

化學戰劑鑑定技術與方法探討

作者簡介

作者陳連松少校，畢業於中正理工學院 54 期、化校正規班 96-2 期、元智大學工業工程與管理研究所碩士、國立清華大學生醫工程與環境科學系博士候選人，歷任排長、副連長、化學分析官、組長，現任核生化防護研究中心毒化組代組長。

提要

- 一、現場使用之化毒偵檢器體積小、攜帶方便、操作容易、對戰劑偵檢具有專一性，在緊急應變時，可於短時間判別化學戰劑存在。
- 二、實驗室儀器設備種類多、分析能力強，可執行精準定性及定量分析，唯分析時間較久，且須較佳之分析技術及檢測環境。
- 三、化學戰劑鑑定除直接檢測空氣、水或土壤中殘餘戰劑外，也可經由分析環境中水解之副產物或人體吸收後之代謝物，並據以推導原戰劑結構。
- 四、實驗室化學戰劑鑑定流程可區分為採樣、樣品前處理、儀器分析及數據判讀等步驟，多種分析結果有助於鑑別化學戰劑。

壹、前言

我國所面臨的核生化威脅來源包含中共核生化武力威脅、化生放核恐怖攻擊事件及輻射、生物、化學各類災害等。就武力威脅方面，中共雖已簽署《禁止化學武器公約》，但仍保有化學武器、投射載具及相關生產設施，具備化武攻擊作戰能力；就恐怖攻擊方面，從 911 恐怖攻擊中可發現，各種恐怖活動仍繼續盛行，隨著網路資訊流通，製備技術及原料易於獲得，軍用化學毒劑與高毒性之特製毒物被使用機率隨之提高；另在國內化學災害威脅部分，隨著科技發展，高毒性之毒化物使用數量及種類均倍數成長，且工業區經常緊臨住宅區，一旦發生意外或人為破壞時，常造成大規模之化學災害，嚴重影響民眾安全。

化學兵部隊專責國家核生化防衛、反恐制變及災害防救任務。戰時負責化學戰劑偵檢、取樣、後送鑑定、消除與指導各部隊核生化防護；平時則依災害防救法等相關法規，協助地方政府執行偵檢、監控與消除作業，避免污染擴散並降低災損，故化學兵部隊於平戰時皆須具備能執行化學戰劑偵檢、危害物鑑定及污染物除污等作業能力。

面對各種災害應變處理，除了強調人員安全防護外，最重要的是危害物辨識，只有辨識出危害種類後，才能擬定正確之應變作為。針對化學戰劑鑑定，其方式可區分為現地偵檢及實驗室分析兩大類，現地偵檢除偵檢片(紙)或檢知管外，執行初步化學戰劑類別辨識主要以可機動攜帶之儀器為主，若要精密鑑定戰劑之種類及化學結構，則需依賴實驗室精密分析設備。

貳、各式偵檢設備功能介紹

一、現場偵檢儀器介紹

國軍化學兵部隊現在使用於化學戰劑事故現場之偵檢設備很多，除簡易之 M8 偵檢紙、M256 偵檢片外，直讀式儀器包括 M8A1、ChemPro 100、M90 及 JCAD 等毒氣偵檢(警報)器及新近採購之 Hapsite 攜帶式氣相層析質譜儀(如圖 1)、化學遠距遙測偵檢器等精密設備。偵檢紙及偵檢片等屬簡易偵檢方法，本文中不作進一步介紹，其他各項儀器性能如表 1 所示，從表中可發現 M8A1、ChemPro 100、M90、JCAD 等直讀式偵檢器之偵檢原理雖然不同，但對神經性、糜爛性及血液性等不同戰劑皆具良好之偵檢能力，由於體積小、攜帶方便，故廣為世界各國部隊使用(註1、註2)。

(一)M8A1 毒氣警報器一般用於被動式化學毒劑監測及警示，較少用於主動式偵檢。

(二)ChemPro 100、M90 及 JCAD 偵檢器常用於事故現場偵檢，從偵檢能力及使用限制中可發現這些偵檢器受限於設計原理及內建資料庫數量，除表中所列化學戰劑種類外，對於工業毒化物的偵檢能力較薄弱，另須清除儀器內毒劑才可恢復連續偵檢功能，無法連續檢測。就未知化學戰劑鑑定目的言，這類型偵檢器僅能顯示毒劑種類及濃度高低，無法鑑別化學戰劑結構及劑量讀值，也就無法執行精準定性及定量分析。



圖 1 以 Hapsite 氣相層析質譜儀檢測不明氣體

資料來源：作者拍攝

註1 賴政國，「各國毒氣偵警系統發展」，《核生化防護季刊》，第 61 期，民國 87 年 8 月，頁 50～65。

註2 吳國輝，「化學戰劑偵檢原理與應用」，《核生化防護季刊》，第 70 期，民國 89 年 11 月，頁 34～42。

(三)攜帶式氣相層析質譜儀(Hapsite)，它是利用質譜分析技術對有機分子進行分析，分析能力超過其他直讀式毒氣偵檢器，除可偵檢化學戰劑外，亦可支援工業化毒偵檢。該型儀器偵檢能力強，可達 ppb(10^{-9})等級，若搭配濃縮裝置可達到 ppt(10^{-12})等級，它主要是偵檢揮發性有機氣體，若要執行半揮發性有機物分析，則須搭配頂空進樣前處理設備。另因電池電力限制，每次可操作時間僅約兩小時，將限制作業時間。此型儀器與實驗室使用之氣相層析質譜儀最大差異在於它已經模組化，許多儀器參數都已固定，操作者無法調整，這樣設計雖可提高操作者之便利性，但亦會犧牲部分檢測功能。

(四)化學遠距遙測偵檢器(RAPID)是利用被動式紅外光譜遙測技術，利用遙測方式對毒區實施偵檢，可偵檢 13 種化學戰劑、15 種工業毒化物及 13 種模擬試劑，偵檢能力達 ppm(10^{-6})等級，此儀器可偵知污染方向，兩具偵檢器搭配使用，可準確研判毒區範圍。

儀器名稱	偵檢原理	偵檢種類	使用限制
M8A1	離子遷移光譜	神經性戰劑	● 應用於毒劑監測 ● 僅能偵測氣體 ● 儀器老舊，穩定性差
ChemPro 100	離子遷移光譜 半導體偵測	神經性、糜爛性 血液性戰劑	● 無法顯示偵檢讀值 ● 需清除內部污染才可再偵檢 ● 僅能偵測氣體
M90	離子遷移光譜 半導體偵測	神經性、糜爛性 血液性戰劑	● 無法顯示偵檢讀值 ● 需清除內部污染才可再偵 ● 僅能偵測氣體
JCAD	表面聲波電化學	神經性、糜爛性 血液性戰劑	● 無法顯示偵檢讀值 ● 僅能偵測氣體
Hapsite GC/MS	質譜分析技術	各種揮發性有機 氣體	● 無法偵檢低揮發性物質 ● 無法偵檢低分子量物質 ● 耗電量大，使用時間受限 ● 需具備專業偵檢技術
RAPID	紅外光譜	13 種化學戰劑 15 種工業毒化物	● 易受環境溫度、溼度、毒劑雲大小影響 ● 可測得毒劑方向，需兩具以上才可獲得污染距離及範圍

表 1 各型偵檢(警報)器功能及使用限制表

資料來源：作者自製

二、實驗室分析儀器介紹

實驗室分析儀器應用大致可分為定性及定量分析。定性分析目的是確認樣品所含化學物質種類，定量分析是確認樣品中所含化學物質濃度，為達到此目的，分析樣品中所含成分必須先分離後再以各類型感測器(Sensor)偵測。氣相及液相層析儀就是運用層析管柱分別將氣體及液體分離之設備，各種不同化學成分經分離後，再以不同感測器完成定性及定量分析工作。化學戰劑屬於有機化學物質，理論上，一般實驗室用於分析有機物之儀器皆可運用於化學戰劑分析鑑定，表 2 所列為實驗室較常用之分析儀器，每種儀器都有它的功能及使用限制，如氣相層析儀主要是用於分析各種有機氣體，他的優點包含可搭配多種感測器，對樣品分析能力及解析度高，且技術成熟，已具備完整之質譜資料庫可供比對，是目前分析鑑定儀器功能最好的設備之一，但它也有缺點，僅能分析氣體且無法分析會熱裂解樣品，樣品須做複雜前處理。故對於化學戰劑鑑定需求，需要深入了解每項儀器應用原理及檢測能力，才有可能建立完整之檢測系統。以下就重要儀器做簡要介紹。

- (一)質譜儀：是一種測量荷質比(質量/電荷)的分析儀，它可獲得未知物分子量及可能結構。質譜儀主要分為兩部份，電離方式及質量分析方式，其中離子化方須視分析樣品特性，可選擇電子碰撞(EI)、化學電離(CI)、光電離(PI)、電噴灑法(ESCI)、大氣壓力游離法(APCI)等方式；質量分析方式因樣品差異導致其分子量大小有所不同，搭配離子化模式可選擇靜電磁扇區質譜、四極柱質譜、時間飛行質譜、離子阱質譜、迴旋共振質譜(註3)。以化學戰劑特性，氣相層析質譜儀選擇電子碰撞再以四極柱質譜分析方式較佳，其電子碰撞能量固定，所得到質譜圖已有完整資料庫提供比對，可減少人員判斷工作負荷並提高辨識度。液相層析質譜儀可選擇電噴灑法再以四極柱質譜分析方式較佳，此型儀器對化學戰劑分析能力更強，唯並無資料庫可供比對，需要更專業之判斷能力才能獲得較佳結果。

註3 R. Francis, R. Annick, "Chemical Analysis Modern Instrumental Methods and Techniques", 1998, pp289-293.

儀器名稱	應用原理	相關儀器型	優缺點分析
氣相層析儀 (GC)	以氣相層析管柱將不同氣體分子分離	GC-MS GC-NPD GC-FID GC-ECD GC-IR	● 可執行揮發性及半揮發性氣體 ● 可搭配偵檢器種類多 ● 解析度高 ● 有完整質譜資料庫 ● 無法分析熱列解樣品
液相層析儀 (LC)	以液相層析管柱將不同液體化合物分離	LC-MS LC-UV LC-IR	● 可執行各種液體樣品分析 ● 可分析大部分化學戰劑 ● 前處理較容易 ● 分離能力較 GC 差 ● 質譜儀仍無資料庫
紅外線光譜儀 (FTIR)	利用紅外光和分子作用所產生的分子振動量測其結構	FTIR LC-IR	● 可執行定性結構分析 ● 定量能力較差 - 判讀專業技術要求高
質譜儀 (MS)	測量荷質比以獲得樣品之分子量	GC-MS LC-MS ICP-MS IC-MS	● 為性能強大之感測器 ● 應用範圍廣 ● 技術成熟 ● 可執行定性及半定量分析
感應耦合電漿光譜儀 (ICP-OES)	以電漿激發原子產生發射光譜以測量含量	ICP-MS ICP-OES	● 可偵檢微量重金屬有機毒化物 ● 可執行放射性物質檢測
總有機碳分析儀 (TOC)	氧化劑氧化有機物以量測總有機物含量		● 可測總有機碳 ● 無法判別化學種類
紫外線光譜儀 (UV/vis)	不同化學分子對紫外光有不同之吸收特性	LC-UV	● 可作定量分析 ● 偵檢能力中等 ● 解析能力較差
核磁共振光譜儀 (NMR)	藉由改變磁場以量測分子結構	LC-NMR	● 需具奇數質子數或質量數 ● 定性能力強 ● 儀器設備昂貴
毛細管電泳法 (CZE)	由外加電場使帶電樣品在毛細管柱中分離		● 樣品須帶電荷 ● 解析能力強 ● 技術要求高

表 2 實驗室分析儀器應用原理及優缺點分析

資料來源：作者自製



圖 2 液相層析串聯質譜儀毒化物分析

資料來源：作者拍攝

(二)液相層析儀(LC)：是利用液相層析將不同化學物質分離的技術，原理是利用液體移動相攜帶樣品流經固定相，藉由不同化學物質在固定相和移動相之間的分配係數不同，造成各成分移動速率不同，而達到分離之目的，示意圖如圖 3 所示。分析時需依照待分析物特性選擇適合的層析方法及層析管柱，包含正相層析、逆相層析、離子交換層析、凝膠層析、親和層析等不同分離方式，樣品經分離後可搭配可見光/紫外光感測器、螢光感測器、折射率感測器、質譜儀等不同感測器（註4）。以化學戰劑特性，較常使用為逆相層析管柱，並搭配可見光/紫外光感測器。相較於氣相層析儀，液相層析能夠分析極性、非揮發性或熱不穩定之試樣；水溶液試樣可省略萃取等前處理流程，增加分析速度。

(三)氣相層析儀(GC)：其原理與液相層析儀類似，為利用氣體作為移動相之層析方法，其中載流氣體僅扮演攜帶功能並不具分離效果，典型之氣相層析儀組成如圖 4 所示。氣相層析主要分離之功能由管柱材質及管柱溫度所決定，依管柱性質可區分為：氣液相層析(GLC)及氣固相層析(GSC)。氣相層析儀可搭配感測器包含熱傳導度感測器(TCD)、火燄離子化感測器(FID)、電子捕捉感測器(ECD)、氮磷感測器(NPD)、火燄光度感測器(FPD)、質譜儀(MS)等，依所需分析樣品之結構或性質上差異去選擇感測器，通常分析化學戰劑常使用感測器為氮磷偵檢器、火焰光度感測器及質譜儀。

註4 D.A. Skoog, F.J. Holler, T. A. Nieman, "Principles of Instrument Analysis 4th", 1998, pp725-731.

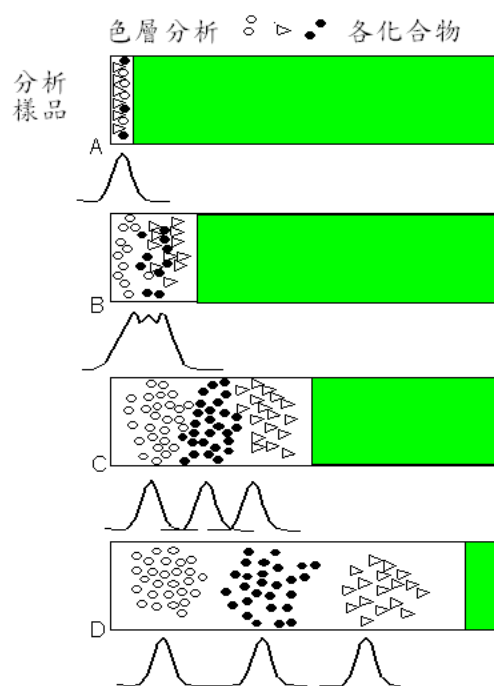


圖 3 色層分析示意圖

圖片來源：Chemical Analysis Modern Instrumental Methods and Techniques

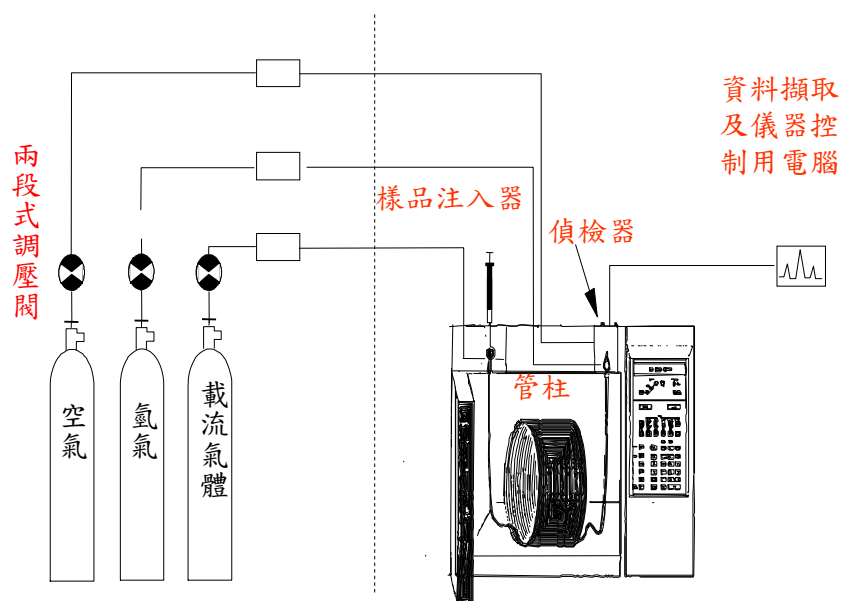


圖 4 典型之氣相層析儀組成

圖片來源：Chemical Analysis Modern Instrumental Methods and Techniques

(四)紅外線光譜儀(FTIR)：紅外線光譜儀係利用紅外光和分子作用所產生的分子振動，藉偵測分子官能基振動能量以判別其結構。紅外光譜也被稱

為分子的指紋，因分子的官能基可對應到特定譜峰位置（註5），如表 3 所示，如烯鍵之紅外光吸收波長位置於 1650 至 1670，此位置可判斷分子中含有烯鍵結構，故依據此紅外光譜可協助判斷分子的官能機結構。

官能基	譜峰位置 / cm^{-1}	譜峰強度
Alkane, C-H	2850–2960	中–強
Alkene, =C-H	3020–3100	中
Alkene, C=C	1650–1670	中
Alkyne, $\equiv\text{C-H}$	3300	強
Alkyne, $-\text{C}\equiv\text{C}-$	2100–2260	中
Amine, N-H	3310–3500	中
Amine, C-N	1030, 1230	中
Carbonyl, C=O	1670–1780	強
Carboxylic, O-H	2250–3100	很強
Nitrile, $\text{C}\equiv\text{N}$	2210–2260	中
Nitro compound, NO_2	1540	強

表3 紅外線光譜之官能基的差異對應譜峰位置

資料來源：Chemical Analysis Modern Instrumental Methods and Techniques

(五)核磁共振光譜儀（NMR）：核磁共振光譜儀是判斷分子結構重要工具，其原理是根據奇數的質子數或質量數，利用原子核的核自旋(nuclear spin)，藉由改變磁場，可獲得核磁共振圖譜，圖譜可知化學鍵結位置及原子數量（註6）。

參、化學戰劑鑑定方式探討

化學戰劑分析鑑定方式可分為直接偵檢法及衍生物推導法等兩種方式，直接偵檢法顧名思義就是直接偵檢化學戰劑並鑑別戰劑化學結構，此方式可在毒劑雲來臨前利用遙測方式偵檢，也可在毒氣到達時立即偵檢或透過採樣於實驗室進行精密分析；而衍生物推導法則是化學戰劑在施放後，透過測定環境中殘留之戰劑副產物反推其原始結構，因化學戰劑在環境中曾經水解或光解，所生成之副產物化學穩定性較高，可長時間存在於環境中，易於被偵檢。另分析戰劑經人體吸收後所產生之代謝產物，亦可推導戰劑種類。

註5 同註 3，頁 85.

註6 余靖，「核磁共振光譜在結構生物學的應用」，《清華大學化學系講義》，民國 90 年。

一、直接偵檢法

直接偵檢法是指直接分析出化學戰劑種類。現行作法是以現場偵檢為主，實驗室分析為輔，尤其緊急應變時，未必有足夠時間可進行實驗室分析，若第一時間可於現場檢測出化學戰劑，就可據以執行防護及應變作為，同時再輔以實驗室精密儀器確認，再依結果修正應變作為。

使用於現場之偵檢儀器須具備直接鑑別化學戰劑能力，目前我們所使用之直讀式儀器就能滿足這個需求。因這些儀器是特別針對化學戰劑偵檢所設計，是有專一性，其功能無法偵檢其它化學物質，即使儀器有訊號反應，因資料庫並未建立該資料訊息，也就無法判別化學物質種類，故在使用 ChemPro 100 等化學戰劑偵檢器時需有清楚的認知，它僅能辨識資料庫內之化學戰劑，若災害現場儀器無反應，並不代表沒有其它毒化物存在，僅能表示沒有儀器能偵檢的化學戰劑存在。現場化學戰劑偵檢器因體積小、操作快速、方便、專一性高、技術要求較低等優點，尚可滿足目前化學兵任務需求。另考量未來國軍建構 C4ISR「指管通資情監偵」系統之發展遠景，未來購案裝備應能整合於 C4ISR 系統。

實驗室分析儀器分析能力強，相對的其操作技術要求較高，從樣品採樣、前處理、儀器分析條件設定、結果研判等每一個階段都必須具備嚴格品管要求，才可能得到預期結果，由於實驗室儀器並非專一性設計，所以針對化學戰劑鑑定更必須有豐富之分析經驗，這些經驗來自於平時對毒化物之分析、已發表的論文期刊蒐整、已知的檢測方法建置等等，最佳的方式當然是以化學戰劑標準品實施分析，以標準樣品分析才可精準建立每一種儀器之標準分析方法，另外也能從其它毒化物分析經驗及期刊論文中建立分析方法。



圖 5 氣相層析質譜儀毒化物分析

圖片來源：作者拍攝

二、衍生物推導法

衍生物推導法是應用化學戰劑衍生副產物，藉由偵檢副產物以推測化學戰劑之存在。一般來說化學戰劑散布過程會因爆炸而大量損失，如沙林、**所門**、**太奔**在 150°C 以上會明顯分解，沙林毒劑在爆炸時，瞬間分解可達到 30%，這些戰劑經施放散布，會短時間飄散，經過一段時間後在空氣中就很難測到戰劑存在。若以化學兵部隊現行支援作戰方式或應援方式，到達戰劑施放點需要一段時間，有可能現場直讀式儀器已無法有效偵檢。所幸化學戰劑在環境中會受自然環境影響，如水解或光解成其它副產物，而這些副產物較穩定，可長時間存在水中或泥土中，圖 6 為 VX 神經性戰劑水解後之副產物化學結構（註 7），VX 經水解後會生成 EMPA、MPA 等化合物，透過 EMPA 及 MPA 檢測，可推導出 VX 戰劑存在，此種檢測方式僅有實驗室之精密儀器才有能力執行，圖 7 即為利用液相層析串聯質譜儀分析 VX 戰劑衍生物之質譜圖，從圖中可判別 EMPA 及 MPA 的存在。故建立化學戰劑副產物標準分析方法對化學戰劑鑑定有極大助益。

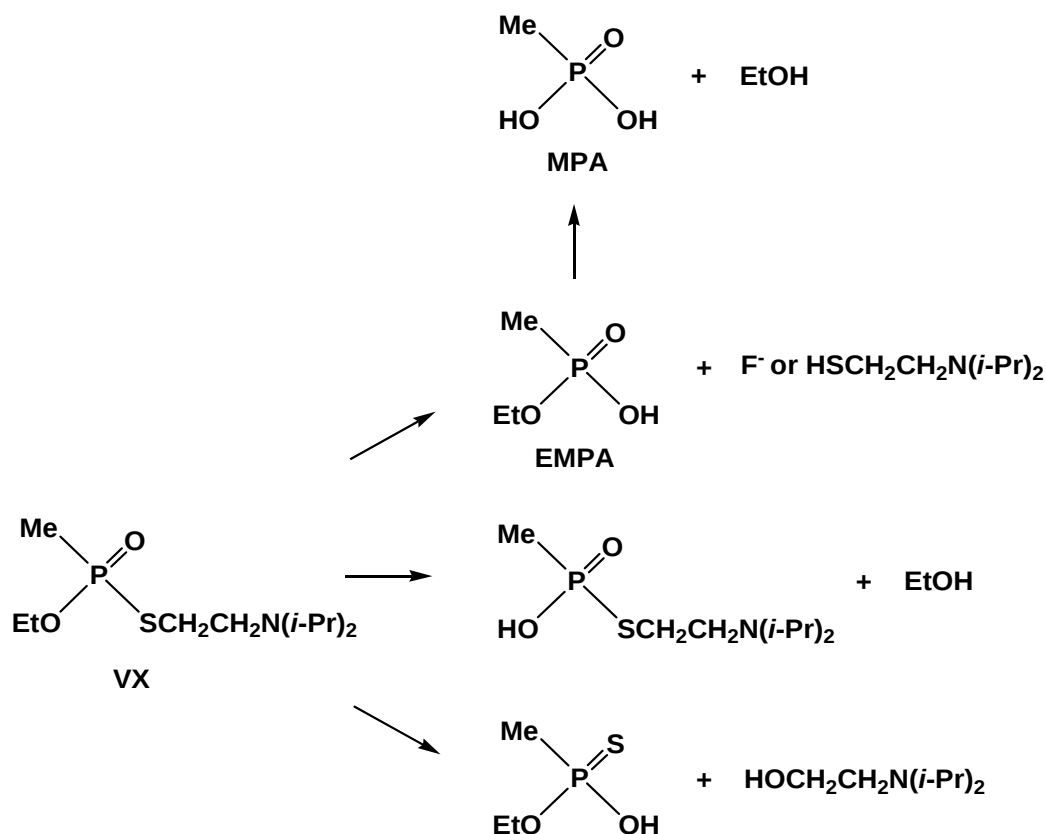


圖 6 VX 神經戰劑水解副產物

資料來源：Analytical Chemistry

註 7 Masaaki Noami, "Improved tert-Butyldimethylsilylation Gas Chromatographic/Mass Spectrometric Detection of Nerve Gas Hydrolysis Products from Soils by Pretreatment of Aqueous Alkaline Extraction and Strong Anion-Exchange Solid-Phase Extraction", Analytical Chemistry, 2002, 74, pp4709-4715.

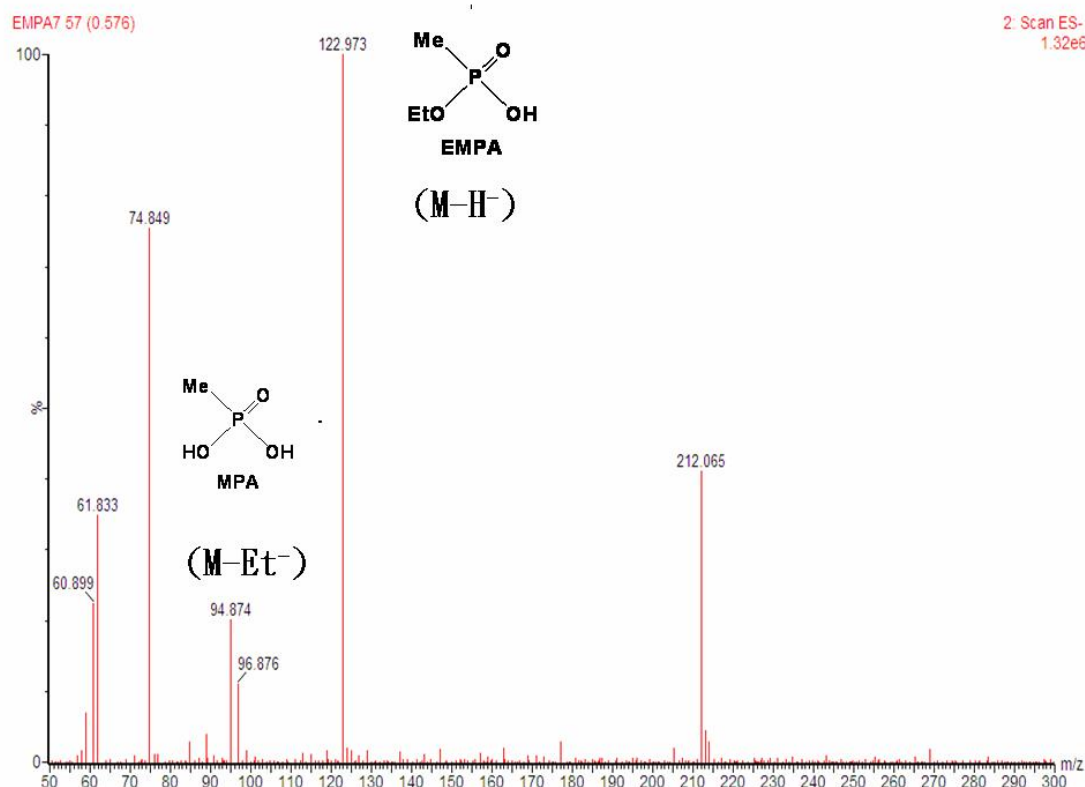


圖 7 利用液相層析串聯質譜儀分析 VX 戰劑衍生物質譜圖

資料來源：作者繪製

肆、化學戰劑鑑定流程

一、實驗室鑑定流程

化學武器公約組織（OPCW）對於化學戰劑分析實驗室有一套完整的要求規範，包含樣品採集、樣品處理、儀器設備性能、檢測方法及品管要求等不同規範，認為須與化學戰劑標準品相符或有兩種分析方法以上之圖譜證明，才能確認化學戰劑種類。一般化學戰劑鑑定流程如圖 8 所示，此流程包含 4 個步驟（註8）：

步驟 1：為樣品採樣，採樣可分為氣體、液體及土壤等三大類，採樣點選擇及採樣技術對結果影響很大，有一句常說的諺語「Garbage in and garbage out」可清楚解釋採樣在分析時之重要性，若所採集之樣品不具代表性或沒有採到污染物，縱使儀器分析能力再強，也無法有效分析鑑別。

步驟 2：為樣品製備，一般精密分析儀器都須經過適當前處理，不能直接將高濃度污染物進行分析，因為高濃度污染物會導致系統阻塞及系統嚴重污染，造成儀器損壞或分析誤差，而不同儀器有不同前處理方法，如以氣相層析質譜儀（GC/MS）進行有機毒化物分析時，為測量水中或

註 8 M. Mesilaakso, Encyclopedia of Environmental Analysis and Remediation”, 1998, pp949-971.

土壤中有機毒化物含量，通常利用有機溶劑進行萃取，運用各種萃取技術將污染物分離，並經過濾處理及定量後才能進行分析。同時此步驟也需製備品管樣品、參考樣品及空白樣品以進行定性及定量分析。

步驟 3：為儀器檢測分析，包含定性分析、定量分析及結構鑑定。第一階段先對特定元素分析，重要儀器設備包含氣相層析質譜儀、氣相層析儀、液相層析質譜儀、毛細管電泳分析儀、核磁共振光譜儀等，如某些戰劑含有氮、磷、硫等元素，就可以利用氣相層析儀搭配氮磷偵檢器（GC/NPD）或電子捕捉偵檢器（GC/ECD）量測氮、磷、硫等元素含量，搭配參考樣品、品管樣品及分析滯留時間，可初步研判戰劑種類並完成定量分析。第二階段主要執行定性分析，重要儀器設備包含氣相層析質譜儀、液相層析質譜儀、氣相層析紅外線光譜儀、核磁共振光譜儀等，如質譜儀可分析化學物質分子量，搭配二次質譜，藉由量測化學物分子量及其碎片產物，再比對資料庫，可判別化學結構。

步驟 4：此步驟為數據分析，與化學戰劑標準品相符或兩種分析方法以上之圖譜證明，即可確認化學戰劑種類。若沒有符合此項要求，則需綜整各種儀器分析結果，並據以推測可能化學結構，執行此步驟分析時，需要對每樣儀器分析結果有清楚的認知及判讀能力，如儀器分析條件、層析圖譜、總離子圖譜、質譜圖、二次質譜圖、滯留時間...等等，若無法完成戰劑鑑定作業，對未知物則須以合成或比對參考樣品方式再重新執行分析。

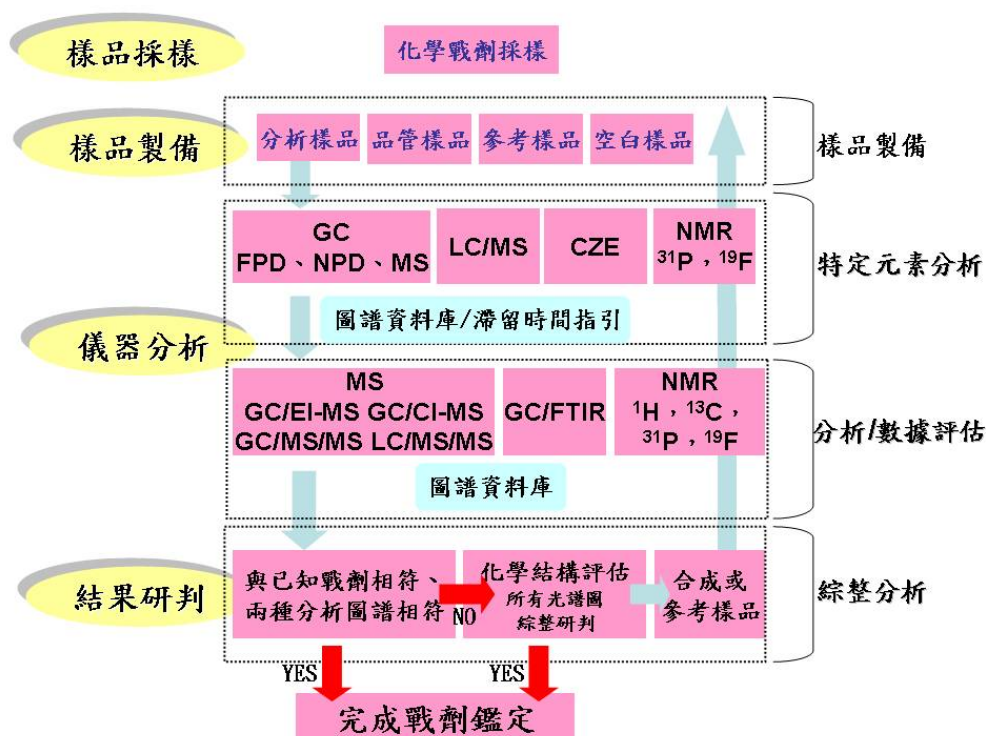


圖 8 未知化學戰劑鑑定流程

資料來源：Encyclopedia of Environmental Analysis and Remediation

二、實例分析

實驗室化學戰劑分析著名案例，一個是兩伊戰爭所檢測出之化學戰劑，兩伊戰爭所使用之神經毒氣是由瑞典的 National Defence Research Institute 及瑞士 AC Laboratory 檢出，其採樣方式是以活性碳吸附空氣中之戰劑，在樣品製備時以有機溶劑萃取及純化，並加入參考樣品比對。儀器分析主要是利用 GC/MS 測出分子量及樣品滯留時間，從離子碎片推測出可能的化學結構，再比對參考樣品後判斷戰劑種類；第二種儀器係以 ^{13}C -NMR 及 ^{31}P -NMR 鑑定結構位置，兩種儀器檢測結果重覆確認後即可判別戰劑種類。第二個例子是東京地鐵沙林毒氣事件，是由日本科學警察研究所分析地鐵車廂殘留不純沙林樣品，樣品是採集殘留液體，製備樣品時須以溶劑純化處理，再利用 GC 及 GC/MS 等儀器進行分析，分析時檢測出沙林、沙林副產物、溶劑、沙林前驅物化學物質，結果研判透過質譜、滯留時間比對，再加上沙林副產物及沙林前驅物結構，可推測出存在有沙林毒劑。（註9）

為進一步說明判讀方法，假設對一未知樣品是否含有化學戰劑執行分析，使用 LC/MS 及 NMR 儀器，以 LC/MS 分析時，依儀器檢測流程，將採集到的樣品經 0.22 微米過濾錠過濾，並等比例溶於乙腈溶劑中，使用 C-18 逆向層析管柱，以電子噴灑法將樣品離子化，再設定質譜分析參數，分析過程需微調移動相組成、梯度流速、氣體流量、氣化溫度、離子化條件和質譜分析條件等參數，方可得到較佳之 LC/MS 圖譜，圖 9 所示為 LC/MS 圖譜（註10），圖譜中存在 $(\text{M}+\text{H})^+$ 、 $(\text{MH}+\text{ACN})^+$ 與二聚體的 $(2\text{M}+\text{H})^+$ 的波峰，可判斷具有 140 分子量的化合物存在，而沙林分子量為 140，可初步判別可能有沙林存在，另外質譜儀也可進行二次質譜分析，針對分子量 141 位置再給予一能量，藉由觀察分子碎片，也可協助判斷分子結構。

分子量確認後再以 NMR 進行定性分析，圖 10 為沙林的 ^1H -NMR 圖譜（註11），沙林上有三種不同化學位移氫原子，以 TMS 為參考標準時，其化學位移分別在 0.9ppm (s, P-CH₃)、1.16ppm (d, O-CH) 和 3.57ppm (m, -CH₃)，積分比為 3:6:1，耦合數可觀查出分別有 2 個及 6 個 H 相互影響，依此可確定 H 的位置及數量。圖 11 為沙林的 ^{13}C -NMR 圖譜，沙林上有三種不同位置之碳原子，以 TMS 為參考標準時其化學位移分別在 12.4ppm (P-CH₃)、24.3ppm (O-CH) 和 71.3ppm (-CH₃)，積分比為 1:2:1，依此資訊可確定 ^{13}C 的數量及位置。綜整兩種儀器分析結果，LC/MS 可獲知未知物之分子量及可能結構，配合 ^1H -NMR, ^{13}C -NMR 圖譜的化學位移、積分比和分裂峰，可以確定相關化學結構位置，兩種儀器分析結果使我們可以確定待測物有神經戰劑沙

註9 張虞安，「化學生物兵器概論」，《藝軒圖書出版社》，民國 91 年 8 月，頁 53~62。

註10 Paul A D'Agostion, "Determination of sarin, soman and their hydrolysis products in soil by packed capillary liquid chromatography-electrospray mass spectrometry", Journal of Chromatography A, 912, 2001, pp291-299.

註11 www.cambridgesoft.com. "ChemDraw Ultra v8.0"軟體繪製。

林的存在。

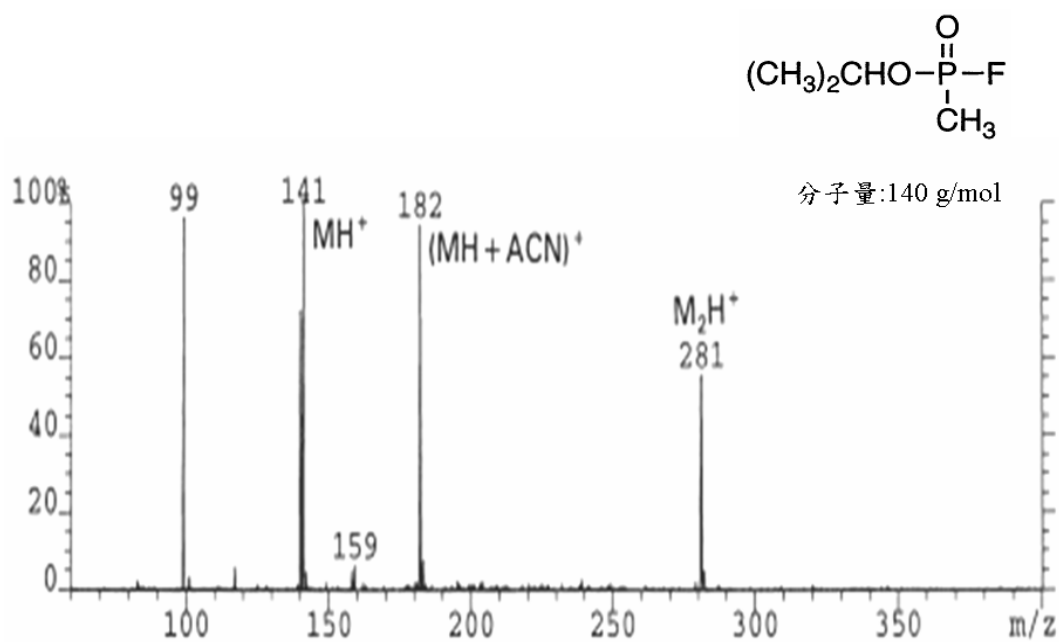


圖9 沙林的LC/MS質譜圖

圖片來源：Journal of Chromatography A

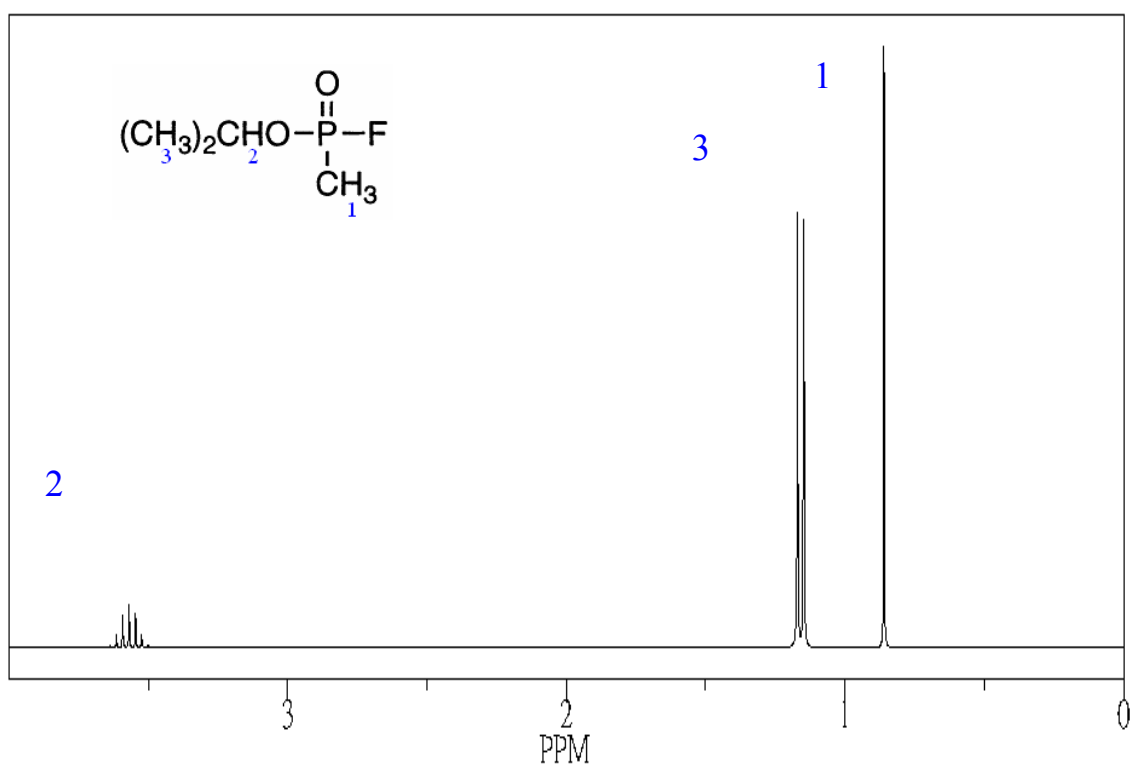
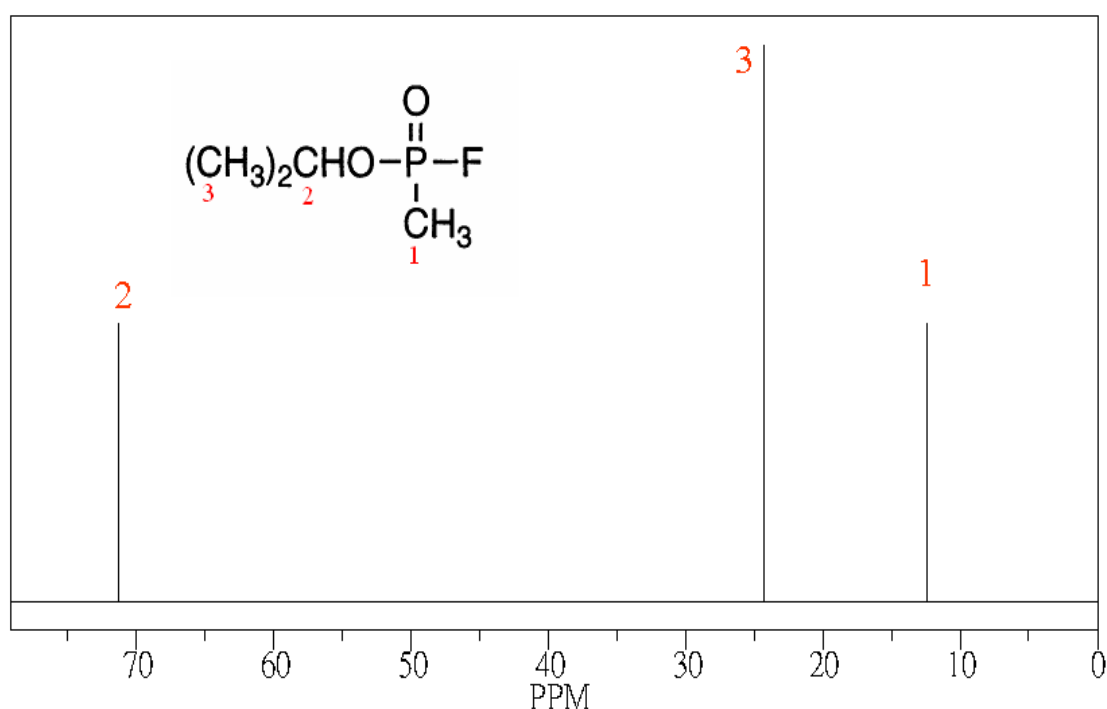


圖10 沙林的 ^1H -NMR圖譜

資料來源：作者繪製

圖11 沙林的 ^{13}C -NMR圖譜

資料來源：作者繪製

伍、結語

未知化學戰劑鑑定並非將樣品直接注入儀器後，答案就可以立即出來，而是需要精密儀器配合專業技術，才能精準鑑別化學結構及含量，依化學兵任務需求，除了在核生化戰場上執行化學戰劑分析外，平時亦須支援化災應援檢測任務，這兩大任務皆須在短時間內精準判別毒化物種類，以利後續應變處理。目前已建置多種性能優異的現場直讀式儀器，可迅速執行化學戰劑初步檢測。實驗室精密儀器分析目前也已建置基本檢測能力，未來硬體設施方面仍須陸續建置防護等級較高之檢測空間及新式儀器設備；技術能力方面也須持續厚植各類型戰劑衍生物分析技術。實驗室分析技術最重要的就是人力資源，純熟的化毒分析技術人才需要長期培養，建立全方位專業檢測能力，須結合新式儀器、純熟人力及檢測經驗等條件，缺一不可。

參考文獻

一、書籍：

1. 余靖，「核磁共振光譜在結構生物學的應用」，《清華大學化學系講義》，民國 90 年。
2. 張虞安譯，《化學生物兵器概論》，藝軒圖書出版社，民國 91 年 8 月。
3. R. Francis, R. Annick, Chemical Analysis Modern Instrumental Methods and

Techniques, 1998.

4.D. A. Skoog, F.J. Holler, T. A. Nieman, Principles of Instrument Analysis 4th, 1998.

5.M. Mesilaakso, Encyclopedia of Environmental Analysis and Remediation, 1998.

二、期刊：

1. 賴政國，「各國毒氣偵警系統發展」，《核生化防護季刊》，第 61 期，民國 87 年 8 月。
2. 吳國輝，「化學戰劑偵檢原理與應用」，《核生化防護季刊》，第 70 期，民國 89 年 11 月。
3. M. Noami, " Improved tert-Butyldimethylsilylation Gas Chromatographic/Mass Spectrometric Detection of Nerve Gas Hydrolysis Products from Soils by Pretreatment of Aqueous Alkaline Extraction and Strong Anion-Exchange Solid-Phase Extraction" , Analytical Chemistry, 74, 2002.
4. Paul A D' Agostion, " Determination of sarin, soman and the their hydrolysis products in soil by packed capillary liquid chromatography – electrospray mass spectrometry" , Journal of Chromatography A, 912, 2001.

三、軟體：

1. Chemoffice Ultra v8.0