

行政院環境保護署公告

中華民國 107 年 9 月 13 日

環署授檢字第 1070005820 號

主 旨：預告訂定「化學物質中有機化合物檢測方法－液相層析法（NIEA T509.20C）」草案。

依 據：行政程序法第 154 條第 1 項。

公告事項：

- 一、訂定機關：行政院環境保護署。
- 二、訂定依據：廢棄物清理法第 75 條、毒性化學物質管理法第 25 條第 4 項。
- 三、草案如附件。本案另詳載於本署環境檢驗所網站（http://www.niea.gov.tw/niea/epa_www.asp）「環境檢測方法草案預告」網頁及公共政策網路參與平台之眾開講（<https://join.gov.tw/policies/>）。
- 四、對於本草案內容有任何意見或修正建議者，請於本預告刊登公報之次日起 60 日內陳述意見或洽詢：
 - (一) 承辦單位：行政院環境保護署環境檢驗所
 - (二) 地址：桃園市中壢區民族路 3 段 260 號
 - (三) 電話：(03)4915818 分機 2117
 - (四) 傳真號碼：(03)4910419
 - (五) 電子郵件：tjlin@epa.gov.tw

署 長 李應元

化學物質中有機化合物檢測方法－液相層析法（NIEA T509.20C）草案總說明

為執行化學物質之檢測，參考「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計畫」及行政院環境保護署公告檢測方法、衛生福利部食品藥物管理署之公告或建議檢驗方法、國際期刊相關內容文獻，爰依廢棄物清理法第七十五條、毒性化學物質管理法第二十五條第四項規定，擬具「化學物質中有機化合物檢測方法－液相層析法（NIEA T509.20C）」草案，其要點如下：

樣品經適當前處理，以液相層析儀搭配適當類型偵測器，例如紫外線偵測器、螢光偵測器、質譜儀或串聯式質譜儀等，進行化學物質中有機化合物檢測。

化學物質中有機化合物檢測方法－液相層析法（NIEA T509.20C）草案

公告	說明
主旨：公告「化學物質中有機化合物檢測方法－液相層析法（NIEA T509.20C）」，並自中華民國一百零八年四月十五日生效。	方法名稱及生效日期。
依據：廢棄物清理法第七十五條、毒性化學物質管理法第二十五條第四項。	法源依據。
公告事項：方法內容詳如附件。	方法內容。

化學物質中有機化合物檢測方法－液相層析法草案

NIEA T509.20C

一、方法概要

樣品溶於適當溶劑稀釋至適當體積，經過濾或其他適當之前處理程序，以液相層析儀(Liquid Chromatograph)搭配適當類型偵測器，例如紫外線偵測器(UV detector)、螢光偵測器(Fluorescence Detector)、質譜儀(Mass spectrometer)或串聯式質譜儀(Tandem Mass spectrometer)等，進行化學物質中有機化合物檢測。

二、適用範圍

本方法適用於毒性化學物質或毒性有害事業廢棄物樣品中所含之有機化合物檢測（註 1），可檢測之有機化合物如表一所列，其他未在表列中的毒性化學物質經驗證亦可適用本方法。

三、干擾

- （一）本方法的干擾可能來自於溶劑、試劑、器皿及樣品處理過程中所使用的硬體設備之污染，干擾物質會導致層析圖基線之漂移，須執行空白樣品的測試，以證明無干擾情形。
- （二）所有使用之實驗器皿應先用甲醇潤洗。
- （三）使用紫外光偵測器或螢光偵測器進行檢測時，樣品中若有其他化合物之極性與待測物類似，可能會造成干擾，其干擾程度依樣品基質不同而異，出現干擾時須以質譜儀進行分析或添加標準品進行確認。

四、設備與材料

- （一）分析天平：可精稱至 0.1 mg。
- （二）微量吸管(Micropipette)或注射器(Syringe)：10 μ L、100 μ L、250 μ L 及 1000 μ L。
- （三）定量瓶：硼矽玻璃材質，10.0 mL 和 25.0 mL。

- (四) 刻度濃縮管：硼矽玻璃材質，容量 20 mL，可定容至 2.0 mL。
- (五) 玻璃吸管。
- (六) 酸鹼試紙：測量範圍 pH 值 1 至 14。
- (七) 濾膜：0.22 μm 孔徑，PVDF、PTFE、Nylon 材質或同級品，依據不同化合物作適當選擇。
- (八) 液相層析儀搭配紫外線偵測器、螢光偵測器、質譜儀或串聯式質譜儀。

五、試劑

- (一) 試劑水：不含待測物之去離子水，或符合前述規格之市售純水。
- (二) 甲醇(Methanol)：LC 級或更高純度。
- (三) 氰甲烷(Acetonitrile)：LC 級或更高純度。
- (四) 甲酸(Formic acid)：試藥級。
- (五) 醋酸銨(Ammonium acetate)：試藥級。
- (六) 氨水(ammonium hydroxide)：試藥級。
- (七) 含 0.1% 甲酸的試劑水：取甲酸 1 mL 加試劑水至 1000 mL，或市售品。
- (八) 含 0.1% 甲酸的甲醇：取甲酸 1 mL 加入甲醇至 1000 mL，或市售品。
- (九) 含 0.1% 醋酸銨的純水：取醋酸銨 7.7 g 加試劑水至 1000 mL，或市售品。
- (十) 磷酸、三甲基胺、醋酸：試藥級或同級品。
- (十一) 儲備標準溶液：分別秤取約 10 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 1000 mg/L，

或使用經濃度確認之標準溶液。

(十二) 同位素內標準品：視需要使用。

六、採樣與保存

(一) 原物料及產品直接採集，原狀態攜至實驗室妥善保存。

(二) 其他性質樣品則依據本署公告之「事業廢棄物之採樣方法 NIEA R118」及其他相關檢測方法之規定執行。

七、步驟

(一) 樣品前處理

取適量樣品秤重後溶於適當溶劑，必要時使用酸鹼溶液（如甲酸或氨水等）調整 pH 值，並稀釋至適當體積，以 0.22 μm 孔徑適當材質濾膜過濾。分析人員可依前處理程序、液相層析儀、層析管柱及串聯式質譜儀廠牌的不同，適當調整本方法之樣品前處理程序，惟調整後之方法其執行檢測之所有步驟及程序，應符合本方法所述品質管制規範。

(二) 檢量線製備

1. 以適當溶劑配製至少 5 種不同濃度之標準溶液，檢量線濃度範圍依各待測物及儀器感度可作適當調整，若有適當內標準品，亦可添加使用。
2. 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。
3. 檢量線查核：每批次樣品分析前，應作檢量線查核，所測得濃度之相對誤差值不應超過 $\pm 20\%$ 。
4. 檢量線的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：

- (1) 線性迴歸法為利用統計技術製備最適直線之檢量線，最常用為最小平方法(Least squares method)。可根據內、外標準品以線性迴歸法製作檢量線，此校正公式可使電腦化儀器直接讀出濃度數據，作為定量之量測，為避免低濃度之偏差，可使用 $1/x$ 加權進行校正以提高低濃度數值之準確性。迴歸線之最適性，以相關係數(Correlation coefficient, r)評估。以線性迴歸法製作檢量線，線性相關係數必須大於或等於 0.995。
- (2) 校正因子校正法為利用各校正標準品測得的訊號(A_s)與各校正標準品中待測物的量或濃度(W_s)的比值，稱為校正因子(Calibration factor, CF)，由各校正因子可得平均校正因子(\overline{CF})，由 CF 及 \overline{CF} 再算出每一待測物的校正因子標準差(SD)及相對標準偏差($RSD\%$)，若 RSD 小於 25%，則可以平均校正因子作定量分析。若大於 25%，則以線性迴歸法定量。

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

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

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

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

- (3) 使用內標亦可以平均感應因子檢量，即針對用以製作檢量線的各點濃度以其待測物及內標之層析峰面積或高度對濃度計算個別之感應因子(見下式)，再求得平均感應因子與相對標準偏差(RSD)；若 RSD 小於 25%，則可以平均感應因子作定量分析。若大於 25%，則以線性迴歸法定量。

$$RF = \frac{A_S \times C_{IS}}{A_{IS} \times C_S}$$

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

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

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

(三) 樣品分析

1. 使用液相層析儀／紫外線偵測器分析時之參考條件如表二，可依實際需要適當調整。

定性準則：待測物之滯留時間須落在當天標準品或添加樣品待測物之滯留時間 $\pm 2.5\%$ 範圍之內，必要時可使用不同管柱分析或使用液相層析串聯質譜儀鑑別。

2. 使用液相層析串聯質譜儀分析時之參考條件如表三，可依實際需要適當調整（註2）。
 - (1) 使用液相層析串聯質譜系統之多重反應監測模式 (Multiple Reaction Monitoring mode, MRM) 時，對每一種化合物監測其母子離子對兩對，以其中感度較高的母子離子對作為定量，另一母子離子對則作為定性的依據，若感度較高的母子離子對有干擾，亦可以另一母子離子對作為定量。
 - (2) 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。

(3) 定性與定量準則

- A. 待測物之滯留時間須落在當天標準品或添加樣品待測物之滯留時間 $\pm 2.5\%$ 範圍之內。
- B. 若無特殊干擾，以待測物感度較高的監測母子離子對之面積來定量該待測物的含量。
- C. 待測物之定量及定性母子離子對須同時出現，定量離子對的訊噪比(S/N)必須 ≥ 10 ，定性離子對的訊噪比(S/N)必須 ≥ 3 。
- D. 當樣品中待測物濃度定量結果未超過法規管制標準二分之一時，即可出具報告；若超過法規管制標準二分之一時，須進行確認：待測物之定性離子與定量離子（積分面積或高度）的相對比值(Ion Ratio)須以標準品或添加樣品分析的母子離子對的比例為基準計算，應符合表四所列之管制範圍內。

八、結果處理

待測物濃度計算

（一）線性迴歸法、校正因子校正法

$$C\%(w/w) = \frac{C_a \times V \times D_f}{W \times 10^6} \times 100\%$$

C = 樣品濃度，

C_a = 由檢量線所求得之濃度， $\mu\text{g/mL}$

V = 樣品定容的體積， mL

D_f = 稀釋因子

W = 樣品取樣量，g

(二) 感應因子校正法

$$C\%(w/w) = \frac{A_s \times C_{IS} \times V \times D_f}{A_{IS} \times \overline{RF} \times W \times 10^6} \times 100\%$$

其中 A_s = 待測物之定量離子尖峰面積

C_{IS} = 注入內標準品濃度($\mu\text{g/mL}$)

V = 樣品定容體積(mL)

D_f = 稀釋倍數

A_{IS} = 內標準品的定量離子尖峰面積

\overline{RF} = 待測物的平均感應因子

W = 樣品取樣量(g)

九、品質管制

(一) 空白樣品分析：每批樣品分析時至少執行 1 次空白樣品分析，空白樣品分析值須低於待測物法規管制標準值的 5%。

(二) 重複樣品分析：每批樣品分析時至少執行 1 次重複樣品分析，其相對差異百分比應在 20% 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，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。

(二) 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。

- (三) 衛生福利部食品藥物管理署，食品中順丁烯二酸與順丁烯二酸酐總量之檢驗方法，TFDAA0010.01，中華民國 102 年。
- (四) 衛生福利部食品藥物管理署，食品中甜味劑之檢驗方法，TFDAA0009.01，中華民國 105 年。
- (五) 衛生福利部食品藥物管理署，食品中著色劑之檢驗方法－多重分析方法，TFDAA0065.00，中華民國 106 年。
- (六) Fuh, M. R.; Chia K. J. Determination of sulphonated azo dyes in food by ion-pair liquid chromatography with photodiode array and electrospray mass spectrometry detection. *Talanta*. 2002, 56, 663–671.
- (七) Lorenzola M.; Campob J.; Yolanda P. Ultra-high-pressure liquid chromatography tandem mass spectrometry method for the determination of 9 organophosphate flame retardants in water samples. *MethodsX*. 2016, 3, 343–349.

註1：本方法所稱之「毒性化學物質」或「毒性有害事業廢棄物」，係環保法規所定義之專有名詞。

註2：使用質譜儀進行檢測時，必須將質譜儀的條件調整至最佳化，以達到要求的解析度及質量的準確度。如層析管柱材質種類、管柱的長度、內徑、層析的流速、移動相及添加劑的選擇，都可能影響分析效果及儀器感度。而電灑法又和待測物、溶劑及流速的關係密切，所以需考量液體本身的電導係數及介電常數，以減少離子抑制的情況，以達到分析效率的最佳化。

表一 方法適用之有機化合物

毒性化學物質 列管編號	CAS No	化合物名稱	英文名稱
018-01	88-85-7	達諾殺	Dinoseb
024-01	1596-84-5	亞拉生長素	Daminozide
030-01	13121-70-5	錫蟊丹	Cyhexatin
050-01	79-06-1	丙烯醯胺	Acrylamide
068-01	117-81-7	鄰苯二甲酸二(2-乙基 己基)酯	Di(2-ethylhexyl)phthalate (DEHP)
068-02	117-84-0	鄰苯二甲酸二辛酯	Di-n-octyl phthalate (DNOP)
068-03	85-68-7	鄰苯二甲酸丁基苯甲酯	Benzyl butyl phthalate (BBP)
068-04	28553-12-0 68515-48-0	鄰苯二甲酸二異壬酯	Di-isononyl phthalate (DINP)
068-05	26761-40-0 68515-49-1	鄰苯二甲酸二異癸酯	Di-isodecyl phthalate (DIDP)
068-06	84-66-2	鄰苯二甲酸二乙酯	Diethyl phthalate (DEP)
068-09	131-16-8	鄰苯二甲酸二丙酯	Di-n-propyl Phthalate (DPP)
068-10	84-69-5	鄰苯二甲酸二異丁酯	Di-iso-butyl Phthalate (DIBP)
068-11	131-18-0	鄰苯二甲酸二戊酯	Di-n-pentyl Phthalate (DNPP)
068-12	84-75-3	鄰苯二甲酸二己酯	Di-n-hexyl Phthalate (DNHP)
068-13	84-61-7	鄰苯二甲酸二環己酯	Dicyclohexyl Phthalate (DCHP)
068-14	27554-26-3	鄰苯二甲酸二異辛酯	Di-iso-octyl Phthalate (DIOP)
068-15	84-76-4	鄰苯二甲酸二正壬酯	Di-n-nonyl phthalate (DNP)
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)
068-17	117-82-8	鄰苯二甲酸二甲氧乙酯	Bis (2-methoxyethyl) phthalate (BMEP)
068-18	605-54-9	鄰苯二甲酸雙-2-乙氧基 乙酯	Bis (2-ethoxyethyl)phthalate (BEEP)
068-19	75673-16-4	鄰苯二甲酸己基 2-乙基 己基酯	Hexyl 2-ethylhexyl phthalate (HEHP)

毒性化學物質 列管編號	CAS No	化合物名稱	英文名稱
068-20	117-83-9	鄰苯二甲酸二丁氧基乙酯	Bis (2-n-butoxyethyl) phthalate (BBEP)
068-21	84-62-8	鄰苯二甲酸二苯酯	Diphenyl phthalate (DPP)
068-22	523-31-9	鄰苯二甲酸二苄酯	Dibenzyl phthalate (DBZP)
068-23	4376-20-9	鄰苯二甲酸單(2-乙基己基)酯	Mono (2-ethylhexyl)phthalate (MEHP)
068-24	131-70-4	鄰苯二甲酸單丁酯	Mono-n-Butyl phthalate (MNBP)
080-01	131-11-3	鄰苯二甲酸二甲酯	Dimethyl phthalate (DMP)
080-02	84-74-2	鄰苯二甲酸二丁酯	Dibutyl phthalate (DBP)
119-01	139-13-9	三乙酸基氮	Nitrilotri acetic acid
135-01	126-72-7	三(2,3-二溴丙基)-磷酸酯	Tris-(2,3-dibromopropyl)-phosphate
144-01	62-56-6	硫脲	Thiourea (hiocarbamide)
148-05	1461-22-9	氯化三丁錫	Tributyltin chloride
148-21	639-58-7	氯化三苯錫	Triphenyltin chloride
165-01	25154-52-3 84852-15-3	壬基酚(壬酚)	Nonylphenol
165-02	9016-45-9 26027-38-3	壬基酚聚乙氧基醇	Nonylphenol polyethylene glycol ether
166-01	80-05-7	雙酚 A	4,4-isopropylidene diphenol (Bisphenol A)
169-01	1763-23-1	全氟辛烷磺酸	Perfluorooctane sulfonic acid
169-02	29457-72-5	全氟辛烷磺酸鋰鹽	Lithium perfluorooctane sulfonate
169-03	307-35-7	全氟辛烷磺醯氟	Perfluorooctane sulfonyl fluoride
175-01	569-64-2	孔雀綠	Malachite green
176-01	110-16-7	順丁稀二酸(馬來酸)	Maleic acid
176-02	108-31-6	順丁烯二酸酐	Maleic anhydride
177-01	150-69-6	對位乙氧基苯脲(甘精)	(4-Ethoxyphenyl) urea, Dulcin

毒性化學物質 列管編號	CAS No	化合物名稱	英文名稱
179-01	624-49-7	富馬酸二甲酯	Dimethyl fumarate (DMF)
180-01	1694-09-3	苄基紫	Benzyl violet 4B
181-01	587-98-4	皂黃	Metanil yellow
182-01	81-88-9	玫瑰紅 B	Rhodamine B
183-01	60-11-7	二甲基黃	Butter yellow
185-01	108-78-1	三聚氰胺	Melamine
186-01	91-64-5	α -苯並吡喃酮 (香豆素)	Coumarin
187-01	842-07-9	蘇丹 1 號	Sudan 1
187-02	3118-97-6	蘇丹 2 號	Sudan 2
187-03	85-86-9	蘇丹 3 號	Sudan 3
187-04	85-83-6	蘇丹 4 號	Sudan 4
187-05	1229-55-6	蘇丹紅 G	Sudan Red G
187-06	2051-85-6	蘇丹橙 G	Sudan Orange G
187-07	4197-25-5	蘇丹黑 B	Sudan Black B
187-08	6368-72-5	蘇丹紅 7B	Sudan Red 7B
188-01	2481-94-9	二乙基黃	Diethyl yellow/Solvent yellow 56
189-01	532-82-1	王金黃 (塊黃)	Basic orange 2
190-01	2465-27-2	鹽基性芥黃	Auramine
191-01	915-67-3	紅色 2 號	Red No.2
192-01	3567-69-9	氮紅	Azorubine
193-01	633-96-5	橘色 2 號	Orange2

表二 液相層析儀／紫外光偵測器參考條件

化合物	1.層析管柱(如下述或同級品)，2.移動相，3.流速，4.波長																								
順丁烯二酸	1. GL Sciences InertSustain C18, 5 μm(粒徑)× 250 mm(長)× 4.6 mm(內徑) 2. 0.1%磷酸： 甲 醇 = 98：2 (v/v) 3. 流速 1.0 mL/min 4. 波長 214 nm																								
順丁烯二酸酐	1. GL Sciences InertSustain C18, 5 μm(粒徑)× 250 mm(長)× 4.6 mm(內徑) 2. 0.1%磷酸： 甲 醇 = 98：2 (v/v) 3. 流速 1.0 mL/min 4. 波長 214 nm																								
對位乙氧苯脲	1. Phenyl, 5 μm(粒徑)× 150 mm(長)× 4.6 mm(內徑) 2. 乙腈：0.2%磷酸 = 12：88 (v/v) 3. 流速 1.0 mL/min 4. 波長 230 nm																								
香豆素	1. Supersil C8, 5 μm(粒徑)× 250 mm(長)× 4.6 mm(內徑) 2. A 為 5 Mm 醋酸銨溶液，B 為乙腈： 甲 醇(1：2, v/v)，A：B = 6：4 (v/v) 3. 流速 1.0 mL/min 4. 波長 280 nm																								
皂 黃	1. Cosmosil C18, 5 μm(粒徑)× 125 mm(長)× 2.0 mm(內徑) 2. A 為 3Mm Trimethylamine(pH 6.2)，B 為 甲 醇 <table border="1"><tr><td>Time (min)</td><td>0</td><td>5</td><td>10</td><td>15</td><td>30</td><td>35</td><td>40</td></tr><tr><td>A(%)</td><td>95</td><td>80</td><td>70</td><td>50</td><td>45</td><td>30</td><td>95</td></tr><tr><td>B(%)</td><td>5</td><td>20</td><td>30</td><td>50</td><td>55</td><td>70</td><td>5</td></tr></table> 3. 流速 0.2 mL/ min 4. 波長 430 nm	Time (min)	0	5	10	15	30	35	40	A(%)	95	80	70	50	45	30	95	B(%)	5	20	30	50	55	70	5
Time (min)	0	5	10	15	30	35	40																		
A(%)	95	80	70	50	45	30	95																		
B(%)	5	20	30	50	55	70	5																		
β-茶酚	1. Poroshell 120 EC-C18, 2.7 μm(粒徑)× 150 mm(長)× 3 mm(內徑) 2. A 為去離子水，B 為乙腈 <table border="1"><tr><td>Time (min)</td><td>0</td><td>3</td><td>8</td><td>10</td><td>11</td><td>15</td></tr><tr><td>A(%)</td><td>80</td><td>80</td><td>30</td><td>30</td><td>80</td><td>80</td></tr><tr><td>B(%)</td><td>20</td><td>20</td><td>70</td><td>70</td><td>20</td><td>20</td></tr></table> 3. 流速 0.7 mL/min 4. 波長 225 nm	Time (min)	0	3	8	10	11	15	A(%)	80	80	30	30	80	80	B(%)	20	20	70	70	20	20			
Time (min)	0	3	8	10	11	15																			
A(%)	80	80	30	30	80	80																			
B(%)	20	20	70	70	20	20																			

表三 液相層析串聯質譜儀參考條件

化合物	離子對 母離子 (m/z)> 子離子 (m/z)	離子化 模式	1.層析管柱, 2.移動相, 3.流速																														
達諾殺	239 > 192 239 > 134	-	1. Agilent ZORBAX Eclipse Plus C18, HD 1.8 μm(粒徑)× 100 mm(長) × 2.1 mm(內徑) 2. A 為 0.10 % 醋酸溶液, B 為乙腈, 流速 0.3 mL/min <table><tr><td>Time(min)</td><td>0</td><td>0.5</td><td>6.0</td><td>8.0</td></tr><tr><td>A(%)</td><td>95</td><td>95</td><td>0</td><td>0</td></tr><tr><td>B(%)</td><td>5</td><td>5</td><td>100</td><td>100</td></tr></table> 3. 流速 0.3 mL/min	Time(min)	0	0.5	6.0	8.0	A(%)	95	95	0	0	B(%)	5	5	100	100															
Time(min)	0	0.5	6.0	8.0																													
A(%)	95	95	0	0																													
B(%)	5	5	100	100																													
亞拉生長素	161 > 143 161 > 61	+	1. Agilent XDB-C18, 5 μm(粒徑)× 100 mm(長)× 4.6(內徑) 2. A 為 5 mM 醋酸銨: 0.05 % 甲酸溶液, B 為乙腈 <table><tr><td>Time(min)</td><td>0</td><td>2</td><td>12</td><td>18</td><td>18.1</td><td>24</td></tr><tr><td>A(%)</td><td>95</td><td>95</td><td>20</td><td>20</td><td>95</td><td>95</td></tr><tr><td>B(%)</td><td>5</td><td>5</td><td>80</td><td>80</td><td>5</td><td>5</td></tr></table> 3. 流速 0.5 mL/min	Time(min)	0	2	12	18	18.1	24	A(%)	95	95	20	20	95	95	B(%)	5	5	80	80	5	5									
Time(min)	0	2	12	18	18.1	24																											
A(%)	95	95	20	20	95	95																											
B(%)	5	5	80	80	5	5																											
丙烯醯胺	72 > 55 72 > 44	+	1. HSS T3, 1.8 μm(粒徑)× 100 mm(長)× 2.1mm(內徑) 2. 去離子水: 含 0.1% 甲酸的甲醇 = 9: 1(v/v) 3. 流速 0.2 mL/min																														
鄰苯二甲酸 二(2-乙基 己基)酯	391 > 149 391 > 279 391 > 167	+	HPLC 系統 1. Waters XBridge C18, 3.5 μm (粒徑)× 100 mm(長)× 2.1mm(內徑) 2. A 為 0.005%醋酸銨溶液, B 為甲醇 <table><tr><td>Time (min)</td><td>0</td><td>2</td><td>4.2</td><td>4.3</td><td>9.5</td><td>9.6</td><td>17</td><td>17.1</td><td>22</td></tr><tr><td>A(%)</td><td>75</td><td>50</td><td>50</td><td>20</td><td>20</td><td>0</td><td>0</td><td>75</td><td>75</td></tr><tr><td>B(%)</td><td>25</td><td>50</td><td>50</td><td>80</td><td>80</td><td>100</td><td>100</td><td>25</td><td>25</td></tr></table> 3. 流速 0.3 mL/min	Time (min)	0	2	4.2	4.3	9.5	9.6	17	17.1	22	A(%)	75	50	50	20	20	0	0	75	75	B(%)	25	50	50	80	80	100	100	25	25
Time (min)	0	2	4.2	4.3	9.5	9.6	17	17.1	22																								
A(%)	75	50	50	20	20	0	0	75	75																								
B(%)	25	50	50	80	80	100	100	25	25																								
鄰苯二甲酸 二辛酯	391 > 149 391 > 261 391 > 121	+																															
鄰苯二甲酸 丁基苯甲酯	313 > 149 313 > 205 313 > 239	+																															
鄰苯二甲酸 二異壬酯	419 > 149 419 > 275 419 > 293	+	UPLC 系統 1. ACQUITY CSH™ Phenyl Hexyl, 1.7μm(粒徑)× 100 mm(長)× 2.1mm(內徑) 2. A 為含 0.1%甲酸之試劑 B: 含 0.1%甲酸之乙腈 <table><tr><td>Time (min)</td><td>0</td><td>2</td><td>7.2</td><td>7.3</td><td>9.5</td><td>9.6</td><td>12.5</td><td>12.6</td><td>15</td></tr><tr><td>A(%)</td><td>75</td><td>50</td><td>50</td><td>20</td><td>20</td><td>0</td><td>0</td><td>75</td><td>75</td></tr><tr><td>B(%)</td><td>25</td><td>50</td><td>50</td><td>80</td><td>80</td><td>100</td><td>100</td><td>25</td><td>25</td></tr></table> 3. 流速 0.4 mL/min	Time (min)	0	2	7.2	7.3	9.5	9.6	12.5	12.6	15	A(%)	75	50	50	20	20	0	0	75	75	B(%)	25	50	50	80	80	100	100	25	25
Time (min)	0	2	7.2	7.3	9.5	9.6	12.5	12.6	15																								
A(%)	75	50	50	20	20	0	0	75	75																								
B(%)	25	50	50	80	80	100	100	25	25																								
鄰苯二甲酸 二異癸酯	447 > 149 447 > 289 447 > 307	+																															
鄰苯二甲酸 二乙酯	223 > 149 223 > 177	+																															
鄰苯二甲酸 二異丁酯	279 > 149 279 > 205	+																															
鄰苯二甲酸 二甲酯	195 > 163 195 > 133	+																															
鄰苯二甲酸 二丁酯	279 > 149 279 > 205	+																															

化合物	離子對 母離子 (m/z) > 子離子 (m/z)	離子化 模式	1.層析管柱, 2.移動相, 3.流速																								
雙酚 A	227 > 212 227 > 133	-	1. ACQUITY UPLC BEH Phenyl, 1.7 μm(粒徑) × 100 mm(長) × 2.16 mm(內徑) 2. 去離子水: 乙腈(3:2, v/v) 3. 流速 0.3 mL/min																								
孔雀綠	329 > 313 329 > 208	+	4. Symmetry® C8, 3.5 μm(粒徑) × 50 mm(長) × 2.0 mm(內徑) 5. A 為含 0.1%醋酸鉍之去離子水, B: 含 0.1%甲酸之乙腈 6. 流速 0.3 mL/min																								
對位乙氧基 苯脲(甘 精)	181 > 108 181 > 136	+	1. Eclipse Plus Phenyl-Hexyl, 4 μm(粒徑) × 100 mm(長) × 4.6 mm(內徑) 2. A 為 0.01 M 甲酸鉍/甲醇之去離子水 (9/1, v/v), B 為 0.01 M 甲酸鉍/甲醇之去離子水 (1/9, v/v) <table><tr><td>Time(min)</td><td>0</td><td>3</td><td>6</td><td>12</td><td>15</td><td>15.1</td><td>18</td></tr><tr><td>A(%)</td><td>80</td><td>80</td><td>60</td><td>20</td><td>20</td><td>80</td><td>80</td></tr><tr><td>B(%)</td><td>20</td><td>20</td><td>40</td><td>80</td><td>80</td><td>20</td><td>20</td></tr></table> 3. 流速 0.8 mL/min	Time(min)	0	3	6	12	15	15.1	18	A(%)	80	80	60	20	20	80	80	B(%)	20	20	40	80	80	20	20
Time(min)	0	3	6	12	15	15.1	18																				
A(%)	80	80	60	20	20	80	80																				
B(%)	20	20	40	80	80	20	20																				
苜蓿紫	710 > 630 710 > 540	-	1. Accucore aQ C18, 2.6μm(粒徑) × 150 mm(長) × 2.1 mm(內徑) 2. A 為 含 0.001%甲酸的醋酸鉍溶液, B 為含 0.1% 甲酸的乙腈 <table><tr><td>Time(min)</td><td>0</td><td>1</td><td>9</td><td>16</td><td>16.1</td><td>19</td></tr><tr><td>A(%)</td><td>99</td><td>99</td><td>1</td><td>1</td><td>99</td><td>99</td></tr><tr><td>B(%)</td><td>1</td><td>1</td><td>99</td><td>99</td><td>1</td><td>1</td></tr></table> 3. 流速 0.8 mL/min	Time(min)	0	1	9	16	16.1	19	A(%)	99	99	1	1	99	99	B(%)	1	1	99	99	1	1			
Time(min)	0	1	9	16	16.1	19																					
A(%)	99	99	1	1	99	99																					
B(%)	1	1	99	99	1	1																					
皂黃	354 > 100 354 > 117	+	1. Cosmosil C18, 5 m(粒徑) × 125 mm(長) × 2.0 mm(內徑) 2. A 為 pH 為 6.0 的 3 mM 三乙胺溶液, B 為甲醇 <table><tr><td>Time(min)</td><td>0</td><td>5</td><td>10</td><td>15</td><td>30</td><td>35</td><td>40</td></tr><tr><td>A(%)</td><td>95</td><td>80</td><td>70</td><td>50</td><td>45</td><td>30</td><td>95</td></tr><tr><td>B(%)</td><td>5</td><td>20</td><td>30</td><td>50</td><td>55</td><td>70</td><td>5</td></tr></table> 3. 流速 0.2 mL/min	Time(min)	0	5	10	15	30	35	40	A(%)	95	80	70	50	45	30	95	B(%)	5	20	30	50	55	70	5
Time(min)	0	5	10	15	30	35	40																				
A(%)	95	80	70	50	45	30	95																				
B(%)	5	20	30	50	55	70	5																				
玫瑰紅 B	443 > 399 443 > 355	+	1. Accucore aQ C18, 2.6μm(粒徑) × 150 mm(長) × 2.1 mm(內徑) 2. A 為 含 0.001%甲酸的醋酸鉍溶液, B 為含 0.1% 甲酸的乙腈 <table><tr><td>Time(min)</td><td>0</td><td>1</td><td>9</td><td>16</td><td>16.1</td><td>19</td></tr><tr><td>A(%)</td><td>99</td><td>99</td><td>1</td><td>1</td><td>99</td><td>99</td></tr><tr><td>B(%)</td><td>1</td><td>1</td><td>99</td><td>99</td><td>1</td><td>1</td></tr></table> 3. 流速 0.8 mL/min	Time(min)	0	1	9	16	16.1	19	A(%)	99	99	1	1	99	99	B(%)	1	1	99	99	1	1			
Time(min)	0	1	9	16	16.1	19																					
A(%)	99	99	1	1	99	99																					
B(%)	1	1	99	99	1	1																					
二甲基黃	226 > 77 226 > 120	+	1. ACQUITY UPLC® HSS T3, 1.8μm(粒徑) × 100 mm(長) × 2.1 mm(內徑) 2. A 為含 0.001%甲酸溶液, B 為含 0.001%甲酸之乙腈 <table><tr><td>Time(min)</td><td>0</td><td>3</td><td>12</td><td>25</td><td>32</td></tr><tr><td>A(%)</td><td>90</td><td>90</td><td>50</td><td>50</td><td>15</td></tr><tr><td>B(%)</td><td>10</td><td>10</td><td>50</td><td>50</td><td>85</td></tr></table> 3. 流速 0.2 mL/min	Time(min)	0	3	12	25	32	A(%)	90	90	50	50	15	B(%)	10	10	50	50	85						
Time(min)	0	3	12	25	32																						
A(%)	90	90	50	50	15																						
B(%)	10	10	50	50	85																						
三聚氰胺	127 > 85 127 > 68	+	1. ACQUITY UPLC® BEH HILIC, 1.7 μm(粒徑) × 100 mm(長) × 2.1 mm(內徑) 2. A 為乙腈, B 為 20 mM 醋酸鉍 (95:5, v/v) 3. 流速 0.4 mL/min																								

化合物	離子對 母離子 (m/z) > 子離子 (m/z)	離子化 模式	1.層析管柱，2.移動相，3.流速																											
α -苯並吡喃 酮(香豆素)	147 > 77 147 > 103	+	1. ACQUITY UPLC® BEH C18, 1.7 μ m(粒徑) \times 100 mm(長) \times 2.1 mm(內徑) 2. A 為含 0.1%甲酸的 90%甲醇, B 為含 0.1%甲酸的 10%甲醇 <table><tr><td>Time(min)</td><td>0</td><td>5</td><td>6</td><td>6.5</td><td>9</td></tr><tr><td>A(%)</td><td>0</td><td>100</td><td>100</td><td>0</td><td>0</td></tr><tr><td>B(%)</td><td>100</td><td>0</td><td>0</td><td>100</td><td>100</td></tr></table> 3. 流速 0.25 mL/min	Time(min)	0	5	6	6.5	9	A(%)	0	100	100	0	0	B(%)	100	0	0	100	100									
Time(min)	0	5	6	6.5	9																									
A(%)	0	100	100	0	0																									
B(%)	100	0	0	100	100																									
蘇丹紅 I	249 > 128 249 > 92	+																												
蘇丹紅 II	277 > 156 277 > 260	+																												
蘇丹紅 III	353 > 156 353 > 196	+																												
蘇丹紅 IV	381 > 224 381 > 276	+																												
蘇丹橙 G	215 > 93 215 > 95	+																												
蘇丹紅 G	279 > 123 279 > 108	+																												
蘇丹黑 B	457 > 193 457 > 211	+																												
蘇丹紅 7B	380 > 169 380 > 183	+	1. CORTECS C18, 1.6 μ m(粒徑) \times 150 mm(長) \times 2.1 mm(內徑) 2. A 為 0.1% 甲酸, B 為含 0.1% 甲酸之乙腈溶液 <table><tr><td>Time(min)</td><td>0</td><td>1</td><td>5</td><td>10</td><td>11</td><td>15</td><td>15.1</td><td>20</td></tr><tr><td>A(%)</td><td>60</td><td>60</td><td>15</td><td>15</td><td>0</td><td>0</td><td>60</td><td>60</td></tr><tr><td>B(%)</td><td>40</td><td>40</td><td>85</td><td>85</td><td>100</td><td>100</td><td>40</td><td>40</td></tr></table> 3. 流速 0.25 mL/min	Time(min)	0	1	5	10	11	15	15.1	20	A(%)	60	60	15	15	0	0	60	60	B(%)	40	40	85	85	100	100	40	40
Time(min)	0	1	5	10	11	15	15.1	20																						
A(%)	60	60	15	15	0	0	60	60																						
B(%)	40	40	85	85	100	100	40	40																						

表四 相對離子強度之容許誤差

相對強度 (% of Base Peak)	兩離子相對強度之 允許誤差
>50%	± 10%
>20% to 50%	± 15%
>10% to 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在 16% 至 24% 之間。