac{(C_{ex})(V_{ex})}{(V_o)}$$

其中：

C_{ex} = 一次或高次迴歸曲線計算出之萃取液濃度 (mg/L)

V_o = 萃取水樣之體積 (L)

V_{ex} = 定容體積 (mL)

九、品質管制

(一) 品管計畫：任何使用本方法之檢驗室，均應有一正式的品質管制計畫，此計畫的最低要求為檢驗室，應證實其具有能力以此方法分析樣品。實驗室可以在試劑水中添加適當濃度之待測物，建立其準確度及精密度的要求，並在後續分析中證實其一貫能力，這些紀錄都應予以保存。

(二) 品管樣品分析：

1. 空白樣品分析：每批次樣品（當該批樣品少於 10 個時）或每 10 個樣品至少執行 1 個空白分析，空白樣品分析值應小於 2 倍方法偵測極限。
2. 查核樣品分析：分析以空白樣品為基質，且加入適量的標準溶液及擬似標準溶液，計算其回收率；其頻率為每批次或每 10 個樣品執行 1 個查核樣品分析。
3. 重複樣品分析：每批次或每 10 個樣品執行 1 個重複樣品分析。
4. 添加樣品分析：添加適量標準溶液或擬似標準溶液到真實樣品中，其頻率為每批次或每 10 個樣品中應做 1 個樣品添加，並計算其回收率。

5. 擬似標準品的回收率：必要時實驗室應評估樣品中擬似標準品的回收率，並與本身所建立的品管要求比較，觀察有無異常情況出現。表八為單一實驗室驗證所得擬似標準品回收率與美國環保署 CLP 管制範圍的比較表。
6. 內標準品監測：在同一 12 小時批次內，樣品中每一個內標準品的滯留時間與檢量線標準溶液中點濃度之內標準品滯留時間比較，差異應在 $\pm 0.4\%$ 以內，而其離子尖峰面積變異，則應在 $-50\% \sim +100\%$ 之間。當發現超出標準時，須立即尋找原因並加以修正。

十、準確度與精密度

- (一) 表九為單一實驗室半揮發性有機化合物之方法偵測極限及特性離子。
- (二) 表十為單一實驗室檢測之精密度及準確度。半揮發性有機化合物之氣相層析圖如圖八所示。
- (三) 表十一為單一實驗室以分液漏斗液相-液相及連續式液相-液相萃取檢測水中總毒性有機物 (TTO) 之精密度及準確度。
- (四) 表十二為單一實驗室以自動固相萃取膜 (Disk) 檢測水中半揮發性有機化合物之精密度及準確度。

十一、參考資料

- (一) 行政院環境保護署，層析檢測方法總則，NIEA M150。中華民國 91 年。
- (二) 行政院環境保護署，分液漏斗液相-液相萃取法，NIEA R161。中華民國 91 年。
- (三) 行政院環境保護署，連續式液相-液相萃取法，NIEA R171。中華民國 91 年。
- (四) 行政院環境保護署，固相萃取方法，NIEA M188。中華民國 93 年。
- (五) U.S.EPA. Method for Organic Chemical Analysis of Municipal and Industrial Wastewater. Method 625,, 2002.
- (六) 翁英明等，1994，廢污水中半揮發性有機污染物先期調查，環保署環境檢驗所調查研究年報第二號。

- (七) 翁英明等，1995，廢污水中半揮發性有機污染物調查研究（二），環保署環境檢驗所調查研究年報第三號。
- (八) U.S.EPA. SW-846, Method 8270D, Semivolatile Organic Compounds by Gas Chromatography/Mass Spectrometry (GC/MS), 2008.
- (九) U.S.EPA. SW-846, Method 3535A, Solid-Phase Extraction (SPE), 2007.
- (十) U.S.EPA. Contract Laboratory Program Statement of Work for Organic Analysis, Multi-Media, Multi-Concentration. Document OLM01.0-OLM01.8, August 1991.
- (十一) Horizon Technology, Inc., Determination of Semivolatile Organic Compounds in Water Using the Atlantic™ HLB SPE Disk and Carbon Cartridge for EPA Method 8270D, Applications Notebook:AN035-091221, October 2010.

註1：本檢驗相關樣品廢液，依含鹵素有機溶劑廢液處理。

註2：當有特定檢測需求時得選擇適當方式計算樣品濃度，一些化合物具多個結構異構物，如壬基酚（NP）、鄰苯二甲酸二異壬酯（DINP）及鄰苯二甲酸二異癸酯（DIDP）等化合物，須以特定離子定性定量。

表一 適用檢測之化合物

化合物	CAS No	合宜前處理技術		
		R106	R107	M188
Acenaphthene	83-32-9	✓	✓	✓
Acenaphthene-d ₁₀ (I.S.)		✓	✓	✓
Acenaphthylene	208-96-8	✓	✓	✓
Acenaphenone	98-86-2	✓	N	✓
2-Acetylaminofluorene	53-96-3	✓	N	N
1-Acetyl-2-thiourea	591-08-2	LR	N	N
Aldrin	309-00-2	✓	✓	N
2-Aminoanthraquinone	117-79-3	✓	N	N
Aminoazobenzene	60-09-3	✓	N	N
4-Aminobiphenyl	92-67-1	✓	N	LR
3-Amino-9-ethylcarbazole	132-32-1	✓	✓	N
Anilazine	101-05-3	✓	N	N
Aniline	62-53-3	✓	✓	LR
o-Anisidine	90-04-0	✓	N	N
Anthracene	120-12-7	✓	✓	✓
Aramite	140-57-8	HS	N	N
Aroclor-1016	12674-11-2	✓	✓	N
Aroclor-1221	11104-28-2	✓	✓	N
Aroclor-1232	11141-16-5	✓	✓	N
Aroclor-1242	53469-21-9	✓	✓	N
Aroclor-1248	12672-29-6	✓	✓	N
Aroclor-1254	11097-69-1	✓	✓	N
Aroclor-1260	11096-82-5	✓	✓	N
Azinphos-methyl	86-50-0	HS	N	N
Barban	101-27-9	LR	N	N
Benzidine	92-87-5	CP	CP	✓
Benzoicacid	65-85-0	✓	✓	✓
Benz(a)anthracene	56-55-3	✓	✓	✓
Benzo(b)fluoranthene	205-99-2	✓	✓	✓
Benzo(k)fluoranthene	207-08-9	✓	✓	✓
Benzo(g,h,i)perylene	191-24-2	✓	✓	✓
Benzo(a)pyrene	50-32-8	✓	✓	✓
p-Benzoquinone	106-51-4	OE	N	N
Benzylalcohol	100-51-6	✓	✓	✓

化合物	CAS No	合宜前處理技術		
		R106	R107	M188
α -BHC	319-84-6	✓	✓	N
β -BHC	319-85-7	✓	✓	N
δ -BHC	319-86-8	✓	✓	N
γ -BHC(Lindane)	58-89-9	✓	✓	N
Bis(2-chloroethoxy)methane	111-91-1	✓	✓	✓
Bis(2-chloroethyl)ether	111-44-4	✓	✓	✓
Bis(2-chloroisopropyl)ether	108-60-1	✓	✓	✓
Bis(2-ethylhexyl)phthalate	117-81-7	✓	✓	✓
4-Bromophenylphenylether	101-55-3	✓	✓	✓
Bromoxynil	1689-84-5	✓	N	N
Butylbenzylphthlate	85-68-7	✓	✓	✓
Captafol	2425-06-1	HS	N	N
Captan	133-06-2	HS	N	N
Carbaryl	63-25-2	✓	N	N
Carbofuran	1563-66-2	✓	N	N
Carbophenothion	786-19-6	✓	N	N
Chlordane	57-74-9	✓	✓	N
Chlorfenvinphos	470-90-6	✓	N	N
4-Chloroaniline	106-47-8	✓	N	✓
Chlorobenzilate	510-15-6	✓	N	N
5-Chloro-2-methylaniline	95-79-4	✓	N	N
4-Chloro-3-methylphenol	59-50-7	✓	✓	✓
3-(Chloromethyl)pyridine hydrochloride	6959-48-4	✓	N	N
1-Chloronaphthalene	90-13-1	✓	✓	N
2-Chloronaphthalene	91-58-7	✓	✓	✓
2-Chloronaphenol	95-57-8	✓	✓	✓
4-Chloro-1,2-phenylenediamine	95-83-0	✓	✓	N
4-Chloro-1,3-phenylenediamine	5131-60-2	✓	✓	N
4-Chlorophenyl phenyl ether	7005-72-3	✓	✓	N
Chrysene	218-01-9	✓	✓	✓
Chrysene-d ₁₂ (I.S.)		✓	✓	✓
Coumaphos	56-72-4	✓	N	N
p-Cresidine	120-71-8	✓	N	N

化合物	CAS No	合宜前處理技術		
		R106	R107	M188
Crotoxyphos	7700-17-6	✓	N	N
2-Cyclohexyl-4,6-dinitro-phenol	131-89-5	✓	N	N
4,4'-DDD	72-54-8	✓	✓	N
4,4'-DDE	72-55-9	✓	✓	N
4,4'-DDT	50-29-3	✓	✓	N
Demeton-O	298-03-3	HS	N	N
Demeton-S	126-75-0	✓	N	N
Diallate (cis or trans)	2303-16-4	✓	N	N
2,4-Diaminotoluene	95-80-7	DX,OE	N	N
Dibenz(a,j)acridine	224-42-0	✓	N	N
Dibenz(a,h)anthracene	53-70-3	✓	✓	✓
Dibenzofuran	132-64-9	✓	✓	✓
Dibenzo(a,e)pyrene	192-65-4	N	N	N
1,2-Dibromo-3-chloropropane	96-12-8	✓	✓	N
Di-n-butyl phthalate	84-74-2	✓	✓	✓
Dichlone	117-80-6	OE	N	N
1,2-Dichlorobenzene	95-50-1	✓	✓	✓
1,3-Dichlorobenzene	541-73-1	✓	✓	✓
1,4-Dichlorobenzene	106-46-7	✓	✓	✓
1,4-Dichlorobenzene-d ₄ (I.S)		✓	✓	✓
3,3'-Dichlorobenzidine	91-94-1	✓	✓	LR
2,4-Dichlorophenol	120-83-2	✓	✓	✓
2,6-Dichlorophenol	87-65-0	✓	N	✓
Dichlorovos	62-73-7	✓	N	N
Dicrotophos	141-66-2	✓	N	N
Dieldrin	60-57-1	✓	✓	N
Diethylphtharate	84-66-2	✓	✓	✓
Diethylstilbestrol	56-53-1	AW,OS	N	N
Diethylsulfate	64-67-5	LR	N	N
Dihydrosaffrole	56312-13-1	N	N	N
Dimethoate	60-51-5	HE,HS	N	N
3,3'-Dimethoxybenzidine	119-90-4	✓	N	N
Dimethylaminoazobenzene	60-11-7	✓	N	✓
7-12-Dimethylbenz(a)anthracene	57-97-6	CP	N	N

化合物	CAS No	合宜前處理技術		
		R106	R107	M188
3,3'-Dimethylbenzidine	119-93-7	✓	N	LR
Dimethylaminoazobenzene	60-11-7	✓	N	N
α,α -Dimethylphenethylamine	122-09-8	N	N	N
2,4-Dimethylophenol	105-67-9	✓	✓	✓
Dimethyl phthalate	131-11-3	✓	✓	✓
1,2-Dinitrobenzene	528-29-0	✓	N	✓
1,3-Dinitrobenzene	99-65-0	✓	N	✓
1,4-Dinitrobenzene	100-25-4	HE	N	✓
4,6-Dinitro-2-methylphenol	534-52-1	✓	✓	✓
2,4-Dinitrophenol	51-28-5	✓	✓	✓
2,4-Dinitrotoluene	121-14-2	✓	✓	✓
2-6-Dinitrotoluene	606-20-2	✓	✓	✓
Dinocap	39300-45-3	CP,HS	N	N
Dinoseb	88-85-7	✓	N	✓
Dioxathion	78-34-2	N	N	N
Diphenylamine	122-39-4	✓	✓	✓
5,5-Diphenylhydantoin	57-41-0	✓	N	N
1,2-Diphenylhydrazine	122-66-7	✓	✓	N
Di-n-octyl phthalate	117-84-0	✓	✓	✓
Disulfoton	298-04-4	✓	N	N
Endosulfan I	959-98-8	✓	✓	N
Endosulfan II	33213-65-9	✓	✓	N
Endosulfan sulfate	1031-07-8	✓	✓	N
Endrin	72-20-8	✓	✓	N
Endrin aldehyde	7421-93-4	✓	✓	N
Endrin ketone	53494-70-5	✓	✓	N
EPN	2104-64-5	✓	N	N
Ethion	563-12-2	✓	N	N
Ethyl carbamate	51-79-6	DC	N	N
Ethylmethane sulfonate	62-50-0	✓	N	✓C
Ethyl parathion	56-38-2	✓	✓	N
Famphur	52-85-7	✓	N	N
Fensulfothion	115-90-2	✓	N	N
Fenthion	55-38-9	✓	N	N

化合物	CAS No	合宜前處理技術		
		R106	R107	M188
Fluchloralin	33245-39-5	✓	N	N
Fluoranthene	206-44-0	✓	✓	✓
Fluorene	86-73-7	✓	✓	✓
2-Fluorobiphenyl(surr.)	321-60-8	✓	✓	✓
2-Fluorophenol(surr.)	367-12-4	✓	✓	✓
Heptachlor	76-44-8	✓	✓	N
Heptachlor epoxide	1024-57-3	✓	✓	N
Hexachlorobenzene	118-74-1	✓	✓	✓
Hexachlorobutadiene	87-68-3	✓	✓	✓
Hexachlorocyclopentadiene	77-47-4	✓	✓	✓
Hexachloroethane	67-72-1	✓	✓	✓
Hexachlorophene	70-30-4	AW,CP	N	✓
Hexachloropropene	1888-71-7	✓	N	N
Hexamethylphosphoramide	680-31-9	✓	N	N
Hydroquinone	123-31-9	N	N	N
Indeno(1,2,3-cd)pyrene	193-39-5	✓	✓	✓
Isodrin	465-73-6	✓	N	N
Isophorone	78-59-1	✓	✓	✓
Isosafrole	120-58-1	DC	N	N
Kepon	143-50-0	✓	N	N
Leptophos	21609-90-5	✓	N	N
Malathion	121-75-5	HS	N	N
Maleic anhydride	108-31-6	HE	N	N
Mestranol	72-33-3	✓	N	N
Methapyrilene	91-80-5	✓	N	LR
Methoxychlor	72-43-5	✓	N	N
3-Methylcholanthrene	56-49-5	✓	N	N
4,4'-Methylenebis (2-chloroaniline)	101-14-4	OE,OS	N	N
4,4'-Methylenebis (N,N-dimethylaniline)	(N,N- 101-61-1	✓	✓	N
Methylmethane sulfonate	62-27-3	✓	N	LR
2-Methyl naphthalene	91-57-6	✓	✓	✓
2-Methyl-5-nitroaniline	99-55-8	✓	✓	N

化合物	CAS No	合宜前處理技術		
		R106	R107	M188
Methylparathion	298-00-0	✓	N	N
2-Methyl phenol	95-48-7	✓	N	✓
3-Methyl phenol	108-39-4	✓	N	✓
4-Methyl phenol	106-44-5	✓	N	✓
2-Methyl pyridine	109-06-8	✓	✓	N
Mevinphos	7786-34-7	✓	N	N
Mexacarbate	315-18-4	HE,HS	N	N
Mirex	2385-85-5	✓	N	N
Monocrotophos	6923-22-4	HE	N	N
Naled	300-76-5	✓	N	N
Naphthalene	91-20-3	✓	✓	✓
Naphthalene-d ₈ (I.S.)		✓	✓	✓
1,4-Naphthoquinone	130-15-4	✓	N	N
1-Naphthylamine	134-32-7	OS	N	LR
2-Naphthylamine	91-59-8	✓	N	✓
Nicotine	54-11-5	DE	N	N
5-Nitroacenaphthene	602-87-9	✓	N	N
2-Nitroaniline	88-74-4	✓	✓	✓
3-Nitroaniline	99-09-2	✓	✓	✓
4-Nitroaniline	100-01-6	✓	✓	✓
5-Nitro-o-anisidine	99-59-2	✓	N	N
Nitrobenzene	98-95-3	✓	✓	✓
Nitrobenzene-d ₅ (surr.)		✓	✓	✓
4-Nitrobiphenyl	92-93-7	✓	N	N
Nitrofen	1836-75-5	✓	N	N
2-Nitrophenol	88-75-5	✓	✓	✓
4-Nitrophenol	100-02-7	✓	✓	✓
5-Nitro-o-toluidine	99-55-8	✓	N	✓
Nitroquinoline-l-oxide	56-57-5	✓	N	N
N-Nitrosodi-n-butylamine	924-16-3	✓	N	✓
N-Nitrosodiethylamine	55-18-5	✓	N	✓C
N-Nitrosodimethylamine	62-75-9	✓	✓	✓
N-Nitrosomethylethylamine	10595-95-6	✓	N	✓C
N-Nitrosodiphenylamine	86-30-6	✓	✓	N

化合物	CAS No	合宜前處理技術		
		R106	R107	M188
N-Nitrosodi-n-propylamine	621-64-7	✓	✓	✓
N-Nitrosomorpholine	59-89-2	N	N	N
N-Nitrosopiperidine	100-75-4	✓	N	✓
N-Nitrosopyrrolidine	930-55-2	✓	N	N
Octamethyl pyrophosphoramidate	152-16-9	LR	N	N
4,4'-Oxydianiline	101-80-4	✓	N	N
Parathion	56-38-2	✓	N	N
Pentachlorobenzene	608-93-5	✓	N	✓
Pentachloronitrobenzene	82-68-8	✓	N	✓
Pentachlorophenol*	87-86-5	✓	✓	✓
Perylene-d ₁₂ (I.S.)		✓	✓	✓
Phenactin	62-44-2	✓	N	N
Phenanthrene	85-01-8	✓	✓	✓
Phenanthrene-d ₁₀ (I.S.)		✓	✓	✓
Phenobarbital	50-06-6	✓	N	N
Phenol	108-95-2	DC	✓	✓
Phenol-d ₆ (surr.)		DC	✓	✓
1,4-Phenylenediamine	106-50-3	✓	N	N
Phorate	298-02-2	✓	N	N
Phosalone	2310-17-0	HS	N	N
Phosmet	732-11-6	HS	N	N
Phosphamidon	13171-21-6	HE	N	N
Phthalic anhydride	85-44-9	CP,HE	N	N
2-Picoline	109-06-8	N	N	LR
Piperonyl sulfoxide	120-62-7	✓	N	N
Pronamide	23950-58-5	✓	N	N
Propylthiouracil	51-52-5	LR	N	N
Pyrene	129-00-0	✓	✓	N
Pyridine	110-86-1	N	N	LR
Resorcinol	108-46-3	DC,OE	N	N
Safrole	94-59-7	✓	N	N
Strychnine	60-41-3	AW,OS	N	N
Sulfallate	95-06-7	✓	N	N
Terbufos	13071-79-9	✓	N	N

化合物	CAS No	合宜前處理技術		
		R106	R107	M188
Terphenyl-d ₁₄ (surr.)	1718-51-0	✓	✓	N
1,2,4,5-Tetrachlorobenzene	95-94-3	✓	N	✓
2,3,4,6-Tetrachlorophenol	58-90-2	✓	N	✓
Tetrachlorvinphos	961-11-5	✓	N	N
Tetraethyldithiopyrophosphate	3689-24-5	✓	✓	N
Tetraethylpyrophosphate	107-49-3	✓	N	N
Thionazine	297-97-2	✓	N	N
Thiophenol(Benzenethiol)	108-98-5	✓	N	N
Toluenediisocyanate	584-84-9	HE	N	N
o-Toluidine	95-53-4	✓	N	N
Toxaphene	8001-35-2	✓	✓	N
2,4,6-Tribromophenol(surr.)		✓	✓	N
1,2,4-Trichlorobenzene	120-82-1	✓	✓	N
2,4,5-Trichlorophenol	95-95-4	✓	✓	N
2,4,6-Trichlorophenol	88-06-2	✓	✓	N
Trifluralin	1582-09-8	✓	N	N
2,4,5-Trimethylaniline	137-17-7	✓	N	N
Trimethylphosphate	512-56-1	HE	N	N
1,3,5-Trinitrobenzene	99-35-4	✓	N	N
Tris(2,3-dibromopropyl) phosphate	126-72-7	✓	N	N
Tri-p-tolyl phosphate	78-32-0	✓	N	N
O,O,O-Triethyl phosphorothioate	126-68-1	✓	N	N

註：美國環保署方法8270D

AW：於萃取及貯存時吸附於玻璃器皿之壁上

CP：層析圖譜無再現性

DC：分配係數較差

HE：萃取時會因酸、鹼而加速水解

HS：貯存時水解

LR：低感應

N：未測定

OE：萃取時，會因鹼而加速氧化

OS：貯存時會氧化

✓：以此技術可得大於70%回收率，M188方法不含活性碳管柱萃取

✓c：以此技術可得大於70%回收率，M188方法含活性碳管柱萃取

NIEA R106：分液漏斗液相-液相萃取法

NIEA R107：連續式液相-液相萃取法

NIEA M188：固相萃取法

*：本方法所測得五氯酚係含五氯酚及其鹽類。

表二 半揮發性有機物之內標準品及擬似標準品

內標準品	酸性半揮發性有機物之擬似標準品	鹼性/中性半揮發性有機物之擬似標準品
Acenaphthene-d10	2-Fluorophenol	2-Fluorobiphenyl
Chrysene-d12	Phenol-d6、d5	Nitrobenzene-d5
1,4-Dichlorobenzene-d4	2,4,6-Tribromophenol	Terphenyl-d14
Naphthalene-d8		
Perylene-d12		
Phenanthrene-d10		

表三 半揮發性有機物參考對應之內標準品

1,4-Dichlorobenzene-d ₄	Naphthalene-d ₈	Acenaphthene-d ₁₀
Aniline	Acetophenone	Acenaphthene
Benzyl alcohol	Benzoic acid	Acenaphthylene
Bis(2-chloroethyl)ether	Bis(2-chloroethoxy)methane	1-Chloronaphthalene
Bis(2-chloroisopropyl)ether	4-Chloroaniline	2-Chloronaphthalene
2-Chlorophenol	4-Chloro-3-methylphenol	4-Chlorophenyl phenyl ether
1,3-Dichlorobenzene	2,4-Dichlorophenol	Dibenzofuran
1,4- Dichlorobenzene	2,6-Dichlorophenol	Diethyl phthalate
1,2- Dichlorobenzene	α,α -Dimethylphenethylamine	Dimethyl phthalate
Ethyl methanesulfonate	2,4-Dimethylphenol	2,4-Dinitrophenol
2-Fluorophenol (surr)	Hexachlorobutadiene	2,4-Dinitrotoluene
Hexachloroethane	Isophorone	2,6-Dinitrotoluene
Methyl methanesulfonate	2-Methylnaphthalene	Fluorene
2-Methylphenol	Naphthalene	2-Fluorobiphenyl (surr)
4-Methylphenol	Nitrobenzene	Hexachlorocyclopentadiene
N-Nitrosodimethylamine	Nitrobenzene-d ₈ (surr)	1-Naphthylamine
N-Nitroso-di-n-propylamine	2-Nitrophenol	2-Naphthylamine
Phenol	N-Nitrosodi-n-butylamine	2-Nitroaniline
Phenol-d ₆ (surr)	N-Nitrosopiperdine	3-Nitroaniline
2-Picoline	1,2,4-Trichlorobenzene	4-Nitroaniline
		4-Nitrophenol
		Pentachlorobenzene
		1,2,4,5-Tetrachlorobenzene
		2,3,4,6-Tetrachlorophenol
		2,4,6-Tribromophenol (surr)
		2,4,6-Trichlorophenol
		2,4,5-Trichlorophenol

Phenanthrene-d ₁₀	Chrysene-d ₁₂	Perylene-d ₁₂
4-Aminobiphenyl	Benzidine	Benzo(b)fluoranthene
Anthracene	Benzo(a)anthracene	Benzo(k)fluoranthene
4-Bromophenyl phenyl ether	Bis(2-ethylhexyl)phthalate	Benzo(g,h,i)perylene
Di-n-butyl phthalate	Butyl benzyl phthalate	Benzo(a)pyrene
4,6-Dinitro-2-methyl-phenol	Chrysene	Dibenz(a,j)acridine
Diphenylamine	3,3'-Dichlorobenzidine	Dibenz(a,h)anthracene
Fluoranthene	p-Dimethylaminoazobenzene	Ideno(1,2,3-cd)pyrene
Hexachlorobenzene	Pyrene	Bis(2-ethylhexyl) adipate
N-Nitrosodiphenylamine	Terphenyl-d14(surr)	
Pentachlorophenol	7,12-Dimethylbenz(a)anthracene	
Pentachloronitrobenzene	Di-n-octyl phthalate	
Phenacetin	3-Methylcholanthrene	
Phenanthrene	Bisphenol A	
Pronamide		
Nonylphenol		

表四 鹼性／中性半揮發性有機化合物

鹼性/中性半揮發性有機化合物	鹼性/中性半揮發性有機化合物
Acenaphthene	2,6-Dinitrotoluene
Acenaphthylene	Di-n-Octylphthalate
Anthracene	Fluoranthene
Benzo(a)anthracene	Fluorene
Benzo(b)fluoroanthene	Hexachlorobenzene
Benzo(k)fluoroanthene	Hexachlorobutadiene
Benzo(ghi)perylene	Hexachlorocyclopentadiene
Benzo(a)pyrene	Hexachloroethane
Benzidine	Indeno(1,2,3,-cd)pyrene
Butyl benzyl phthalate	Isophorone
Bis(2-chloroethoxy)methane	Naphthalene
Bis(2-chloroethyl)ether	Nitrobenzene
Bis(2-chloroisopropyl)ether	N-Nitrosodi-n-propylamine
Bis(2-ethylhexyl)phthalate	N-Nitrosodiphenylamine
4-Bromophenyl phenyl ether	N-Nitrosodimethylamine
2-Chloronaphthalene	Phenanthrene
4-Chlorophenyl phenyl ether	Pyrene
Carbazole	Aniline
Chrysene	Azobenzene
Dibenzo(a,h)anthracene	1,2-Diphenylhydrazine
Di-n-butyl phthalate	Benzyl alcohol
1,2-Dichlorobenzene	4-Chloroaniline
1,3-Dichlorobenzene	Dibenzofuran
1,4-Dichlorobenzene	2-Methylnaphthalene
3,3'-Dichlorobenzidine	2-Nitroaniline
Diethylphthalate	3-Nitroaniline
Dimethyl phthalate	Nitroaniline
2,4-Dinitrotoluene	1,2,4-Trichlorobenzene

表五 酸性半揮發性有機化合物

酸性半揮發性有機化合物	酸性半揮發性有機化合物
4-Chloro-3-methylphenol	2,2-Methyl-4,6-dinitrophenol
Methylphenol	4-Nitrophenol
2-Chlorophenol	4-Nitrophenol
Methylphenol	Pentachlorophenol
2,4-Dichlorophenol	Phenol
Trichlorophenol	2,4,6-Trichlorophenol
2,4-Dimethylphenol	Nonylphenol
Acid	Bisphenol A
2,4-Dinitrophenol	Bis(2-ethylhexyl) adipate

表六 DFTPP 質量強度要求標準

Mass	m/z Abundance Criteria
51	30-60 percent of Mass 198
68	Less than 2 percent of Mass 69
70	Less than 2 percent of Mass 69
127	40-60 percent of Mass 198
197	Less than 1 percent of Mass 198
198	Base peak, 100 percent relative abundance
199	5-9 percent of Mass 198
275	10-30 percent of Mass 198
365	Greater than 1 percent of Mass 198
441	Present but less than Mass 443
442	Greater than 40 percent of Mass 198
443	17-23 percent of Mass 442

表七 半揮發性化合物之特性離子

化合物	主要離子	次要離子
2-Picoline	93	66,92
Aniline	93	66,65
Phenol	94	66,66
Bis (2-chloroethyl) ether	93	63,95
2-Chlorophenol	128	64,130
1,3-Dichlorobenzene	146	148,111
1,4-Dichlorobenzene-d ₄ (I.S.)	152	150,115
1,4-Dichlorobenzene	146	148,111
Benzyl alcohol	108	79,77
1,2-Dichlorobenzene	146	148,111
N-Nitrosomethylethylamine	88	42,88,43,56
Bis (2-chloroisopropyl) ether	45	71,121
Ethyl carbamate	62	62,44,45,74
Thiophenol (Benzenethiol)	110	110,66,109,84
Methyl methanesulfonate	80	80,79,65,95
N-Nitrosodi-n-propylamine	70	42,101,130
Hexachloroethane	117	201,199
Maleic anhydride	54	54,98,53,44
Nitrobenzene	77	123,65
Isophorone	82	95,138
N-Nitrosodiethylamine	102	102,42,57,44,56
2-Nitrophenol	139	109,65
2,4-Dimethylphenol	122	107,121
p-Benzoquinone	108	54,108,82,80
Bis (2-chloroethoxy) methane	93	95,123
Benzoic acid	122	105,77
2,4-Dichlorophenol	162	164,98
Trimethyl phosphate	110	110,79,95,109,140
Ethyl methanesulfonate	79	79,109,97,45,65
1,2,4-Trichlorobenzene	180	182,145
Naphthalene-d ₈ (I.S.)	136	68
Naphthalene	128	129,127
Hexachlorobutadiene	225	223,227
Tetraethyl pyrophosphate	99	99,155,127,81,109

化合物	主要離子	次要離子
4-Chloro-3-methylphenol	107	144,142
2-Methylnaphthalene	142	141
2-Methylphenol	107	107,108,77,79,90
Hexachloropropene	213	213,211,215,117,106,141
Hexachlorocyclopentadiene	237	235,272
N-Nitrosopyrrolidine	100	100,41,42,68,69
Acetophenone	105	71,105,51,120
2,4,6-Trichlorophenol	196	198,200
o-Toluidine	106	106,107,77,51,79
3-Methylphenol	107	107,108,77,79,90
2-Chloronaphthalene	162	127,164
N-Nitrosopiperidine	114	42,114,55,56,41
1,4-Phenylenediamine	108	108,80,53,54,52
1-Chloronaphthalene	162	127,164
2-Nitroaniline	65	92,138
5-Chloro-2-methylaniline	106	106,141,140,77,89
Dimethyl phthalate	163	194,164
Acenaphthylene	152	151,153
2,6-Dinitrotoluene	165	63,89
Phthalic anhydride	104	104,76,50,148
o-Anisidine	108	80,108,123,52
3-Nitroaniline	138	108,92
Acenaphthene-d10 (I.S.)	164	162,160
Acenaphthene	154	153,152
2,4-Dinitrophenol	184	63,154
2,6-Dinitrophenol	162	162,164,126,98,63
4-Chloroaniline	127	127,129,65,92
Isosafrole	162	162,131,104,77,51
Dibenzofuran	168	139
2,4-Diaminotoluene	121	121,122,94,77,104
2,4-Dinitrotoluene	165	63,89
4-Nitrophenol	139	109,65
2-Naphthylamine	143	115,116
1,4-Naphthoquinone	158	158,104,102,76,50,130

化合物	主要離子	次要離子
Cresidine	122	122,94,137,77,93
Dichlorovos	109	109,185,79,145
Diethyl phthalate	149	177,150
Fluorene	166	165,167
2,4,5-Trimethylaniline	120	120,135,134,91,77
N-Nitrosodibutylamine	84	84,57,41,116,158
4-Chlorophenyl phenyl ether	204	206,141
Hydroquinone	110	110,81,53,55
4,6-Dinitro-2-methylphenol	198	51,105
Resorcinol	110	110,81,82,53,69
N-Nitrosodiphenylamine	169	168,167
Safrole	162	162,162,104,77,103,135
Hexamethyl phosphoramidate	135	135,44,179,92,42
3-Chloromethyl pyridine hydrochloride	92	92,127,129,65,38
Diphenylamine	169	168,167
1,2,4,5-Tetrachlorobenzene	216	216,214,179,108,143,218
1-Naphthylamine	143	143,115,89,63
1-Acetyl-2-thiourea	118	43,118,42,76
4-Bromophenyl phenyl ether	248	250,141
Toluene diisocyanate	174	174,145,173,146,132,91
2,4,5-Trichlorophenol	196	196,198,97,132,99
Hexachlorobenzene	284	142,249
Nicotine	84	684,133,161,162
Pentachlorophenol	266	264,268
5-Nitro-o-toluidine	152	77,152,79,106,94
Thionazine	107	96,107,97,143,79,68
4-Nitroaniline	138	138,65,108,92,80,39
Phenanthrene-d ₁₀ (I.S.)	188	94,80
Phenanthrene	178	179,176
Anthracene	178	176,179
1,4-Dinitrobenzene	168	168,75,50,76,92,122
Mevinphos	127	127,192,109,64,164
Naled	109	109,145,147,301,79,189
1,3-Dinitrobenzene	168	168,76,50,75,92,122
Diallate (cis or trans)	86	86,234,43,70

化合物	主要離子	次要離子
1,2-Dinitrobenzene	168	168,50,63,74
Pentachlorobenzene	250	250,252,108,248,215,254
5-Nitro-o-anisidine	168	168,79,52,138,153,77
Pentachloronitrobenzene	237	237,142,214,249,295,265
4-Nitroquinoline-1-oxide	174	174,101,128,75,116
Di-n-butyl phthalate	149	150,104
2,3,4,6-Tetrachlorophenol	232	232,131,230,166,234,168
Dihydrosaffrole	135	135,64,77
Demeton-O	88	88,89,60,61,115,171
Fluoranthene	202	101,203
1,3,5-Trinitrobenzene	75	75,74,213,120,91,63
Dicrotophos	127	127,67,72,109,193,237
Benzidine	184	92,185
Trifluralin	306	306,43,264,41,290
Bromoxynil	277	277,279,88,275,168
Pyrene	202	200,203
Monocrotophos	127	127,192,67,97,109
Phorate	75	75,121,97,93,260
Sulfallate	188	188,88,72,60,44
Demeton-S	88	88,60,81,89,114,115
Phenacetin	108	180,179,109,137,80
Dimethoate	87	87,93,125,143,229
Phenobarbital	204	204,117,232,146,161
Carbofuran	164	164,149,131,122
Octamethyl pyrophosphoramidate	135	135,44,199,286,153,243
4-Aminobiphenyl	169	169,168,170,115
Dioxathion	97	97,125,270,153
Terbufos	231	231,57,97,153,103
α,α -Dimethylphenylamine	58	58,91,65,134,42
Pronamide	173	173,175,145,109,147
Aminoazobenzene	197	92,197,120,65,77
Dichlone	191	191,163,226,228,135,193
Dinoseb	211	211,163,147,117,240
Disulfoton	88	88,97,89,142,186

化合物	主要離子	次要離子
Mexacarbate	165	165,150,134,164,222
4,4'-Oxydianiline	200	200,108,171,80,65
Butyl benzyl phthalate	149	91,206
4-Nitrobiphenyl	199	199,152,141,169,151
Phosphamidon	127	127,264,72,109,138
2-Cyclonhexyl-4,6-Dinitrophenol	231	231,185,41,193,266
Methyl parathion	109	109,125,263,79,93
Carbaryl	144	144,115,116,201
Dimethylaminoazobenzene	225	225,120,77,105,148,42
Propylthiouracil	170	170,142,114,83
Benz (a) anthracene	228	229,226
Chrysene-d ₁₂ (I.S.)	240	120,236
3,3'-Dichlorobenzidine	252	254,126
Chrysene	228	226,229
Malathion	173	173,125,127,93,158
Kepone	272	272,274,237,178,143,270
Fenthion	278	278,125,109,169,153
Parathion	109	109,97,291,139,155
Anilazine	239	239,241,143,178,89
Bis (2-ethylhexyl) phthalate	149	162,279
3,3'-Dimethylbenzidine	212	212,106,196,180
Carbophenothion	157	157,97,121,342,159,199
5-Nitroacenaphthene	199	199,152,169,141,115
Methapyrilene	97	97,50,191,71
Isodrin	193	193,66,195,263,265,147
Captan	79	79,149,77,119,117
Chlorfenvinphos	267	267,269,323,325,295
Crotoxyphos	127	127,105,193,166
Phosmet	160	160,77,93,317,76
EPN	157	157,169,185,141,323
Tetrachlorvinphos	329	109,329,331,79,333
Di-n-octyl phthalate	149	167,43
2-Aminoanthraquinone	223	223,167,195
Barban	222	222,51,87,224,257,153

化合物	主要離子	次要離子
Aramite	185	185,191,319,334,197,321
Benzo (b) flouoranthene	252	253,125
Nitrofen	283	283,285,202,139,253
Benzo (k) flouoranthene	252	253,125
Chlorobenzilate	251	251,139,253,111,141
Fensulfothion	293	293,97,308,125,292
Ethion	231	231,97,153,125,121
Diethylstilbestrol	268	268,145,107,239,121,159
Famphur	218	218,125,93,109,217
Tri-p-tolyl phosphate	368	368,367,107,165,198
Benzo (a) pyrene	252	253,125
Perylene-d ₁₂ (I.S.)	264	260,265
7,12-Dimethylbenz (a) anthracene	256	256,241,239,120
5,5-Diphenylhydantoin	180	180,104,252,223,209
Captafol	79	79,77,80,107
Dinocap	69	69,41,39
Methoxychlor	227	227,228,152,114,274,212
2-Acetylaminofluorene	181	181,180,223,152
4,4'-Methylenebis (2-chloroaniline)	231	231,266,268,140,195
3,3'-Dimethoxybenzidine	244	244,201,229
3-Methylcholanthrene	268	268,252,253,126,134,113
Phosalone	182	182,184,367,121,379
Azinphos-methyl	160	160,132,93,104,105
Leptophos	171	171,377,375,77,155,379
Mirex	272	272,237,274,270,239,235
Tris (2,3-dibromopropyl) phosphate	201	137,201,119,217,219,199
Dibenz (a,j) acridine	279	279,280,277,250
Mestranol	277	277,310,174,147,242
Coumaphos	362	362,226,210,364,97,109
Indeno (1,2,3-cd) pyrene	276	138,227
Dibenz (a,h) anthracene	278	139,279
Benzo (g,h,i) perylene	276	138,277
1,2:4,5-Dibenzopyrene	302	302,151,150,300
Strychnine	334	334,335,333
Piperonyl sulfoxide	162	162,135,105,77

化合物	主要離子	次要離子
Hexachlorophene	196	196,198,209,211,406,408
Aldrin	66	263,220
Aroclor-1016	222	260,292
Aroclor-1221	190	224,260
Aroclor-1232	190	224,260
Aroclor-1242	222	256,292
Aroclor-1248	292	362,326
Aroclor-1254	292	362,326
Aroclor-1260	360	362,394
α -BHC	183	81,109
β -BHC	181	183,109
δ -BHC	183	181,109
γ -BHC (Lindane)	183	181,109
4,4'-DDD	235	237,165
4,4'-DDE	246	248,176
4,4'-DDT	235	237,165
Dieldrin	79	263,279
1,2-Diphenylhydrazine	77	105,182
Endosulfan I	195	339,341
Endosulfan II	337	339,341
Endosulfan sulfate	272	387,422
Endrin	263	82,81
Endrin aldehyde	67	345,250
Endrin ketone	317	67,319
2-Fluorobiphenyl (surr.)	172	171
2-Fluorophenol (surr.)	112	64
Heptachlor	100	272,274
Heptachlor epoxide	353	355,351
Nitrobenzene-d ₅ (surr.)	82	128,54
N-Nitrosodimethylamine	42	74,44
Phenol-d ₆ (surr.)	99	42,71
Terphenyl-d ₁₄ (surr.)	244	122,212
2,4,6-Tribromophenol (surr.)	330	332,141
Toxaphene	159	231,233

化合物	主要離子	次要離子
Di-iso-butyl Phthalate	149	57,29
Benzyl chloride	91	126,65
o-Aminotoluene	107	106,77
Trichloromethyl benzene	159	161,89
Dimethyl sulfate	95	31,96
2-Methoxy-1-propanol	59	31,29
N-Methylpyrrolidinone	99	44,42

I.S. 內標準品、Surr. 擬似標準品

表八 擬似標準品在試劑水中的回收率及 CLP 檢驗品管範圍

擬似標準品	驗證品管範圍(%)	CLP品管範圍* (%)
2-Fluorophenol	34~105	21~110
Phenol-d6	29~95	10~110
Nitrobenzene-d5	37~163	35~114
2-Fluorobiphenyl	49~149	43~116
2,4,6-Tribromophenol	86~117	10~123
Terphenyl-d14	52~132	33~141

註：資料取自參考資料八

表九 單一實驗室添加標準品於試劑水之方法偵測極限及特性離子

化合物中文名稱	化合物英文名稱	CAS No.	滯留時間 (分)	方法偵測極限 (µg/L)	主要離子 (amu)	次要離子 (amu)
1) 1,4-二氯苯-d ₄ (IS)	1)1,4-Dichlorobenzene-d ₄ (IS)		12.52	--	152	150,115
2) N-亞硝基二甲胺	2)N-Nitrosodimethylamine	62-75-9	4.61	10.1	74	42
3) 2-氟酚 (surr.)	3)2-Fluorophenol (surr.)	367-12-4	8.57	8.94	112	64
4) 苯胺	4)Aniline	62-53-3	11.61	14.6	93	66,65
5) 酚-d ₆ (surr.)	5)Phenol-d ₆ (surr.)		11.75	5.78	99	71,42
6) 酚	6)Phenol	108-95-2	11.79	5.75	94	66,65
7) 2-氯酚	7)2-Chlorophenol	95-57-8	11.94	12.2	128	64,130
8) 雙-2-氯乙醚	8)Bis(2-chloroethyl)ether	111-44-4	11.92	13.2	93	63,95
9) 1,3-二氯苯	9)1,3-Dichlorobenzene	541-73-1	12.37	13.4	146	148,111
10) 1,4-二氯苯	10)1,4-Dichlorobenzene	106-46-7	12.57	12.9	146	148,111
11) 1,2-二氯苯	11)1,2-Dichlorobenzene	95-50-1	13.21	12.9	146	148,111
12) 苯甲醇	12)Benzyl alcohol	100-51-6	13.24	14.3	108	79,107
13) 2-甲基酚	13)2-Methylphenol	95-48-7	13.84	11.4	108	107,77
14) 雙-2-氯異丙基醚	14)Bis(2-chloroisopropyl)ether	108-60-1	13.84	12.8	45	77,79
15) 六氯乙烷	15)Hexachloroethane	67-72-1	14.27	13.2	117	201,199
16) 4-甲基酚	16)4-Methylphenol	106-44-5	14.39	9.52	108	107,77
17) N-亞硝基二丙基胺	17)N-Nitroso-di-n-propylamine	621-64-7	14.34	11.8	70	130
18) 萘-d ₈ (IS)	18)Naphthalene-d ₈ (IS)		17.13	--	136	108,68
19) 硝基苯-d ₅ (surr.)	19)Nitrobenzene-d ₅ (surr.)		14.63	106.9	82	54,128
20) 硝基苯	20)Nitrobenzene	98-95-3	14.69	9.68	77	123,65
21) 異佛爾酮	21)Isophorone	78-59-1	15.60	9.68	82	138,95
22) 2-硝基酚	22)2-Nitrophenol	88-75-5	15.88	8.98	139	65,109
23) 2,4-二甲基酚	23)2,4-Dimethylphenol	105-67-9	16.29	10.6	122	107
24) 雙-2-氯乙氧基甲烷	24)Bis(2-chloroethoxy)methane	111-91-1	16.63	9.65	93	95,123
25) 苯甲酸	25)Benzoic acid	65-85-0	16.84	5.44	105	122,77
26) 2,4-二氯酚	26)2,4-Dichlorophenol	120-83-2	16.80	9.59	162	164,98
27) 1,2,4-三氯苯	27)1,2,4-Trichlorobenzene	120-82-1	17.04	11.1	180	182,145
28) 萘	28)Naphthalene	91-20-3	17.20	10.6	128	127,129
29) 4-氯苯胺	29)4-Chloroaniline	106-47-8	17.67	10.4	127	65,129
30) 六氯丁二烯	30)Hexachlorobutadiene	87-68-3	18.03	11.8	225	227,223
31) 4-氯-3-甲基酚	31)4-Chloro-3-methylphenol	59-50-7	19.73	9.65	142	107,144
32) 2-甲基萘	32)2-Methylnaphthalene	91-57-6	18.87	11.9	142	141,115
33) 芴-d ₁₀ (IS)	33)Acenaphthene-d ₁₀ (IS)		23.91	--	164	160

化合物中文名稱	化合物英文名稱	CAS No.	滯留 時間(分)	方法偵 測極限 (µg/L)	主要 離子 (amu)	次要 離子 (amu)
34) 六氯環戊二烯	34)Hexachlorocyclopentadiene	77-47-4	20.81	11.2	237	235,272
35) 2,4,6-三氯酚	35)2,4,6-Trichlorophenol	88-06-2	21.18	7.20	196	198,200
36) 2,4,5-三氯酚	36)2,4,5-Trichlorophenol	95-95-4	21.31	12.7	196	198,200
37) 2-氟二苯(surr.)	37)2-Fluorobiphenyl (surr.)	321-60-8	21.49	8.07	172	171
38) 2-氯萘	38)2-Chloronaphthalene	91-58-7	21.70	8.39	162	165,127
39) 2-硝基苯胺	39)2-Nitroaniline	88-74-4	22.39	7.42	65	138
40) 芴烯	40)Acenaphthylene	208-96-8	23.29	6.90	152	76,151
41) 鄰苯二甲酸二甲酯	41)Dimethylphthalate	131-11-3	23.39	8.77	163	194,164
42) 2,6-二硝基甲苯	42)2,6-Dinitrotoluene	606-20-2	23.56	2.96	165	89,121
43) 3-硝基苯胺	43)3-Nitroaniline	88-74-4	24.02	6.07	138	65
44) 芴	44)Acenaphthene	83-32-9	24.03	6.14	153	154,152
45) 2,4-二硝基酚	45)2,4-Dinitrophenol	51-28-5	24.43	8.73	184	63,154
46) 二苯駢呋喃	46)Dibenzofuran	132-64-9	24.69	6.93	168	139
47) 4-硝基酚	47)4-Nitrophenol	100-02-7	25.04	3.34	139	65,109
48) 2,4-二硝基甲苯	48)2,4-Dinitrotoluene	121-14-2	25.11	5.89	165	63,182
49) 芴	49) Fluorene	86-73-7	26.14	5.09	166	165,167
50) 4-氯苯基苯基醚	50)4-Chlorophenyl-phenylether	7005-72-3	26.34	6.11	204	206,141
51) 鄰苯二甲酸二乙酯	51) Diethylphthalate	84-66-2	26.36	3.57	149	177,150
52) 4-硝基苯胺	52)4-Nitroaniline	100-01-6	26.57	7.56	138	65
53) 菲-d ₁₀ (IS)	53)Phenanthrene-d ₁₀ (IS)		29.32	--	188	189
54) 4,6-二硝基-2-甲基酚	54)4,6-Dinitro-2-methylphenol	534-52-1	26.72	5.28	198	77,182
55) N-亞硝基二苯胺	55)N-nitrosodiphenylamine	86-30-6	26.86	4.50	169	168,167
56) 偶氮苯	56)Azobenzene	103-33-3	26.90	4.38	77	51,182
56*) 1,2-二苯基聯胺	56) 1,2-Diphenylhydrazine	122-66-7	26.90	4.38	77	51,182
57) 2,4,6-三溴酚(surr.)	57)2,4,6-Tribromophenol (surr.)	118-79-6	27.15	12.5	330	332
58) 壬基酚*	58) Nonylphenol	25154-52-3	17.21~17.65	--	135	107,121
		84852-15-3	(註四)			
59) 4-溴苯基苯基醚	59)4-Bromophenyl-phenylether	101-55-3	28.06	4.78	248	250,141
60) 六氯苯	60)Hexachlorobenzene	118-74-1	28.40	6.04	284	142,249
61) 五氯酚	61)Pentachlorophenol	87-86-5	29.05	5.33	266	268,264
62) 菲	62)Phenanthrene	85-01-8	29.39	2.88	178	176,179
63) 蔥	63)Anthracene	120-12-7	29.53	4.23	178	176,179

化合物中文名稱	化合物英文名稱	CAS No.	滯留 時間(分)	方法偵 測極限 (µg/L)	主要 離子 (amu)	次要 離子 (amu)
64) 卞唑	64)Carbazole	86-74-8	30.13	7.82	167	166,168
65) 鄰苯二甲酸二丁酯	65)Di-n-butylphthalate	84-74-2	31.53	8.64	149	150,104
66) 苯駢芴	66)Fluoranthene	206-44-0	32.73	5.69	202	200,101
67) 蒽-d ₁₂ (IS)	67)Chrysene-d ₁₂ (IS)		36.33	--	240	236,120
68) 聯苯胺	68)Benzidine	92-87-5	33.22	38.9	184	185,183
69) 芘	69)Pyrene	129-0-0	33.28	5.37	202	200,101
70) 雙酚 A *	70)Bisphenol A	80-05-7	19.74	--	213	228
71) 三聯苯-d ₁₄ (surr.)	71)Terphenyl-d ₁₄ (surr.)		33.86	4.64	244	122,245
72) 鄰苯二甲酸丁苯酯	72)Butylbenzylphthalate	85-68-7	35.28	6.53	149	91,206
73) 苯(a)苯駢蔥	73)Benzo(a)anthracene	56-55-3	36.29	4.04	228	226,229
74) 3,3'-二氯聯苯胺	74)3,3'-Dichlorobenzidine	91-94-1	36.36	6.78	252	254
75) 蒽	75)Chrysene	218-01-9	36.39	3.50	228	226,229
76) 鄰苯二甲酸乙己酯	76)Bis(2-ethylhexyl)phthalate	117-81-7	36.79	--	149	167,150
77) 芘-d ₁₂ (IS)	77)Perylene-d ₁₂ (IS)		40.20	--	264	265,260
78) 己二酸二(2-乙基己基)酯*	78)Bis(2-ethylhexyl) adipate	103-23-1	20.57	--	129	147,241
79) 鄰苯二甲酸二辛酯	79)Di-n-octylphthalate	117-84-0	38.33	6.31	149	150
80) 苯(b)苯駢芴	80)Benzo(b)fluoranthene	205-99-2	39.03	3.23	252	253,125
81) 苯(k)苯駢芴	81)Benzo(k)fluoranthene	207-08-9	39.11	3.49	252	253,125
82) 苯(a)駢芘	82)Benzo(a)pyrene	50-32-8	40.02	3.60	252	253,125
83) 茛(1,2,3-cd)芘	83)Indeno(1,2,3-cd)pyrene	193-39-5	43.72	4.65	276	138,277
84) 二苯(a,h)駢蔥	84)Dibenzo(a,h)anthracene	53-70-3	43.83	4.08	278	139,279
85) 苯(g,h,i)芘	85)Benzo(g,h,i)perylene	191-24-2	44.50	4.76	276	138,277

註1: IS 代表內標準品； surr. 代表擬似標準品

註2: 沒有*標註的化合物，其分析條件：請參考七、步驟(一)中所示。

註3: 有*化合物所得數據，其分析條件如下(可視實際需要適當調整之)：

層析管柱：DB-5MS 30 m × 0.25 mm (內徑) × 0.25 µm (膜厚)。

注入器溫度：280°C (分流比 1:1, 注入 1 µL)。

傳輸管溫度：280°C。

層析管柱溫度：最初 40°C 保持 3 分鐘，以每分鐘 10°C 從 40°C 升溫至 100

°C，保持 2 分鐘；次以每分鐘 20°C 從 100°C 升溫至 300°C，保持 9 分鐘。

載流氣體(氦氣)流速：1.0 mL/分鐘。

註4: 壬基酚具有多個結構異構物，GC/MS 分析層析圖為一個寬帶，積分時，將壬基酚滯留時間範圍內之 m/z 為 135 的定量離子面積加總，依七、(三) 2.計算得 RF 值。

註5: 1,2-二苯基聯胺(1,2-Diphenylhydrazine)屬半衰期短暫之不穩定化合物，易轉換為偶氮苯(Azobenzene)化合物，測定時可以 Azobenzene 之質譜 Q1: m/z 77、Q2: m/z 51,182，做為定性定量之依據，檢測該成份時應特別注意。

表十單一實驗室添加半揮發性有機物標準品於試劑水之精密度與準確度

化合物	添加濃度 ($\mu\text{g/L}$)	平均回收率 (%)	相對標準偏差 (%)	回收率(%)	分析次數
1)1,4-Dichlorobenzene-d4 (IS)	--	--	--	--	10
2)N-Nitrosodimethylamine	100	51.8	13.2	30~65	10
3)2-Fluorophenol (surr.)	100	57.9	20.7	34~105	10
4)Aniline	100	71.5	19.2	37~106	10
5)Phenol-d6 ;d5 (surr.)	100	44.9	20.5	29~95	10
6)Phenol	100	45.3	15.4	29~82	10
7)2-Chlorophenol	100	83.5	10.6	68~95	10
8)Bis(2-chloroethyl)ether	100	86.1	12.9	67~104	10
9)1,3-Dichlorobenzene	100	77.7	14.4	44~98	10
10)1,4-Dichlorobenzene	100	81.9	17.5	46~112	10
11)1,2-Dichlorobenzene	100	81.5	14	51~99	10
12)Benzenemethanol	100	81.3	13.5	65~93	10
13)2-Methylphenol	100	74.2	16.4	36~90	10
14)Bis(2-chloroisopropyl)ether	100	66.5	37.2	ND~95	10
15)Hexachloroethane	100	78.5	16.3	43~99	10
16)4-Methylphenol	100	74.5	23.7	28~107	10
17)N-Nitroso-Di-n-propylamine	100	89.7	12	67~101	10
18)Naphthalene-d8 (IS)	--	--	--	--	10
19)Nitrobenzene-d5 (surr.)	100	85.6	43.8	37~163	10
20)Nitrobenzene	100	89.1	11.9	71~112	10
21)Isophorone	100	90.9	10.8	74~109	10
22)2-Nitrophenol	100	91.3	17.2	60~117	10
23)2,4-Dimethylphenol	100	70.6	30.8	5~89	10
24)Bis(2-chloroethoxy)methane	100	90.8	12.4	68~113	10
25)Benzoic acid	100	28.2	34.1	ND~91	10
26)2,4-Dichlorophenol	100	90.8	13.3	71~113	10
27)1,2,4-Trichlorobenzene	100	85.9	15.4	69~113	10
28)Naphthalene	100	92.2	16.9	64~110	10
29)4-Chloroaniline	100	83.8	18.8	54~105	10
30)Hexachlorobutadiene	100	78.7	18.4	52~112	10
31)4-Chloro-3-methylphenol	100	88.8	16.3	65~109	10
32)2-Methylnaphthalene	100	104.5	28.5	68~153	10
33)Acenaphthene-d10 (IS)	--	--	--	--	10

化合物	添加濃度 ($\mu\text{g/L}$)	平均回收率 (%)	相對標準偏差 (%)	回收率(%)	分析次數
34)Hexachlorocyclopentadiene	100	69.8	21.2	39~102	10
35)2,4,6-Trichlorophenol	100	94.9	7.7	85~105	10
36)2,4,5-Trichlorophenol	100	100	8.2	84~114	10
37)2-Fluorobiphenyl (surr.)	100	85	37	49~149	10
38)2-Chloronaphthalene	100	97	10.3	75~114	10
39)2-Nitroaniline	100	96.5	10.8	82~119	10
40)Acenaphthylene	100	95.8	13.1	66~111	10
41)Dimethylphthalate	100	95.1	23.7	66~130	10
42)2,6-Dinitrotoluene	100	102	10.5	80~119	10
43)3-Nitroaniline	100	99	14	75~122	10
44)Acenaphthene	100	95.9	11.5	70~110	10
45)2,4-Dinitrophenol	100	80.8	25	33~96	10
46)Dibenzofuran	100	96	11.1	74~110	10
47)4-Nitrophenol	100	47	29	ND~91	10
48)2,4-Dinitrotoluene	100	101	13.6	86~117	10
49) Fluorene	100	102	14.3	73~121	10
50)4-Chlorophenyl-phenylether	100	96.6	12	73~113	10
51) Diethylphthalate	100	96	13.4	72~112	10
52)4-Nitroaniline	100	102	17	79~128	10
53)Phenanthrene-d10 (IS)	--	--	--	--	10
54)4,6-Dinitro-2-methylphenol	100	98	28	50~131	10
55)N-nitrosodiphenylamine	100	102	15	70~114	10
56)Azobenzene	100	99.6	17.7	76~138	10
57)2,4,6-Tribromophenol (surr.)	100	104	10.7	86~117	10
58)Nonylphenol	40	74	9.7	49~83	17
59)4-Bromophenyl-phenylether	100	97.4	12.2	71~108	10
60)Hexachlorobenzene	100	98.5	12.8	76~116	10
61)Pentachlorophenol	100	89.2	24.6	48~121	10
62)Phenanthrene	100	102	14.6	70~120	10
63)Anthracene	100	98	12.7	70~112	10
64)Carbazole	100	120	23.5	81~150	10
65)Di-n-butylphthalate	100	101.4	13.3	77~125	10
66)Fluoranthene	100	99.8	13	71~116	10

化合物	添加濃度 ($\mu\text{g/L}$)	平均回收率 (%)	相對標準偏差 (%)	回收率(%)	分析次數
67)Chrysene-d12(IS)	--	--	--	--	10
68)Benzidine	100	58.4	41.5	ND~125	10
69)Pyrene	100	101.8	18	70~137	10
70)Bisphenol A	40	72	11.1	52~93	17
71)Terphenyl-d14 (surr.)	100	85	30.6	52~132	10
72)Butylbenzylphthalate	100	107	19	69~143	10
73)Benzo(a)anthracene	100	100	16.7	71~129	10
74)3,3'-Dichlorobenzidine	100	99	31	57~148	10
75)Chrysene	100	103	14	73~122	10
76)Bis(2-Ethylhexyl)phthalate	100	117	35	72~198	10
77)Perylene-d12(IS)	--	--	--	--	10
78)Bis(2-ethylhexyl)adipate	40	84	13.1	57~108	19
79)Di-n-octylphthalate	100	107	18	70~131	10
80)Benzo(b)fluoranthene	100	95	17	66~118	10
81)Benzo(k)fluoranthene	100	98	11	80~120	10
82)Benzo(a)pyrene	100	96	13	70~115	10
83)Indeno(1,2,3-cd)pyrene	100	96.7	11.1	80~108	10
84)Dibenzo(a,h)anthracene	100	96.6	12.7	76~110	10
85)Benzo(g,h,i)perylene	100	96.8	11.3	78~111	10

相關條件同表九之註。

表十一 單一實驗室添加 13 項總毒性物質有機物 (TTO) 標準品於試劑水以連續式液相—液相萃取及分液漏斗液相—液相萃取之精密度與準確度

化合物	添加濃度 ($\mu\text{g/L}$)	連續式液相—液相萃取		分液漏斗液相—液相萃取	
		平均回收率 (%)	相對標準偏 差 (%)	平均回收率 (%)	相對標準偏 差 (%)
Phenol	20	61.2	6.4	30.6	20.7
2-Chlorophenol	20	57.6	7.0	60.4	22.2
Isophorone	20	69.8	4.4	72.2	8.6
2-Nitrophenol	20	65.1	6.5	66.5	20.9
2,4-Dichlorophenol	20	73.0	3.8	74.4	12.6
2,4,6-Trichlorophenol	20	85.7	5.2	89.4	7.4
4-Nitrophenol	20	83.5	6.7	39.1	9.6
1,2-Diphenylhydrazine	40	81.3	7.7	85.4	6.8
Pentachlorophenol	20	98.8	5.5	100.4	4.1
Anthracene	20	97.9	11.1	100.3	2.4
Di-n-butylphthalate	20	100.3	4.9	106.5	3.2
Butylbenzylphthalate	20	81.8	12.2	88.9	4.4
Bis(2-Ethylhexyl)phthalate	20	92.0	6.2	98.4	5.8

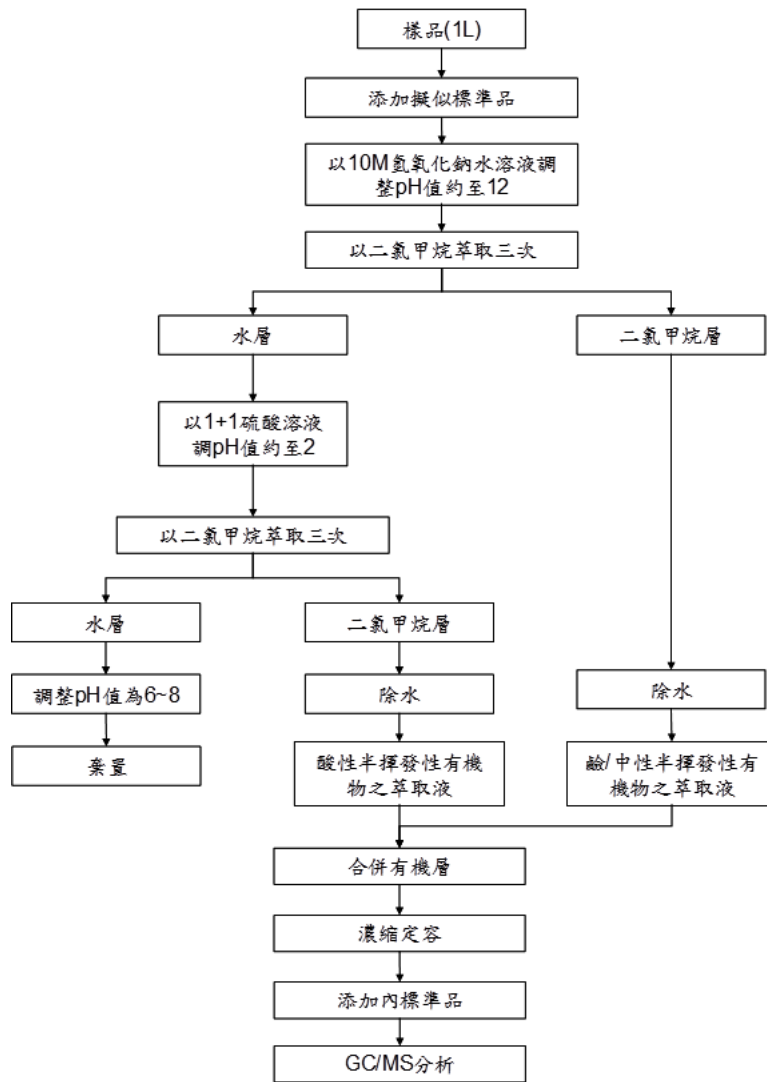
註：以連續式液相—液相及分液漏斗液相—液相萃取，各做 4 重複分析，驗證條件參考七、步驟 (二) 1.一節

表十二 單一實驗室以自動固相萃取膜 (Disk) 檢測水中半揮發性有機化合物之精密度及準確度

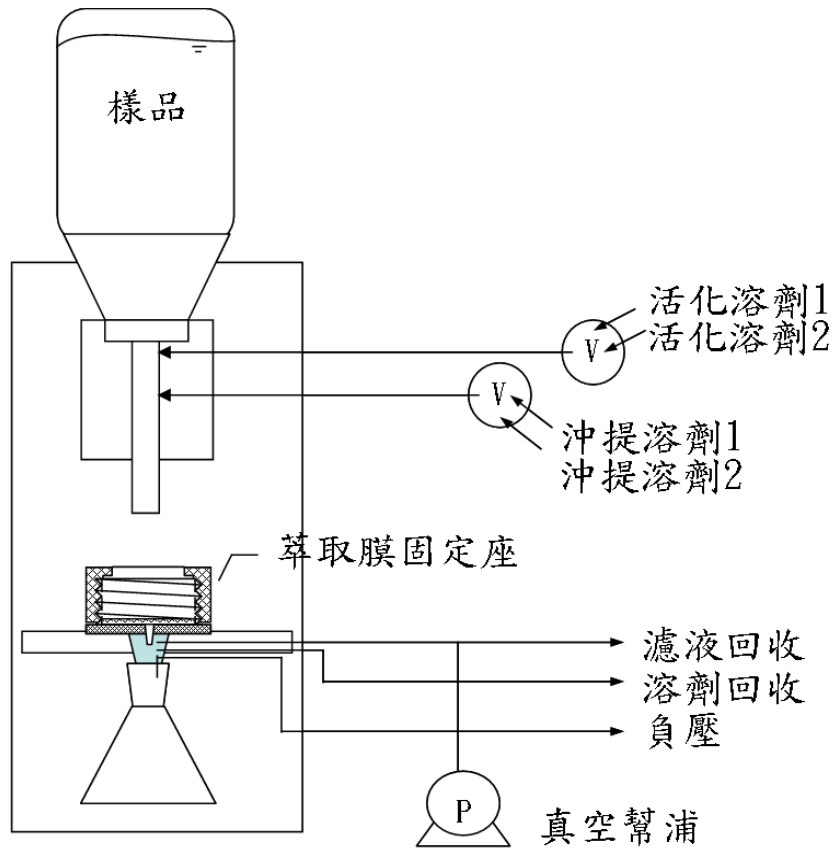
化合物	添加濃度 ($\mu\text{g/L}$)	平均回收率 (%)	相對標準偏差 (%)	分析次數
N-Nitrosodimethylamine	20	23	20	3
Phenol	20	49	9	3
Bis(2-chloroethyl) ether	20	48	8	3
2-Chlorophenol	20	50	13	3
2-Methylphenol	20	64	4	3
Bis(2-chloroisopropyl) ether	20	37	24	3
4-Methylphenol	20	63	10	3
N-Nitroso-di-n-propylamine	20	50	14	3
Nitrobenzene	20	46	18	3
Isophorone	20	54	9	3
2-Nitrophenol	20	50	14	3
2,4-Dimethylphenol	20	75	2	3
Benzoic acid	20	101	5	3
Bis(2-chloroethoxy)methane	20	56	11	3
2,4-Dichlorophenol	20	76	4	3
1,2,4-Trichlorobenzene	20	35	26	3
Naphthalene	20	45	16	3
4-Chloro-3-methylphenol	20	86	7	3
2-Methylnaphthalene	20	52	8	3
2,4,6-Trichlorophenol	20	85	9	3
2,4,5-Trichlorophenol	20	89	12	3
2-Chloronaphthalene	20	61	0	3
3-Nitroaniline	20	81	12	3
Dimethyl phthalate	20	87	7	3
2,6-Dinitrotoluene	20	85	6	3
Acenaphthylene	20	68	3	3
2-Nitroaniline	20	64	15	3
Acenaphthene	20	69	4	3
2,4-Dinitrophenol	20	57	9	3
4-Nitrophenol	20	66	2	3
Dibenzofuran	20	74	4	3
2,4-Dinitrotoluene	20	91	7	3
Diethyl phthalate	20	109	15	3

化合物	添加濃度 ($\mu\text{g/L}$)	平均回收率 (%)	相對標準偏差 (%)	分析次數
Fluorene	20	79	5	3
4-Chlorophenyl phenyl ether	20	79	7	3
4-Nitroaniline	20	78	10	3
2-Methyl-4,6-dinitrophenol	20	58	10	3
Azobenzene	20	77	4	3
4-Bromophenyl phenyl ether	20	78	5	3
Hexachlorobenzene	20	76	6	3
Pentachlorophenol	20	88	9	3
Phenanthrene	20	83	6	3
Anthracene	20	83	5	3
Carbazole	20	91	6	3
Di-n-butyl phthalate	20	95	8	3
Fluoranthene	20	86	6	3
Pyrene	20	73	5	3
Butylbenzyl phthalate	20	80	7	3
Chrysene	20	83	12	3
Benzo[a]anthracene	20	81	7	3
Bis(2-ethylhexyl) phthalate	20	105	4	3
Di-n-octyl phthalate	20	86	10	3
Benzo[b]fluoranthene	20	82	6	3
Benzo[k]fluoranthene	20	83	7	3
Benzo[a]pyrene	20	79	7	3
Indeno[1,2,3-cd]pyrene	20	84	8	3
Dibenz[a,h]anthracene	20	88	7	3
Benzo[g,h,i]perylene	20	85	8	3
Nonyl phenol	20	79	6	3

註：驗證條件參考七、步驟（二）2.一節



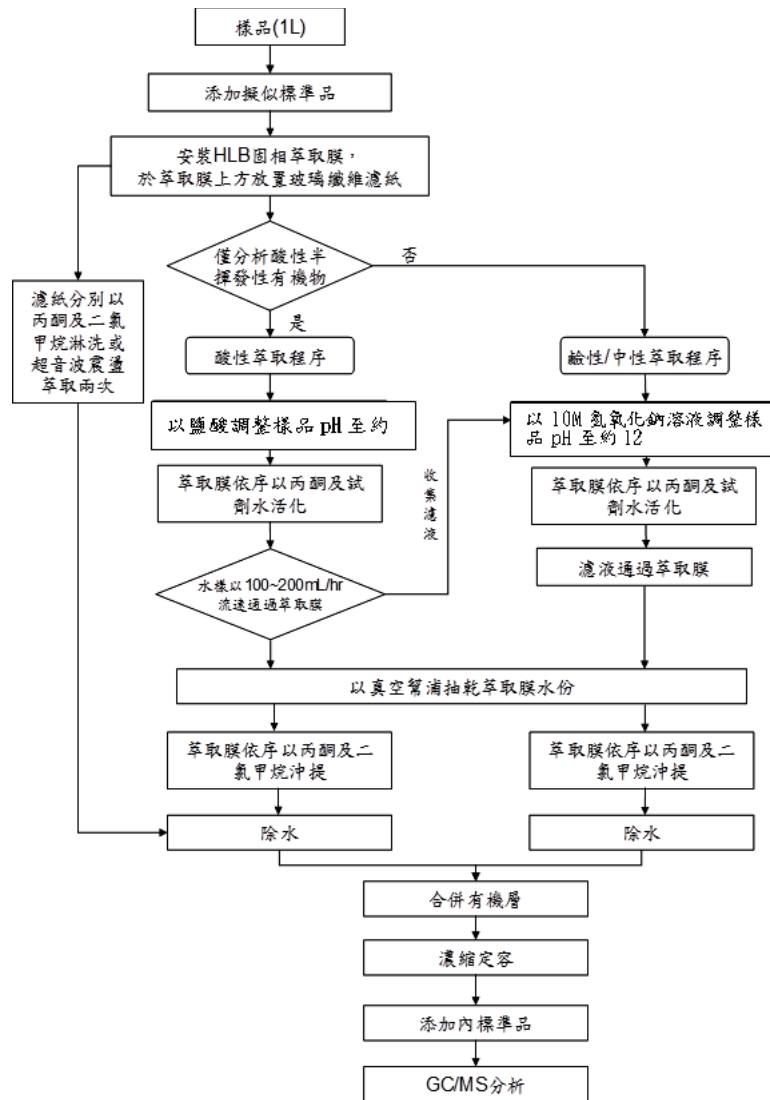
圖一 液相-液相萃取前處理流程



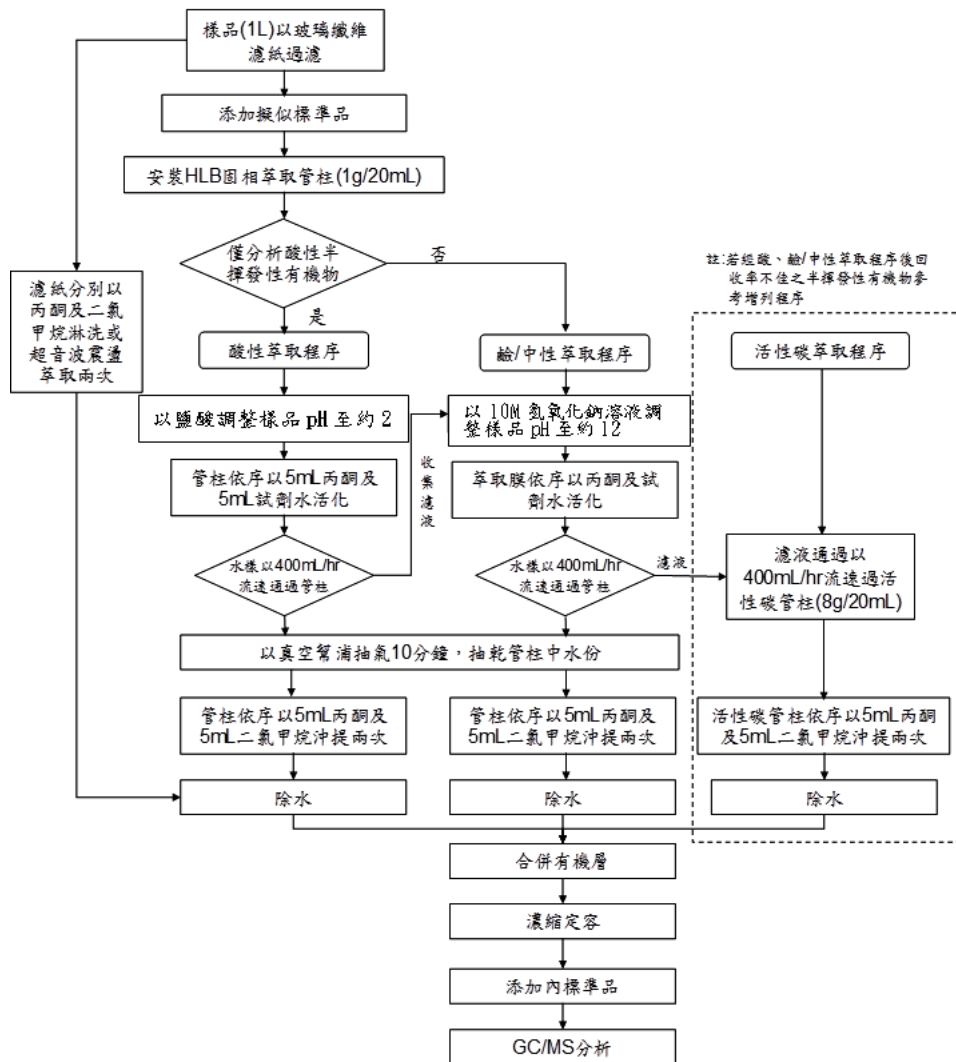
圖二 自動固相萃取膜 (Disk) 萃取裝置



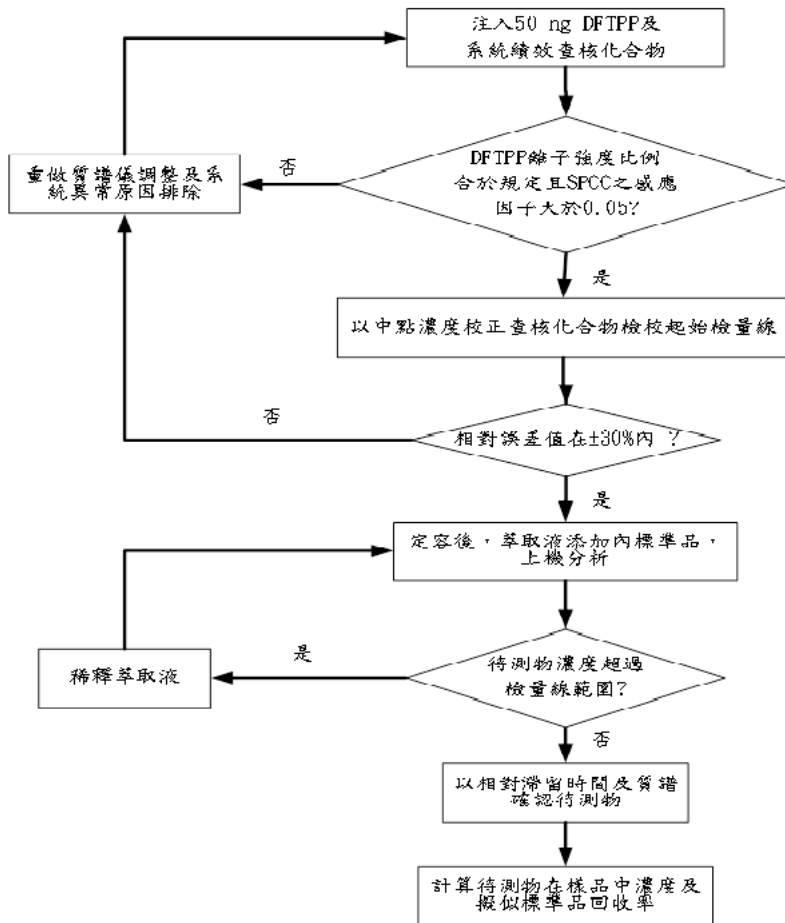
圖三 手動固相萃取管 (Cartridge) 萃取裝置



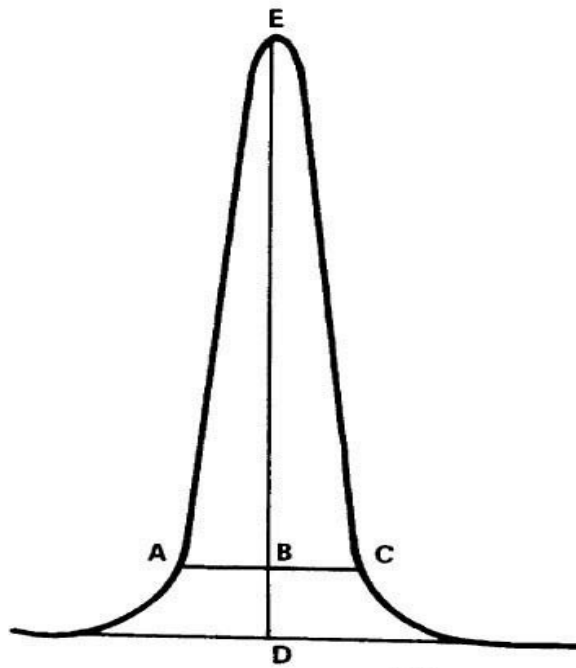
圖四 固相萃取膜 (Disk) 萃取流程



圖五 固相萃取管 (Cartridge) 萃取流程



圖六 樣品上機分析流程



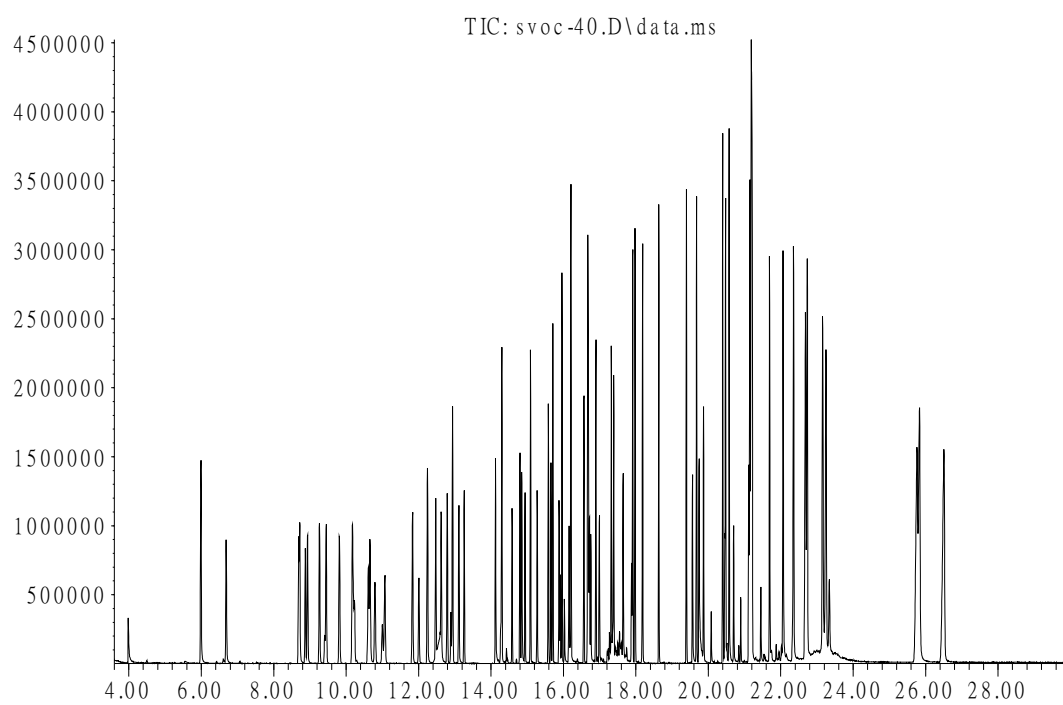
$$\text{TAILING FACTOR} = \frac{BC}{AB}$$

Example calculation: Peak Height = DE = 100 mm
10% Peak Height = BD = 10 mm
Peak Width at 10% Peak Height = AC = 23 mm
AB = 11 mm
BC = 12 mm

$$\text{Therefore: Tailing Factor} = \frac{12}{11} = 1.1$$

圖七 Tailing Factor計算 (USEPA Method 8270D)

Abundance



圖八 半揮發性有機物之氣相層析圖譜