

化學物質檢測方法－有機類定性及定量分析法草案

NIEA T101.12C

一、方法概要

本方法利用適當之檢測儀器進行有機類化學物質定性可能之成分，如有需要再使用合適之方法定量。

二、適用範圍

本方法適用於毒性及關注化學物質管理法所列之有機類化學物質檢測，表一為有機類各化學物質定性及定量分析方法參考表，表一未列之有機類化學物質經七、步驟之定性、定量分析確認及符合九、品質管制後亦可使用本方法檢測。

三、干擾

略。

四、設備與材料

- (一) 拉曼光譜儀(Raman spectrometer, Raman)：含至少 1 組雷射光源，須建置分析軟體與資料庫，並具有圖譜比對功能。
- (二) 紅外線光譜儀(Infrared spectrometer, IR)：包含傅立葉紅外線光譜儀(Fourier transform infrared spectrometer, FTIR)，須建置分析軟體與資料庫，並具有圖譜比對功能。
- (三) 氣相層析儀搭配各類型偵測器（如火焰離子化偵測器、火焰光度偵測器、電子捕捉偵測器、氮磷偵測器、熱導型偵測器、光離子化偵測器等）：至少具備分流-非分流式注射口之完整配備的氣相層析儀分析系統及所有附件配備，包括可程式溫度烘箱、注射器、層析管柱、氣體、偵測器及數據處理系統。
- (四) 氣相層析質譜儀(Gas chromatography mass spectrometer, GC/MS)：至少具備分流-非分流式注射口之完整配備的氣相層析儀分析系統，包括可程式溫度烘箱、注射器、層析管柱、氣體、質譜儀及數據處理系統並附質譜圖資料庫。
- (五) 氣相層析串聯式質譜儀(Gas chromatography tandem mass spectrometer, GC/MS/MS)：至少具備分流-非分流式注射口之完整配備的氣相層析儀分析系統，包括可程式溫度烘箱、注射器、層析管柱、氣體、串聯式質譜儀及數據處理系統。
- (六) 液相層析串聯式質譜儀(Liquid chromatography tandem mass spectrometer, LC/MS/MS)：至少具備高壓幫浦、進樣系統、分析管

- 柱之液相層析系統及串聯式質譜儀和數據處理系統。
- (七) 氣相層析高解析質譜儀或液相層析高解析質譜儀 (Gas chromatography-high resolution mass spectrometer, GC/HRMS or Liquid chromatography-high resolution mass spectrometer, LC/HRMS)：至少具備高真空幫浦或高壓幫浦、進樣系統、分析管柱之氣相層析系統或液相層析系統及高解析質譜儀和數據處理系統。
 - (八) 液相層析儀 / 紫外光偵測器 (Liquid chromatography/UV detector, LC/UV)：配備高壓幫浦、進樣系統、分析管柱、可調波長或全波長之紫外光偵測器及數據處理系統。
 - (九) 液相層析儀 / 螢光偵測器 (Liquid chromatography/Fluorescence detector, LC/FLD)：配備高壓幫浦、進樣系統、分析管柱、可調波長之螢光偵測器及數據處理系統。
 - (十) 離子層析儀 (Ion chromatography, IC)：具備注入閥、保護管柱、離子層析管柱、抑制裝置及溫度補償之電導度偵測器和數據處理系統。
 - (十一) 紫外光 / 可見光光譜儀 (UV/VIS Spectrophotometer)：具備可掃描、設定或固定波長，附樣品槽之紫外光及可見光之偵測器。
 - (十二) X 射線繞射儀 (X-ray diffractometer, XRD)：主要組成包括產生單一波長 X 射線射源、繞射測角儀、偵測器、數據處理、內建國際繞射資料中心 (International center for diffraction data, ICDD) 資料庫或以標準品自行建立之繞射圖譜資料庫及控制系統。
 - (十三) 其他儀器：如熱裂解儀 (Pyrolyzer)、氣相層析儀/傅立葉轉換紅外線光譜儀 (GC/FTIR) 等儀器，或其他可用於辨識化學物質之儀器。
 - (十四) 分析天平：可精稱至 0.1 mg。
 - (十五) 量瓶：A 級，適當體積並具磨砂口瓶塞。
 - (十六) 滴定管：10 mL、25 mL、50 mL 或使用自動滴定裝置。
 - (十七) 氣密式微量注射針：5 μ L、10 μ L 或其他適當體積注射針。
 - (十八) 移液管 (Pipette)：活塞式 (Piston) 且可拋棄式吸管尖或其他適用之移液管。
 - (十九) 分注器 (Dispenser) 或量筒：1 mL 至 10 mL 或其他適當體積。
 - (二十) 樣品瓶：1.8 mL 或其他適當體積，棕色玻璃製，附中空螺旋瓶蓋，瓶蓋內襯為鐵氟龍墊片。

- (二十一) 三角燒瓶：250 mL 或其他適當體積者。
- (二十二) 電磁攪拌器。
- (二十三) 研磨裝置：以瑪瑙、氧化鋯或其他不干擾分析的材質製成。
- (二十四) 壓錠機：固體樣品製備壓片用。

五、試劑

- (一) 試劑水：不含待測物之去離子水。
- (二) 氦氣(He)：純度為 99.999 % 以上。
- (三) 氮氣(N₂)：純度為 99.99 % 以上。
- (四) 1 N NaOH：取 40 g NaOH，加試劑水定量至 1 L，混勻（使用前須用鄰苯二甲酸氫鉀標定）。
- (五) 酚酞指示劑：溶解 0.5 g 酚酞(Phenolphthalein)於 50 mL 95 % 乙醇，加入 50 mL 蒸餾水。亦可使用其他適合作為判定終點之呈色試劑。
- (六) 有機溶劑：如甲醇(Methanol)、乙醇(Ethanol)、乙腈(Acetonitrile)、丙酮(Acetone)、正己烷(n-Hexane)等，LC 級或殘量級以上。
- (七) 標準品或標準溶液：依定性分析之可能化學物質配製或取得。

六、採樣與保存

參考本署公告「化學物質採樣方法 (NIEA T103.1)」(註1) 執行。

七、步驟

於樣品分析前，應查閱安全資料表(Safety data sheet, SDS)，確實做好安全評估，並確認實驗室具備適當之個人防護用具及安全衛生設施。

(一) 定性分析 (視需要)

固體及液體樣品參考 SDS 確認樣品危害性及選擇適當之樣品前處理方式，可參考表一選擇適當儀器進行檢測。定性分析可使用小於管制濃度十分之一之標準品進行比對。對於無法以標準品或標準圖譜比對之樣品，則必須利用多種定性方法交互比對進行化學物質鑑定。

1. 樣品以氣相層析儀進行檢測時，可經由比較樣品與標準品之相對滯留時間來鑑定，必要時可使用其他方法如質譜儀或使用不同的層析管柱或添加標準品進行確認。
2. 樣品如以氣相層析質譜儀進行檢測，可經由比對樣品與標準品

之相對滯留時間及質譜來鑑定，須符合以下要求。

- (1) 待測物與標準品的相對滯留時間(Relative retention time, RRT) 差異須在 ± 0.06 RRT 內或 ± 0.03 分鐘滯留時窗(Retention time windows)之內。

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

RT_x :待測物滯留時間

RT_{is} :相對應內標準品滯留時間

- (2) 掃描模式時，比較特性離子時應符合下列要求：

- A. 標準質譜中相對強度大於 10 % 之特性離子均應出現在樣品中。
- B. 樣品中符合上項要求特性離子之大小應在標準品相對離子強度的 $\pm 30\%$ 之間。
- C. 對於有些重要的離子（如分子離子），雖然其相對強度小於 10 %，亦應列入評估中。

- (3) 選擇離子監測模式時（註 2），至少選擇 1 對主要特性離子 / 次要特性離子進行分析。樣品中其離子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儀分析之標準品或參考資料庫。

3. 樣品如以氣相或液相層析串聯質譜儀檢測時，須先進行全離子掃描再進行產物離子掃描，符合下列要求才可定性判定為待測物。

- (1) 進行待測物之前驅 / 產物離子確認。

- (2) 待測物之滯留時間須落在當天標準品之滯留時間 $\pm 2.5\%$ 範圍之內。

- (3) 待測物之兩監測離子對須同時出現，定量離子的訊噪比 (Signal to noise ratio, S/N) 必須 ≥ 10 ，定性離子的訊噪比必須 ≥ 3 。

- (4) 待測物之定性離子 / 定量離子（積分面積）的相對比值 (Ion ratio) 須以標準品離子對的比例為基準計算，應符合表二所列之管制範圍內。

4. 樣品如以氣相層析高解析質譜儀或液相層析高解析質譜儀定性時，比對樣品與標準品之滯留時間及精確分子量，樣品中待測物量測之精確分子量與該待測物分子量之理論值，須在一定範圍內。

5. 將拉曼光譜儀或紅外線光譜儀檢測所得之樣品圖譜，經由比對標準品圖譜或儀器內建資料庫，可初步判定為可能之待測物。
6. 樣品如以 X 射線繞射儀檢測時，須先以適當設備進行元素定性分析，繞射圖譜藉由儀器內建 ICDD 或自行建立標準品資料庫與電腦軟體輔助比對確認，繞射波峰 2θ 位置與資料庫相符外，各繞射面與主繞射面強度之比值與資料庫相較差異在 20 % 以內。

(二) 定量分析 (註 3)

1. 依七、(一) 定性有機成分後，參考表一「化學物質定性及定量分析方法參考表」選擇適當定量方法測定化學物質之含量。
2. 儀器分析
 - (1) 檢量線製備：依待測物感度適度調整，配製至少 5 種不同濃度標準品。
 - (2) 檢量線製備完成，即應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獨立配製之標準溶液，進行分析確認，其分析結果相對誤差值應在 ± 20 % 以內。
 - (3) 檢量線製備可採用線性迴歸法(Linear regression)、校正因子(Calibration factor)與感應因子(Response factor)之校正方法。
 - (4) 線性迴歸法：根據內、外標準品以線性迴歸法製作檢量線，線性相關係數(r)應大於或等於 0.995。若待測物感度高，致檢量線未能呈線性，亦可使用二次迴歸校正。
 - (5) 校正因子校正法：即外標準品校正，為利用各校正標準品測得的訊號與各校正標準品中待測物的量或濃度的比值，稱為校正因子(CF)，樣品中待測物濃度之計算，係將測得樣品中之待測物訊號(尖峰面積或強度)與待測物初始校正得到的平均校正因子比較而得。

$$CF = \frac{A_s}{W_s}$$

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

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

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

$$C_a = \frac{C_s}{\overline{CF}}$$

CF ：校正因子

A_s ：校正標準品測得的訊號

W_s ：校正標準品中待測物的量或濃度， $\mu\text{g/mL}$

\overline{CF} ：待測物初始校正得到的平均校正因子

CF_i ：每一點檢量線標準溶液中，待測物的校正因子

n ：不同濃度校正標準品的數目

SD ：檢量線標準溶液待測物校正因子的標準偏差

RSD ：相對標準偏差

C_s ：測得樣品中之待測物訊號（尖峰面積或強度）

C_a ：由檢量線求得之待測物濃度， $\mu\text{g/mL}$

- (6) 感應因子校正法：即內標準品校正，利用於樣品注入儀器前，將固定量之內標準品加入樣品或樣品萃取液再檢測，測得樣品或樣品萃取液中待測物所對應的尖峰面積或高度與樣品或樣品萃取液中內標準品所對應的尖峰面積或高度之比值，除以每一校正標準品中待測物的量或濃度與其中之內標準品的量或濃度之比值，此比值即為感應因子(RF)，再求得平均感應因子(\overline{RF})與相對標準偏差(RSD)，感應因子之相對標準偏差應小於或等於 20%。

$$RF = \frac{A_s / A_{is}}{C_s / C_{is}}$$

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

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

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

$$C_a = \frac{A_s \times C_{is}}{A_{is} \times \overline{RF}}$$

A_s ：待測物所對應的尖峰面積或高度

A_{is} ：內標準品所對應的尖峰面積或高度

C_s ：待測物的量或濃度， $\mu\text{g/mL}$

C_{is} ：內標準品的量或濃度， $\mu\text{g/mL}$

\overline{RF} ：待測物初始校正得到的平均感應因子

RF_i ：每一點檢量線標準溶液中，待測物的感應因子

n ：不同濃度校正標準品的數目

SD ：檢量線標準溶液待測物感應因子的標準偏差

RSD ：相對標準偏差

C_a ：由檢量線求得之萃液中化學物質濃度， $\mu\text{g/mL}$

3. 滴定分析法：

(1) 檸檬酸

精稱樣品約 2.5 g 溶於試劑水 40 mL，加入 3 滴酚酞指示劑後，以 1 N NaOH 溶液滴定之，每 mL 之 1 N NaOH 溶液相當於 64.04 mg 之檸檬酸。

(2) 醋酸

精稱樣品約 3 g 溶於試劑水 15 mL，加入 2 滴酚酞指示劑後，以 1 N NaOH 溶液滴定之，每 mL 之 1 N NaOH 溶液相當於 60.05 mg 之醋酸。

八、結果處理

- (一) 當樣品僅須提供化學物質成分之定性結果時，以「化學物質名稱」出具定性報告；若檢測結果小於管制濃度十分之一時，以「小於管制濃度」出具定性報告。
- (二) 當樣品必須提供化學物質成分之定量結果時，以「化學物質名稱及濃度(%)」出具定量報告。計算：
1. 由檢量線求得萃液中化學物質濃度，可經下列公式計算化學物質濃度(%)

$$\text{化學物質濃度 \% (w/w)} = \frac{C_a \times V \times D}{W \times 10^6} \times 100$$

C_a ：由檢量線計算求得之化學物質化合物檢出濃度(μg/mL)

V ：定量體積(mL)

D ：稀釋因子，若未經稀釋則 $D = 1$

W ：樣品取樣重(g)

2. 使用直接滴定測定法者，可經滴定當量數計算化學物質含量。

$$C_{acid} \times V_{acid} \times n_{acid} = C_{NaOH} \times V_{NaOH} \times n_{NaOH}$$

C_{acid} ：檸檬酸或醋酸之體積莫耳濃度(M)

V_{acid} ：檸檬酸或醋酸之定量體積(mL)

n_{acid} ：檸檬酸或醋酸之當量數（氫離子個數）

C_{NaOH} ：氫氧化鈉之體積莫耳濃度(M)

V_{NaOH} ：氫氧化鈉之定量體積(mL)

n_{NaOH} ：氫氧化鈉之當量數（氫氧根離子個數）

九、品質管制

- (一) 檢量線查核：每 20 個樣品及每批次分析結束時，以檢量線查核標準溶液進行檢量線查核，檢量線查核標準溶液分析結果之相對誤差值應在 ±20% 以內。
- (二) 重複樣品分析：每 20 個樣品應至少執行 1 個重複樣品分析，若每批次樣品數少於 20 個，則每批次仍應執行 1 個重複樣品分析，

其相對差異百分比應在 25 % 以內。

十、精密度與準確度

略。

十一、參考資料

- (一) 行政院環境保護署，環境檢驗檢量線製備及查核指引 NIEA-PA103，中華民國 93 年。
- (二) 行政院環境保護署，毒性化學物質中有機化合物檢測方法—氣相層析質譜儀法 NIEA T706.24B，中華民國 107 年。
- (三) 衛生福利部食品藥物管理署，食品添加物規格檢驗方法—檸檬酸、無水檸檬酸，中華民國 102 年。
- (四) 衛生福利部食品藥物管理署，食品添加物規格檢驗方法—醋酸，中華民國 102 年。
- (五) 行政院環境保護署，土壤及事業廢棄物中非鹵有機物檢測方法—氣相層析儀／火焰離子化偵測法(GC/FID) NIEA M611.02C，中華民國 92 年。
- (六) 行政院環境保護署，有機磷農藥檢測方法—毛細管柱氣相層析法 NIEA R610.21C，中華民國 91 年。
- (七) 行政院農業委員會，二氯松(Dichlorvos)農藥有效成分檢驗方法，農糧字第 87144286 號公告，中華民國 87 年。
- (八) 行政院農業委員會，三氯松(Trichlorfon)農藥有效成分檢驗方法，農糧字第 0920021316 號公告，中華民國 92 年。
- (九) 行政院環境保護署，毒性化學物質中醛類檢測方法—氣相層析質譜儀法 NIEA T707.20B，中華民國 97 年。
- (十) 行政院環境保護署，塑膠中鄰苯二甲酸酯類檢測方法—氣相層析質譜儀法 NIEA T801.10B，中華民國 100 年。
- (十一) 行政院環境保護署，毒性化學物質鄰苯二甲酸二丁酯及鄰苯二甲酸二(2-乙基己基)酯檢測方法—氣相層析儀／火焰離子偵測器法 NIEA T505.30B，中華民國 95 年。
- (十二) 行政院環境保護署，水中有機氯農藥分析方法—固相萃取／氣相層析儀／電子捕捉偵測器法 NIEA W658.51B，中華民國 96 年。
- (十三) 衛生福利部食品藥物管理署，食品中殘留農藥檢驗方法—多重殘留分析方法(五)，中華民國 109 年。
- (十四) 行政院環境保護署，排放管道中聯苯胺檢測方法—液相層析儀

紫外光偵測器法 NIEA A815.70B，中華民國 110 年。

- (十五) 行政院環境保護署，毒性化學物質有機錫類化合物於紡織品之檢測方法—氣相層析法(GC/PFPD 或 FPD) NIEA T504.30B，中華民國 92 年。
- (十六) Juliana Giraldo Junco, Gala M. Chapman, Roberto Bravo Cardenas, Clifford H. Watson, Liza Valentín-Blasini, Quantification of nitromethane in mainstream smoke using gas chromatography and tandem mass spectrometry, 2021.
- (十七) Xing Xu, Emmanuel Duhoranimana, and Xiaoming Zhang, Preparation and characterization of magnetic molecularly imprinted polymers for the extraction of hexamethylenetetramine in milk samples, 2017.
- (十八) Bettina Seiwert, Hartmut Henneken, and Uwe Karst, Ferrocenoyl Piperazide as Derivatizing Agent for the Analysis of Isocyanates and Related Compounds Using Liquid Chromatography/Electrochemistry/Mass Spectrometry(LC/EC/MS), 2004.
- (十九) Tiffany L.L. Teo, James A. McDonald, Heather M. Coleman, and Stuart J. Khan, Analysis of organophosphate flame retardants and plasticisers in water by isotope dilution gas chromatography–electron ionisation tandem mass spectrometry, 2015.
- (二十) Yu Liu, Xiaofang Fu, Shu Tao, Liang Liu, Wei Li and Bingjun Meng, Comparison and Analysis of Organochlorine Pesticides and Hexabromobiphenyls in Environmental Samples by Gas Chromatography–Electron Capture Detector and Gas Chromatography–Mass Spectrometry, 2014.
- (二十一) M. Elizabeth Marder, Parinya Panuwet, Ronald E. Hunter, P. Barry Ryan, Michele Marcus, and Dana Boyd Barr, Quantification of Polybrominated and Polychlorinated Biphenyls in Human Matrices by Isotope-Dilution Gas Chromatography–Tandem Mass Spectrometry, 2016.
- (二十二) Zhenying Bie, Wei Lu, You Zhu, Yusong Chen, Hubo Ren, and Lishun Ji, Rapid determination of six carcinogenic primary aromatic amines in mainstream cigarette smoke by two-dimensional online solid phase extraction combined with liquid chromatography tandem mass spectrometry, 2017.
- (二十三) Clara Coscollà, Santiago Navarro-Olivares, Pedro Martí, Vicent Yusà, Application of the experimental design of experiments (DoE)

for the determination of organotin compounds in water samples using HS-SPME and GC-MS/MS, 2014.

(二十四) Tomoharu Sano, Hiroo Takagi, Kimiyo Nagano, and Masataka Nishikawa, Analysis of triorganotin compounds in water samples by hydrophilic interaction liquid chromatography-electrospray ionization-mass spectrometry, 2010.

註1：本文引用之公告方法之名稱及編碼，以行政院環境保護署最新公告者為準。

註2：當掃描模式無法達到法規管制所需之方法偵測極限要求，或化合物法規管制限值的檢測需求，須使用選擇離子監測模式進行檢測。

註3：樣品分析時，原則上以和法規管制值相近之濃度製作檢量線，並應考慮使用儀器之線性動態範圍(Linear dynamic range)及高倍稀釋造成之偏差。

表一 化學物質定性及定量分析方法參考表

CAS No	化學物質名稱	定性 ^{註1}	定量 ^{註1}
131-52-2	五氯酚鈉 Sodium pentachlorophenol	1, 2, 9, 10, 14	9, 10
50-00-0	甲醛 Formaldehyde	1, 2, HS-9 ^{註2} , 10, 11, 12	HS-9 ^{註2} , 10, 11, 12
117-81-7	鄰苯二甲酸二(2-乙基己基)酯 Bis (2-ethylhexyl) phthalate (DEHP)	1, 2, 3, 9, 10, 12, 13	3, 9, 10, 12, 13
117-84-0	鄰苯二甲酸二辛酯 1,2-Benzenedicarboxylic acid (DNOP)	1, 2, 9, 10, 12, 13	9, 10, 12, 13
28553-12-0 68515-48-0	鄰苯二甲酸二異壬酯 Diisononyl phthalate (DINP)	1, 2, 9, 10, 12, 13	9, 12, 13
26761-40-0 68515-49-1	鄰苯二甲酸二異癸酯 Diisodecyl phthalate (DIDP)	1, 2, 9, 10, 12, 13	9, 10, 12, 13
84-69-5	鄰苯二甲酸二異丁酯 Diisobutyl phthalate (DIBP)	1, 2, 9, 10, 12, 13	9, 10, 12, 13
84-74-2	鄰苯二甲酸二丁酯 Dibutyl phthalate (DBP)	1, 2, 3, 9, 10, 12, 13	3, 9, 10, 12, 13
569-64-2	孔雀綠 Malachite green	1, 2, 12, 13, 14	12, 13
110-16-7	順丁烯二酸(馬來酸) Maleic acid	1, 2, 11, 12, 13, 14	11, 12, 13
108-31-6	順丁烯二酸酐 Maleic anhydride	1, 2, 11, 12, 13, 14	11, 12, 13
150-69-6	對位乙氧基苯脲(甘精) (4-Ethoxyphenyl)urea、Dulcin	1, 2, 11, 12, 13, 14	11, 12, 13
624-49-7	富馬酸二甲酯	1, 2, 9, 10	9, 10

CAS No	化學物質名稱	定性 ^{註1}	定量 ^{註1}
	Dimethyl fumarate (DMF)		
1694-09-3	苄基紫 Benzyl violet 4B	1, 2, 11, 12, 13	11, 12, 13
587-98-4	皂黃 Metanil yellow	1, 2, 11, 12, 13	11, 12, 13
81-88-9	玫瑰紅 B Rhodamine B	1, 2, 12, 13, 14	12, 13
60-11-7	二甲基黃 Butter yellow	1, 2, 12, 13, 14	12, 13
108-78-1	三聚氰胺 Melamine	1, 2, 9, 11, 12, 13, 14	11, 12, 13
91-64-5	α-苯並吡喃酮 (香豆素) Coumarin	1, 2, 11, 12, 13, 14	11, 12, 13
842-07-9	蘇丹 1 號 Sudan 1	1, 2, 12, 13, 14	12, 13
3118-97-6	蘇丹 2 號 Sudan 2	1, 2, 12, 13	12, 13
85-86-9	蘇丹 3 號 Sudan 3	1, 2, 12, 13, 14	12, 13
85-83-6	蘇丹 4 號 Sudan 4	1, 2, 12, 13, 14	12, 13
1229-55-6	蘇丹紅 G Sudan red G	1, 2, 12, 13, 14	12, 13
2051-85-6	蘇丹橙 G Sudan orange G	1, 2, 12, 13, 14	12, 13
4197-25-5	蘇丹黑 B Sudan black B	1, 2, 12, 13	12, 13

CAS No	化學物質名稱	定性 ^{註1}	定量 ^{註1}
6368-72-5	蘇丹紅 7B Sudan red 7B	1, 2, 12, 13, 14	12, 13
2481-94-9	二乙基黃 Diethyl yellow/Solvent yellow 56	1, 2, 12, 13	12, 13
532-82-1	王金黃 (塊黃) Basic orange 2	1, 2, 12, 13, 14	12, 13
2465-27-2	鹽基性芥黃 Auramine	1, 2, 12, 13, 14	12, 13
915-67-3	紅色 2 號 Red No.2	1, 2, 12, 13, 14	12, 13
3567-69-9	氮紅 Azorubine	1, 2, 12, 13	12, 13
633-96-5	橘色 2 號 Orange 2	1, 2, 12, 13, 14	12, 13
64-19-7	醋酸 Acetic acid	1, 2	滴定分析法
77-92-9	檸檬酸 Citric acid	1, 2, 14	滴定分析法
8004-92-0	奎黃 Quinoline yellow	1, 2, 12, 13	12, 13
135-19-3	β -萘酚 (2-萘酚) β -naphthol, 2-naphthol	1, 2, 11, 12, 13, 14	11, 12, 13
69-72-7	水楊酸 Salicylic acid	1, 2, 11, 12, 13, 14	11, 12, 13
67-56-1	甲醇 Methanol	1, 2, 3, HS-9 ^{註2} , 10	3, HS-9 ^{註2} , 10
52-68-6	三氯松 (敵百蟲)	1, 2, 3, 6, 9, 10	3, 6, 9, 10

CAS No	化學物質名稱	定性 ^{註1}	定量 ^{註1}
	Trichlorfon, Dipterex		
62-73-7	二氯松 (敵敵畏) Dichlorvos	1, 2, 3, 6, 9, 10	3, 6, 9, 10
85535-84-8	短鏈氯化石蠟 Short-chain chlorinated paraffins	1, 2, 5, 9, 10	5, 9, 10
115-32-2 10606-46-9	大克蟎 Dicofol	1, 5, 9, 10, 11, 12, 13	5, 9, 10, 11, 12, 13
75-52-5	硝基甲烷 Nitromethane	1, 2, HS-9 ^{註2} , 10	HS-9 ^{註2} , 10
100-97-0	環六亞甲基四胺 Hexamethylenetetramine	1, 2, 9, 10, 12, 13, 14	9, 10, 12, 13
624-83-9	異氰酸甲酯 Methyl isocyanate	1, 9, 10, 11, 12, 13	9, 10, 11, 12, 13
593-60-2	溴乙烯 Vinyl bromide	3, 9, 10	3, 9, 10
115-96-8	三-(2-氯乙基)磷酸酯 Tris (2-chloroethyl) phosphate	1, 2, 4, 9, 10, 11, 12, 13	4, 9, 10, 11, 12, 13
5798-79-8	α-氯溴甲苯 α-Bromobenzyl cyanide	1, 2, 9, 10, 11, 12, 13	9, 10, 11, 12, 13
36355-01-8	六溴聯苯 Hexabromobiphenyl	5, 9, 10	5, 9, 10
3772-94-9	月桂酸五氯苯酯 Pentachlorophenyl laurate	5, 9, 10, 11, 12, 13	5, 9, 10, 11, 12, 13
13463-39-3	四羰化鎳 Nickel carbonyl	5, 9, 10, 14	5, 9, 10
2113-61-3	對-胺基聯苯鹽酸鹽 P-Aminobiphenyl hydrochloride	9, 10, 11, 12, 13	9, 10, 11, 12, 13

CAS No	化學物質名稱	定性 ^{註1}	定量 ^{註1}
553-00-4	2-萘胺醋酸鹽 2-Naphthylamine acetate	9, 10, 11, 12, 13	9, 10, 11, 12, 13
612-52-2	2-萘胺鹽酸鹽 2-Naphthylamine hydrochloride	9, 10, 11, 12, 13	9, 10, 11, 12, 13
36341-27-2	聯苯胺醋酸鹽 Benzidine acetate	9, 10, 11, 12, 13	9, 10, 11, 12, 13
531-86-2	聯苯胺硫酸鹽 Benzidine sulfate	9, 10, 11, 12, 13	9, 10, 11, 12, 13
531-85-1	聯苯胺二鹽酸鹽 Benzidine dihydrochloride	1, 2, 9, 10, 11, 12, 13	9, 10, 11, 12, 13
41766-73-8	聯苯胺二氫氟酸鹽 Benzidine dihydrofluoride	9, 10, 11, 12, 13	9, 10, 11, 12, 13
29806-76-6	聯苯胺過氯酸鹽 (一) Benzidine perchlorate	9, 10, 11, 12, 13	9, 10, 11, 12, 13
38668-12-1	聯苯胺過氯酸鹽 (二) Benzidine perchlorate	9, 10, 11, 12, 13	9, 10, 11, 12, 13
41195-21-5	聯苯胺二過氯酸鹽 Benzidine diperchlorate	9, 10, 11, 12, 13	9, 10, 11, 12, 13
56-36-0	醋酸三丁錫 Tributyltin acetate	4, HS-9 ^{註2} , 10, 12, 13	4, HS-9 ^{註2} , 10, 12, 13
1461-23-0	溴化三丁錫 Tributyltin bromide	4, HS-9 ^{註2} , 10, 12, 13	4, HS-9 ^{註2} , 10, 12, 13
1983-10-4	氟化三丁錫 Tributyltin fluoride	1, 2, 4, HS-9 ^{註2} , 10, 12, 13	4, HS-9 ^{註2} , 10, 12, 13
688-73-3	氫化三丁錫 Tributyltin hydride	1, 4, HS-9 ^{註2} , 10, 12, 13	4, HS-9 ^{註2} , 10, 12, 13
3090-36-6	月桂酸三丁錫	4, HS-9 ^{註2} , 10, 12,	4, HS-9 ^{註2} , 10,

CAS No	化學物質名稱	定性 ^{註1}	定量 ^{註1}
	Tributyltin laurate	13	12, 13
4027-18-3	順丁烯二酸三丁錫 Tributyltin maleate	4, HS-9 ^{註2} , 10, 12, 13	4, HS-9 ^{註2} , 10, 12, 13
962-89-0	溴化三苯錫 Triphenyltin bromide	4, 9, 10, 12, 13	4, 9, 10, 12, 13
379-52-2	氟化三苯錫 Triphenyltin fluoride	4, 9, 10, 12, 13	4, 9, 10, 12, 13
894-09-7	碘化三苯錫 Triphenyltin iodide	4, 9, 10, 12, 13	4, 9, 10, 12, 13
2767-61-5	溴化三丙錫 Tripropyltin bromide	9, 10	9, 10
-	氟化三丙錫 Tripropyltin fluoride	9, 10	9, 10
3440-79-7	三正丙基乙錫 Tri-n-propylethyltin	9, 10	9, 10
92154-74-0	三正丙基異丁錫 Tri-n-propylisobutyltin	9, 10	9, 10
3634-62-6	三正丙基正丁錫 Tri-n-propyl-n-butyltin	9, 10	9, 10
7342-45-2	碘化三正丙錫 Tri-n-propyltin iodide	9, 10	9, 10
2847-58-7	三苯基苄錫 Triphenylbenzyltin	4, 9, 10	4, 9, 10
1089-59-4	三苯基甲錫 Triphenylmethyltin	4, 9, 10	4, 9, 10
15807-28-0	三苯基-對-甲苯錫 Triphenyl-p-tolyltin	4, 9, 10	4, 9, 10

CAS No	化學物質名稱	定性 ^{註1}	定量 ^{註1}
-	三苯基- α -萘錫 Triphenyl- α -naphthyltin	4, 9, 10	4, 9, 10
-	溴化三甲苯錫 Tritolyltin bromide	9, 10	9, 10
353747-42-9	氯化三甲苯錫 Tritolyltin chloride	9, 10	9, 10
353747-43-0	氟化三甲苯錫 Tritolyltin fluoride	9, 10	9, 10
228262-76-8	氫氧化三甲苯錫 Tritolyltin hydroxide	9, 10	9, 10
353747-44-1	碘化三甲苯錫 Tritolyltin iodide	9, 10	9, 10
-	參(三苯錫)甲烷 Tritriphenylstannyl-methane	9, 10	9, 10
353747-45-2	溴化三萘錫 Trixylyltin bromide	9, 10	9, 10
353747-46-3	氯化三萘錫 Trixylyltin chloride	9, 10	9, 10
353747-47-4	氟化三萘錫 Trixylyltin fluoride	9, 10	9, 10
353747-48-5	碘化三萘錫 Trixylyltin iodide	9, 10	9, 10

^{註1} 1：拉曼光譜分析儀

3：氣相層析儀／火焰離子化偵測器

5：氣相層析儀／電子捕捉偵測器

7：氣相層析儀／熱導型偵測器

9：氣相層析質譜儀

11：液相層析儀／紫外線偵測器

2：紅外線光譜分析儀

4：氣相層析儀／火焰光度偵測器

6：氣相層析儀／氮磷偵測器

8：氣相層析儀／光離子化偵測器

10：氣相層析串聯式質譜儀

12：液相層析串聯式質譜儀

13：液相層析高解析質譜儀

14：X 射線繞射儀

^{註2} HS-9 為使用頂空進樣器之氣相層析質譜儀

表二 氣相或液相層析串聯質譜儀兩離子對比率(Ion ratio)規範

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