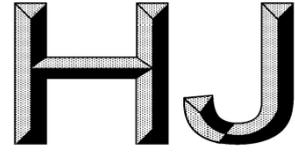


附件 2



中华人民共和国国家环境保护标准

HJ □□□□-20□□

环境空气 挥发性有机物的测定

便携式气相色谱-质谱法

Ambient Air – Determination of Volatile Organic Compounds-Portable Gas

Chromatography-Mass Spectrometry

(征求意见稿)

202□-□□-□□发布

202□-□□-□□实施

生态环境部 发布

目 次

前 言.....	ii
1 适用范围.....	1
2 规范性引用文件.....	1
3 术语和定义.....	1
4 方法原理.....	1
5 干扰和消除.....	2
6 试剂和材料.....	2
7 仪器和设备.....	2
8 样品.....	3
9 分析步骤.....	4
10 结果表示与计算.....	6
11 精密度和准确度.....	8
12 质量保证和质量控制.....	8
13 废物处理.....	9
14 注意事项.....	9
附录 A（规范性附录）目标化合物检出限及测定下限.....	10
附录 B（资料性附录）总离子流图.....	12
附录 C（资料性附录）目标化合物的保留时间和特征离子.....	13
附录 D（资料性附录）方法的精密度和准确度.....	15

前 言

为贯彻《中华人民共和国环境保护法》和《中华人民共和国大气污染防治法》，保护生态环境，保障人体健康，规范环境空气中挥发性有机物的测定方法，制定本标准。

本标准规定了测定环境空气中挥发性有机物的便携式气相色谱-质谱法。

本标准的附录A为规范性附录，附录B~附录D为资料性附录。

本标准为首次发布。

本标准由生态环境部生态环境监测司、法规与标准司组织制订。

本标准起草单位：中国环境监测总站，上海市环境监测中心，中国测试技术研究院。

本标准验证单位：北京市环境保护监测中心、山西省生态环境监测中心、四川省生态环境监测总站、成都市环境监测中心站、上海市浦东新区环境监测站、金华市环境监测中心站。

本标准生态环境部20□□年□□月□□日批准。

本标准自20□□年□□月□□日起实施。

本标准由生态环境部解释。

环境空气 挥发性有机物的测定 便携式气相色谱-质谱法

警告：本方法使用的标准品为易挥发的有毒化学品，应在通风条件下进行，操作时应按照要求佩戴防护器具，避免吸入或接触皮肤和衣物。

1 适用范围

本标准规定了测定环境空气中挥发性有机物的便携式气相色谱-质谱法。

本标准适用于环境空气和污染源无组织排放监控点空气中甲苯等 52 种挥发性有机物的测定，其它挥发性有机物如果通过方法适用性验证，也可采用本标准测定。

在突发环境事件应急监测或实际需要时，52 种挥发性有机物以外的化合物，也可采用本标准进行初步定性和浓度估算。

在全扫描模式下，采用本标准规定的进样量，方法检出限为 $3 \mu\text{g}/\text{m}^3 \sim 9 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ，测定下限为 $12 \mu\text{g}/\text{m}^3 \sim 36 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ，详见附录 A。

2 规范性引用文件

本标准内容引用了下列文件或其中的条款。凡是不注日期的引用文件，其有效版本适用于本标准。

HJ/T 55	大气污染物无组织排放监测技术导则
HJ 194	环境空气质量手工监测技术规范
HJ 589	突发环境事件应急监测技术规范
HJ 604	环境空气 总烃、甲烷和非甲烷总烃的测定 直接进样-气相色谱法
HJ 732	固定污染源废气 挥发性有机物的采样 气袋法
HJ 759	环境空气 挥发性有机物的测定 罐采样/气相色谱-质谱法

3 术语和定义

下列术语和定义适用于本标准。

便携式气相色谱-质谱仪 Portable Gas Chromatography-Mass Spectrometer

可用内置电池供电，使用气相色谱-质谱联用技术对某一种化合物或多种化合物进行定性、定量分析的便于人员携带的仪器。

内标 Internal Standard

结构与目标化合物相似，在试样中不存在且可添加到制备的试样、校准工作物中用于定量测定目标化合物的化合物。

4 方法原理

环境空气样品经吸附、热脱附后，进入气相色谱分离，用质谱检测器进行检测。

对于 52 种目标化合物，通过与标准物质质谱图和保留时间比较定性，内标法定量；对于 52 种目标化合物以外的物质，通过与标准物质质谱图比较初步定性，根据其响应值与内标的响应值之比，估算其浓度。

5 干扰和消除

与一种或多种目标化合物性质接近的挥发性有机物会对测定产生干扰。一般通过调整仪器条件，选择不同极性的色谱柱，或选择更长的色谱柱等方式消除干扰。

6 试剂和材料

6.1 标准气：浓度不低于 1 $\mu\text{mol/mol}$ ，压力不低于 1.0 MPa，可保存一年（或参见标准气证书的相关说明）。根据实际工作需要，购买有证标准气体或在有资质单位定制合适的混合标准气体。也可采用静态稀释法，使用液体标准物质配制。

6.2 标准使用气：使用气体稀释仪（7.3）将标准气（6.1）用高纯气（6.5）稀释至指定浓度（ nmol/mol ）。也可采用静态稀释法，使用液体标准物质配制。

6.3 内标标准气：组分为 1,3,5-三（三氟甲基）苯和溴五氟苯，可保存 1 年（或参见标准气证书的相关说明）。在满足方法要求且不干扰目标化合物的前提下，也可采用其它物质作为内标物。

6.4 吸附剂：Tenax、Carbopack 等复合填料吸附剂，或者其他等效吸附剂。

6.5 高纯氮气或高纯氦气：纯度不低于 99.999%。

7 仪器和设备

7.1 便携式气相色谱-质谱联用仪：具有温度控制功能的采样模块、吸附热脱附模块、气相色谱模块（具程序升温功能），以及四极杆或离子阱质谱模块，具自动加入内标功能。质谱模块具有 70 eV 电子轰击（EI）离子源，有全扫描/选择离子扫描、自动/手动调谐、谱库检索及定量分析等功能。

7.2 毛细管色谱柱：根据需要选取 15 m \times 0.25 mm，1.0 μm 膜厚（100%二甲基聚硅氧烷固定相）或其它等效毛细管色谱柱。

7.3 气体稀释仪：最大稀释倍数不小于 100 倍。

7.4 采样罐：内壁惰性化处理的不锈钢罐，耐压值 >241 kPa，应符合 HJ 759 相关要求。

7.5 气袋：氟聚合物薄膜气袋，应符合 HJ 732 相关要求。

7.6 真空压力表：最大允许误差应不超过 1 kPa（0.14 psi），压力范围：-101 kPa~202 kPa。

7.7 接头：用于采样罐（7.4）与气袋（7.5）连接。

8 样品

8.1 样品采集

样品可在现场使用便携式气相色谱-质谱仪采样模块直接采集分析，亦可用采样罐（7.4）或气袋（7.5）采样后分析。环境样品按照 HJ 194 相关规定采样；污染源无组织排放样品按照 HJ/T 55 相关规定采样；突发性环境事件应急监测时按照 HJ 589 相关规定采样。

8.1.1 直接进样

根据现场具体情况，使用便携式气相色谱-质谱仪采样模块直接进样测定。

8.1.2 罐采样或气袋采样

罐采样方式参照 HJ 759；气袋采样方式参照 HJ 604 和 HJ 732。

8.2 样品保存

采样罐样品：样品在常温下保存，采样后尽快分析，20 d 内分析完毕。

气袋样品：样品避光保存，采样后尽快分析，一般不超过 8 h。

8.3 试样的制备

若使用采样罐（7.4）采集样品，应按照如下方法制备试样：

使用气体稀释仪（7.3）或真空压力表（7.6）测定罐内压力并记录 X_a ，用高纯气（6.5）加压至约 2 倍大气压并记录 Y_a ，按式（1）计算稀释倍数。然后用接头（7.7）将罐内部分气体导入气袋进行冲洗 2~3 次，冲洗完毕后排空气袋内气体，重新导入气体，待分析。

$$f = \frac{Y_a}{X_a} \quad (1)$$

式中： f ——稀释倍数，无量纲；

X_a ——稀释前的罐压力，kPa；

Y_a ——稀释后的罐压力，kPa。

8.4 空白试样

8.4.1 系统空白

将高纯气（6.5）注入预先清洗好的气袋（7.5）。

8.4.2 全程序空白

将高纯气（6.5）注入预先清洗好的气袋（7.5）或预先清洗好并抽至真空的采样罐（7.4）带至采样现场，与同批次采集的样品采用相同的运输、保存和制备条件。

9 分析步骤

9.1 仪器参考条件

9.1.1 调整仪器条件

根据使用的仪器和使用说明书，分析时对照下述条件，调整吸附热脱附条件、气相色谱条件和质谱条件。

9.1.2 吸附热脱附模块参考条件

加热平衡温度 50 °C；加热平衡时间 10 min；取样针温度 60 °C；传输线温度 60 °C；定量环体积为 200 μ l 或 400 μ l。

吸附管采样流量：100 ml/min；进样量：5 ml~600 ml；吸附管脱附温度：300 °C；吸附管预脱附时间：0.1 min；吸附管脱附时间：0.5 min。

9.1.3 气相色谱参考条件

柱流量(恒流模式)：1.0 ml/min 或 0.2 ml/min；程序升温：60 °C 保持 3 min，以 18 °C/min 升至 130 °C，再以 30 °C/min 升温至 200 °C，在 200 °C 保持 1 min。

9.1.4 质谱参考条件

离子源：EI；离子化能量：70 eV；扫描方式：全扫描；扫描范围：41 amu ~300 amu；其余参数可参照仪器使用说明书进行设定，亦可采用选择离子扫描方式。

参考条件下测定目标化合物标准物质得到的总离子流色谱图见附录 B。

9.2 校准

9.2.1 仪器性能检查

开机启动之后，首先对 GC-MS 系统进行仪器性能检查，根据仪器说明书运行相应检查。为保证检测结果的准确性，开机启动后或连续运行 12 h 后，应进行质谱功能调谐，调谐物质根据仪器说明书选择，关键离子丰度必须符合表 1 或表 2 的标准，或仪器制造商规定的标准，否则须对质谱仪的参数进行调整。

表 1 1,3,5-三(三氟甲基)苯与溴五氟苯同时调谐时关键离子丰度标准

质量数	离子丰度标准	质量数	离子丰度标准
50	质量数117的0.5%~2.5%	167	质量117数的50%~70%
55	质量数117的2%~5%	213	质量117数的10%~20%
69	质量数117的8%~16%	246	质量117数的15%~40%
93	质量数117的15%~25%	263	质量117数的5%~15%
117	基峰，100%相对丰度	282	质量117数的5%~15%

表 2 全氟三丁胺的关键离子丰度标准

质量数	离子丰度标准	质量数	离子丰度标准
69	基峰, 100%相对丰度	100	质量数69的5%~50%
131	质量数69的20%~70%	264	质量数69的5%~50%

9.2.2 校准曲线的绘制

通过气体稀释仪（7.3）用高纯气（6.5）稀释标准气（6.1）；或采用静态稀释法，使用液体标准物质配制标准使用气，配制成低、高两种浓度系列。低浓度系列为 2.0 nmol/mol、5.0 nmol/mol、10.0 nmol/mol、25.0 nmol/mol、50.0 nmol/mol；高浓度系列为 50.0 nmol/mol、100 nmol/mol、200 nmol/mol、400 nmol/mol、600 nmol/mol。按照仪器参考条件（9.1）依次从低浓度到高浓度进行测定，绘制校准曲线。

实际工作中，根据待测样品中挥发性有机物可能的浓度范围选择配制低浓度系列校准曲线或高浓度系列校准曲线。

9.2.3 平均响应因子法

按照公式（2）计算目标物的相对响应因子（ RRF ），按照公式（3）计算目标物全部标准浓度点的平均相对响应因子（ \overline{RRF} ）。

$$RRF = \frac{A_x}{A_{is}} \times \frac{\varphi_{is}}{\varphi_x} \quad (2)$$

式中： RRF ——目标化合物的相对响应因子，无量纲；

A_x ——目标化合物定量离子峰面积；

A_{is} ——内标化合物定量离子峰面积；

φ_{is} ——内标化合物的摩尔分数，nmol/mol；

φ_x ——目标化合物的摩尔分数，nmol/mol。

$$\overline{RRF} = \frac{\sum_i^n RRF_i}{n} \quad (3)$$

式中： \overline{RRF} ——目标化合物的平均相对响应因子，无量纲；

RRF_i ——标准系列中第 i 点目标化合物的相对响应因子，无量纲；

n ——标准系列点数。

9.2.4 校准曲线法

以目标组分含量与内标物含量的比值为横坐标，以目标物组分定量离子响应值与内标物定量离子响应值的比值为纵坐标，绘制校准曲线。

9.3 样品浓度预估

试样测定前，应先通过仪器速查分析方法，预估样品浓度。根据样品预估浓度，选择合

适的进样量。

按仪器使用说明测定样品，分析系统空白时，仪器响应值为 TIC_b ，分析样品时，仪器响应值为 TIC_m ，计算公式（4）如下：

$$C_e = (TIC_m - TIC_b) \times k \quad (4)$$

式中： C_e ——估算总的VOCs浓度，nmol/mol；

TIC_m ——速查的最大TIC响应值；

TIC_b ——速查的基线TIC响应值；

k ——浓度预估系数，参考仪器使用说明。

注：若样品中挥发性有机物总浓度低于100 nmol/mol，建议进样体积为100 ml或以上；若样品中挥发性有机物总浓度低于100 nmol/mol，建议进样体积为100 ml以下，并依据仪器型号选择调节分流比。

9.4 试样测定

9.4.1 直接采样测定

用采样模块直接采集样品，按照 9.1 的参考条件进行测定。

9.4.2 气袋采样测定

将气袋试样连接至采样模块，按照 9.1 的参考条件进行测定。

9.4.3 罐采样测定

将制备好的试样（8.3）连接至采样模块，按照 9.1 的参考条件选择进行测定。

9.5 空白试验

按照与试样测定相同的条件和步骤进行系统空白（8.4.1）和全程序空白（8.4.2）的测定。

10 结果表示与计算

10.1 目标化合物

10.1.1 定性分析

根据样品中目标化合物与标准系列中目标化合物的保留时间、碎片离子质荷比及其丰度比信息相比较，对目标化合物进行定性。应多次分析标准物质得到目标化合物的保留时间均值，以平均保留时间±3倍的标准偏差为保留时间窗口，样品中目标化合物的保留时间应在其范围内。

目标化合物的标准质谱图中相对丰度高于30%的所有离子应在样品质谱图中存在，样品质谱图和标准质谱图中上述特征离子的相对丰度偏差要在±30%以内。如果实际样品存在明显背景干扰，比较时应扣除背景影响。

10.1.2 定量分析

目标化合物经定性鉴别后,采用平均相对响应因子或校准曲线法进行定量计算。目标组分的定量离子和定性离子参见附录 C。

10.1.2.1 平均相对响应因子法

采用平均相对响应因子法计算时,样品中目标化合物的质量浓度 ρ_x 按式 (5) 进行计算。

$$\rho_x = \frac{\rho_{is} \times A_x}{RRF \times A_{is}} \times \frac{M}{22.4} \times f \quad (5)$$

式中: ρ_x ——试样中目标物的质量浓度, $\mu\text{g}/\text{m}^3$;

ρ_{is} ——试样中内标物的体积浓度, nmol/mol ;

A_x ——试样中目标物定量离子的响应值;

A_{is} ——试样中内标物定量离子的响应值;

M ——目标化合物的摩尔质量, g/mol ;

f ——稀释倍数,无量纲,仅在使用罐采样时参与计算;

22.4——标准状态下 (273.15 K, 101.325 kPa) 下气体的摩尔体积, L/mol 。

10.1.2.2 校准曲线法

当目标物采用线性校准曲线进行校准时,试样中目标化合物质量浓度 ρ_x 通过相应的校准曲线计算。

10.2 目标外化合物

10.2.1 使用条件

若待测物质不在标准系列中目标化合物范围内,可根据实际需要对其进行初步定性分析和浓度估算。

10.2.2 目标外化合物初步定性分析

以全扫描方式进行测定,比较样品质谱图和谱库标准物质质谱图,谱库标准质谱图中相对丰度高于 30% 的所有离子应在样品质谱图中存在,样品质谱图和标准质谱图中上述特征离子的相对丰度偏差要在 $\pm 30\%$ 以内。

应依据质谱图和谱库匹配度等信息,结合经验判断得出样品初步定性结论。

10.2.3 目标外化合物的浓度估算

样品中目标外化合物质量浓度 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) 按照式 (7) 估算。

$$\rho_x = \rho_{is} \times \frac{A_x}{A_{is}} \times \frac{M}{22.4} \times f \quad (7)$$

式中: ρ_x ——样品中目标外化合物的浓度, $\mu\text{g}/\text{m}^3$;

ρ_{is} ——内标物的浓度, nmol/mol ;

A_x ——样品中目标外化合物的定量离子峰面积;

- A_{is} ——样品中内标物的定量离子峰面积；
 M ——目标外化合物的摩尔质量，g/mol；
 f ——稀释倍数，无量纲，仅在使用罐采样时参与计算；
22.4——标准状态下（273.15 K，101.325 kPa）气体的摩尔体积，L/mol。

10.3 结果表示

当测定结果小于 $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ 时，保留至整数位；当测定结果大于等于 $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ 时，保留三位有效数字。

对目标外化合物，定性结果后应附质谱图匹配度结果。

注：本标准规定的色谱柱不能有效分离间二甲苯和对二甲苯，结果以二者浓度之和表示。

11 精密度和准确度

11.1 精密度

六家实验室分别对 $5.0 \text{ nmol}/\text{mol}$ 、 $25.0 \text{ nmol}/\text{mol}$ 、 $45.0 \text{ nmol}/\text{mol}$ 和 $200 \text{ nmol}/\text{mol}$ 的实际样品加标样品进行了精密度测定，实验室内相对标准偏差范围分别为 2.2%~25%、1.1%~24%、0.6%~14%、1.0%~13%；实验室间相对标准偏差分别为 4.1%~32%、3.5%~20%、2.9%~24%、2.5%~28%；重复性限分别为 $3.3 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ~ $62 \mu\text{g}/\text{m}^3$ 、 $17 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ~ $70 \mu\text{g}/\text{m}^3$ 、 $19 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ~ $1.3 \times 10^2 \mu\text{g}/\text{m}^3$ 、 $34 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ~ $4.3 \times 10^2 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ；再现性限分别为 $4.7 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ~ $36 \mu\text{g}/\text{m}^3$ 、 $21 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ~ $1.5 \times 10^2 \mu\text{g}/\text{m}^3$ 、 $26 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ~ $1.4 \times 10^2 \mu\text{g}/\text{m}^3$ 、 $1.4 \times 10^2 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ~ $7.8 \times 10^2 \mu\text{g}/\text{m}^3$ 。详见附录 D。

11.2 准确度

六家实验室对加标量 $5.0 \text{ nmol}/\text{mol}$ 、 $45.0 \text{ nmol}/\text{mol}$ 、 $200 \text{ nmol}/\text{mol}$ 样品重复进行 6 次实际样品加标回收率测定，加标回收率范围为：86.5%~107%、92.7%~105%、94.3%~106%；加标回收率最终值分别为 $98.6\% \pm 36.2\%$ 、 $100\% \pm 27.0\%$ 、 $99.0\% \pm 33.0\%$ 。详见附录 D。

12 质量保证和质量控制

12.1 空白

每测定 20 个样品或每批次（ ≤ 20 个样品）应分析一个空白试样（8.4），空白试样中目标化合物浓度应低于方法检出限，否则应采取措施排除污染并重新分析同批样品。

若使用采样罐（7.4）或气袋（7.5）采集样品送至实验室，使用本标准进行分析，应同时测定系统空白（8.4.1）和全程序空白（8.4.2）；若在现场直接测定样品，则仅需测定系统空白（8.4.1）。

12.2 内标物

校准曲线现场检查时，内标与校准曲线中间点内标的保留时间变化不超过 20s，定量离子峰面积变化在 60%~140%之间。

12.3 校准

标准系列至少需要 3 个浓度点（不含零浓度点），采用平均相对响应因子法校准时，标准系列各点目标组分的相对响应因子（RRF）的相对标准偏差（RSD）应 $\leq 30\%$ ；采用校准曲线法校准时，曲线的相关系数应 ≥ 0.990 。否则，应查找原因，重新绘制校准曲线。

连续分析时，每 24 h 分析一次标准系列中间浓度点，其测定结果与标准值间的相对误差在 $\pm 30\%$ 以内。否则，须重新绘制校准曲线。

在突发环境污染事故应急监测紧急情况下，可采用标准系列中间浓度点或次高浓度点进行单点校准。

12.4 定性

标准质谱图中相对丰度高于 30%的所有离子应在样品质谱图中存在，样品质谱图和标准质谱图中上述特征离子的相对丰度偏差要在 $\pm 30\%$ 以内。

对目标外化合物进行初步定性，应结合质谱图信息、谱库匹配度信息及经验判断得出初步定性结论，有条件时，可使用标准物质进一步确认。

13 废物处理

过期的标准气体，应委托供应商或有资质的单位回收处理。

14 注意事项

14.1 突发环境事件应急监测采样时，操作人员应采取必要的防护措施，保障人身安全。

14.2 防爆区内不能使用便携式气相色谱-质谱仪。

14.3 所有样品经过的管路和接头均需进行惰化处理，并保温以消除样品吸附、冷凝和交叉污染。

14.4 样品进样量应根据所选用的仪器及样品预估浓度优化确定。

14.5 对于初步定性的目标外化合物，应在报告中予以注明，并标注匹配度结果；若需进一步准确定量，需采集样品至实验室，使用校准曲线准确定量。

14.6 当分析一个高含量试样后，应分析一个或多个空白试样检查交叉污染。如发生交叉污染，须采取烘烤仪器管线等相应措施，确认不存在污染后再继续进行测试。

14.7 当分析实际样品时，若化合物的目标离子受到干扰，可采用辅助离子进行定量。

附录 A
(规范性附录)

目标化合物检出限及测定下限

当进样量为 400 ml，分流比为 40:1，或进样量为 100 ml，不分流，在全扫描模式下，目标化合物检出限及测定下限统计结果见表 A.1。

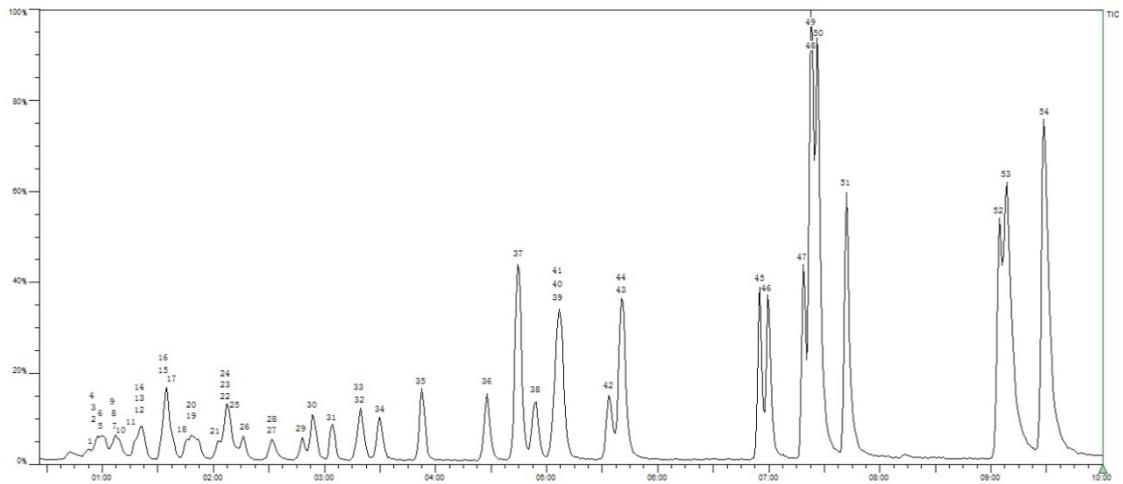
表 A.1 目标化合物检出限及测定下限

序号	化合物名称	CAS NO.	摩尔质量 (g/mol)	检出限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	测定下限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
1	丙烯腈	107-13-1	53.06	3	12
2	1,1-二氯乙烯	74-96-4	96.94	6	24
3	溴乙烷	75-35-4	108.96	4	16
4	二氯甲烷	75-09-2	84.93	3	12
5	1,1,2-三氯-1,2,2-三氟乙烷	76-13-1	187.39	8	32
6	二硫化碳	75-15-0	76.14	3	12
7	反式-1,2-二氯乙烯	156-59-2	96.94	3	12
8	1,1-二氯乙烷	75-34-3	98.97	6	24
9	甲基叔丁基醚	1634-04-4	88.15	3	12
10	2-丁酮	78-93-3	72.11	3	12
11	顺式-1,2-二氯乙烯	156-59-2	96.94	3	12
12	乙酸乙酯	141-78-6	88.11	5	20
13	正己烷	110-54-3	86.18	5	20
14	三氯甲烷	67-66-3	119.38	4	16
15	1,2-二氯乙烷	107-06-2	98.96	4	16
16	1,1,1-三氯乙烷	71-55-6	133.42	5	20
17	苯	71-43-2	78.11	3	12
18	四氯化碳	56-23-5	153.84	6	24
19	环己烷	110-82-7	84.16	4	16
20	1,2-二氯丙烷	78-87-5	112.99	6	24
21	二氯一溴甲烷	75-27-4	163.82	8	32
22	1,4-二氧六环	123-91-1	88.11	5	20
23	三氯乙烯	79-01-6	131.39	6	24
24	甲基丙烯酸甲酯	80-62-6	100.12	4	16
25	庚烷	142-82-5	100.21	3	12
26	顺式-1,3-二氯丙烯	10061-01-5	110.97	4	16
27	4-甲基-2-戊酮	108-10-1	100.16	6	24
28	反式-1,3-二氯丙烯	10061-02-6	110.97	4	16
29	1,1,2-三氯乙烷	79-00-5	133.42	5	20
30	甲苯	108-88-3	92.14	4	16
31	2-己酮	591-78-6	100.16	4	16
32	二溴一氯甲烷	124-48-1	208.27	7	28
33	1,2-二溴乙烷	106-93-4	187.86	6	24
34	四氯乙烯	127-18-4	165.82	5	20
35	氯苯	108-90-7	112.56	5	20

续表

序号	化合物名称	CAS NO.	摩尔质量 (g/mol)	检出限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	测定下限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
36	乙苯	100-41-4	106.16	4	16
37	溴仿	75-25-2	252.77	9	36
38	间二甲苯	108-38-3	106.16	6	24
39	对二甲苯	106-42-3	106.16	6	24
40	苯乙烯	100-42-5	104.15	7	28
41	1,1,2,2-四氯乙烷	79-34-5	167.86	4	16
42	邻二甲苯	95-47-6	106.16	5	20
43	4-乙基甲苯	622-96-8	120.19	5	20
44	1,3,5-三甲基苯	108-67-8	120.19	4	16
45	1,2,4-三甲基苯	95-63-6	120.19	5	20
46	氯代甲苯	100-44-7	126.58	4	16
47	1,3-二氯苯	541-73-1	147.00	5	20
48	1,4-二氯苯	106-46-7	147.00	6	24
49	1,2-二氯苯	95-50-1	147.00	6	24
50	1,2,4-三氯苯	120-82-1	181.45	8	32
51	萘	91-20-3	128.17	6	24
52	1,1,2,3,4,4,-六氯-1,3-丁二烯	87-68-3	260.76	8	32

附录 B
(资料性附录)
总离子流图



1—丙烯腈；2—1,1-二氯乙烯；3—溴乙烷；4—二氯甲烷；5—1,1,2-三氯-1,2,2-三氟乙烷；6—二硫化碳；7—反式-1,2-二氯乙烯；8—1,1-二氯乙烷；9—甲基叔丁基醚；10—2-丁酮；11—顺式-1,2-二氯乙烯；12—乙酸乙酯；13—正己烷；14—三氯甲烷；15—1,2-二氯乙烷；16—1,3,5-三(三氟甲基)苯(内标一)；17—1,1,1-三氯乙烷；18—苯；19—四氯化碳；20—环己烷；21—1,2-二氯丙烷；22—二氯一溴甲烷；23—1,4-二氧六环；24—三氯乙烯；25—甲基丙烯酸甲酯；26—庚烷；27—顺式-1,3-二氯丙烯；28—4-甲基-2-戊酮；29—反式-1,3-二氯丙烯；30—1,1,2-三氯乙烷；31—甲苯；32—2-己酮；33—二溴一氯甲烷；34—1,2-二溴乙烷；35—四氯乙烯；36—氯苯；37—溴五氟苯(内标二)；38—乙苯；39—溴仿；40,41—间,对-二甲苯；42—苯乙烯；43—1,1,2,2-四氯乙烷；44—邻二甲苯；45—4-乙基甲苯；46—1,3,5-三甲基苯；47—1,2,4-三甲基苯；48—氯代甲苯；49—1,3-二氯苯；50—1,4-二氯苯；51—1,2-二氯苯；52—1,2,4-三氯苯；53—萘；54—1,1,2,3,4,4,六氯-1,3-丁二烯

图 B 52 种挥发性有机物及内标物总离子流图

附录 C
(资料性附录)

目标化合物的保留时间和特征离子

表 C.1 给出了目标化合物的出峰顺序、保留时间、目标离子和辅助离子。

表 C.1 挥发性有机化合物保留时间 (min) 和特征离子

序号	化合物名称	保留时间 (min)	目标离子	辅助离子
1	丙烯腈	0.86	53	52
2	1,1-二氯乙烯	0.88	108	110
3	溴乙烷	0.90	61	96
4	二氯甲烷	0.91	49	84
5	1,1,2-三氯-1,2,2-三氟乙烷	0.94	101	151
6	二硫化碳	0.96	76	78
7	反式-1,2-二氯乙烯	1.04	61	96
8	1,1-二氯乙烷	1.07	73	57
9	甲基叔丁基醚	1.08	63	65
10	2-丁酮	1.13	43	72
11	顺式-1,2-二氯乙烯	1.23	61	96
12	乙酸乙酯	1.25	43	61
13	正己烷	1.27	57	43
14	三氯甲烷	1.28	83	85
15	1,2-二氯乙烷	1.47	62	64
16	1,3,5-三(三氟甲基)苯(内标)	1.51	213	263
17	1,1,1-三氯乙烷	1.55	97	99
18	苯	1.69	78	77
19	四氯化碳	1.75	117	119
20	环己烷	1.81	56	84
21	1,2-二氯丙烷	2.00	63	62
22	二氯一溴甲烷	2.07	83	85
23	1,4-二氧六环	2.10	88	58
24	三氯乙烯	2.10	130	132
25	甲基丙烯酸甲酯	2.20	69	100
26	庚烷	2.26	57	71
27	顺式-1,3-二氯丙烯	2.57	75	77
28	4-甲基-2-戊酮	2.60	43	58
29	反式-1,3-二氯丙烯	2.94	75	77
30	1,1,2-三氯乙烷	3.06	97	83
31	甲苯	3.27	91	92
32	2-己酮	3.53	43	58
33	二溴一氯甲烷	3.59	129	127
34	1,2-二溴乙烷	3.75	107	109
35	四氯乙烯	4.12	166	164
36	氯苯	4.56	112	77

续表

序号	化合物名称	保留时间 (min)	目标离子	辅助离子
37	溴五氟苯	4.72	117	167
38	乙苯	4.85	91	106
39	溴仿	4.96	91	106
40,41	间, 对-二甲苯	4.97	173	171
42	苯乙烯	5.20	104	103
43	1,1,2,2-四氯乙烷	5.26	83	85
44	邻二甲苯	5.26	91	106
45	4-乙基甲苯	6.02	105	120
46	1,3,5-三甲基苯	6.41	105	120
47	1,2,4-三甲基苯	6.53	105	120
48	氯代甲苯	6.64	146	148
49	1,3-二氯苯	6.72	91	126
50	1,4-二氯苯	6.74	146	148
51	1,2-二氯苯	7.10	146	148
52	1,2,4-三氯苯	9.08	180	182
53	萘	9.17	128	120
54	1,1,2,3,4,4,-六氯-1,3-丁二烯	9.56	225	227

附录 D
(资料性附录)

方法的精密度和准确度

方法精密度、重复性和再现性指标见附表 D.1；方法的准确度指标见附表 D.2。

表 D.1 方法的精密度、重复性和再现性

序号	化合物名称	总平均值 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	实验室内相对标准偏差 (%)	实验室间相对标准偏差 (%)	重复性限 r ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 R ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
1	丙烯腈	11	8.4-17	8.2	4.0	4.7
		58	5.0-21	14	17	27
		105	4.9-8.7	6.8	19	26
		454	2.6-9.7	9.0	95	1.4×10^2
2	1,1-二氯乙烯	22	6.1-13	16	6.1	11
		109	1.6-13	8.3	27	35
		195	2.1-10	7.1	39	52
		865	3.6-8.3	3.3	1.3×10^2	1.4×10^2
3	溴乙烷	22	3.3-14	22	5.4	15
		123	2.6-12	5.9	27	33
		226	2.3-10	8.2	49	68
		1.03×10^3	2.4-7.6	16	1.4×10^2	4.7×10^2
4	二氯甲烷	22	3.4-10	25	4.2	16
		99	1.4-14	14	28	45
		169	5.5-10	5.2	40	45
		815	2.0-8.9	12	1.5×10^2	3.0×10^2
5	1,1,2-三氯-1,2,2-三氟乙烷	40	6.9-12	15	12	18
		212	1.5-12	3.5	49	49
		380	1.8-12	5.7	73	91
		1.62×10^3	2.9-9.9	11	3.2×10^2	5.8×10^2
6	二硫化碳	16	5.2-15	21	4.8	10
		88	2.2-14	5.0	19	21
		155	2.5-9.6	4.2	29	32
		650	2.4-10	25	1.1×10^2	4.6×10^2
7	反式-1,2-二氯乙烯	21	4.4-12	17	4.8	11
		109	2.9-13	6.0	27	30
		191	2.4-11	4.8	36	41
		877	1.9-11	3.8	1.7×10^2	1.8×10^2
8	1,1-二氯乙烷	22	4.8-14	14	6.2	11
		115	2.1-11	6.2	28	32
		196	1.9-11	4.7	41	46
		820	3.7-9.8	20	1.6×10^2	4.8×10^2
9	甲基叔丁基醚	20	5.2-14	16	5.5	9.8
		98	1.3-12	4.8	24	25

续表

序号	化合物名称	总平均值 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	实验室内相对标准偏差 (%)	实验室间相对标准偏差 (%)	重复性限 r ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 R ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
		176	1.8-12	5.1	37	42
		827	2.4-12	12	1.6×10^2	3.0×10^2
10	2-丁酮	15	7.8-18	19	62	5.5
		80	6.4-12	1.6	21	22
		142	3.4-12	7.7	34	43
		679	2.8-13	11	34	1.4×10^2
11	顺式-1,2-二氯乙烯	23	5.7-10	23	4.8	16
		107	3.1-14	4.5	28	28
		197	2.1-11	4.0	40	42
		899	1.4-12	7.6	1.9×10^2	2.6×10^2
12	乙酸乙酯	16	7.2-13	19	5.4	9.6
		95	2.2-13	6.9	24	28
		173	2.4-11	8.2	38	53
		731	3.5-9.8	28	1.5×10^2	5.9×10^2
13	正己烷	16	2.2-10	29	4.2	14
		87	6.0-18	9.3	26	32
		177	4.8-8.2	4.8	31	36
		679	2.3-11	24	1.7×10^2	4.8×10^2
14	三氯甲烷	26	4.3-12	19	5.9	15
		133	1.9-12	4.0	33	33
		239	0.6-11	8.9	43	71
		950	1.5-8.9	19	1.6×10^2	5.3×10^2
15	1,2-二氯乙烯	21	4.0-11	15	4.9	9.7
		111	1.8-11	5.2	26	28
		196	3.2-8.1	4.3	34	38
		888	1.7-12	3.0	1.8×10^2	1.8×10^2
16	1,1,1-三氯乙烷	29	3.2-12	12	6.5	10
		150	2.4-11	6.0	33	38
		269	3.5-11	2.9	54	54
		1.20×10^3	1.2-8.3	12	1.9×10^2	4.5×10^2
17	苯	18	4.4-9.0	17	3.8	8.7
		86	1.2-11	4.0	20	21
		154	2.0-9.2	2.9	29	29
		675	2.0-13	26	1.4×10^2	5.1×10^2
18	四氯化碳	33	2.1-8.5	8.3	5.5	7.6
		172	4.7-11	5.6	38	44
		308	2.9-8.8	3.3	58	60
		1.41×10^3	1.7-9.0	7.1	2.1×10^2	3.4×10^2
19	环己烷	15	4.7-10	24	4.1	10

续表

序号	化合物名称	总平均值 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	实验室内相对标准偏差 (%)	实验室间相对标准偏差 (%)	重复性限 r ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 R ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
		88	3.8-11	9.4	23	32
		168	2.5-9.0	4.3	36	38
		676	2.0-8.4	22	1.2×10^2	4.2×10^2
20	1,2-二氯丙烷	23	2.7-10	17	5.5	13
		124	2.1-13	5.7	30	34
		226	4.7-10	5.4	52	60
		931	1.4-7.7	23	1.4×10^2	6.2×10^2
21	二氯一溴甲烷	33	4.0-12	18	8.0	18
		180	1.5-14	6.5	45	53
		332	2.6-10	4.6	78	82
		1.43×10^3	1.4-9.0	19	2.2×10^2	7.8×10^2
22	1,4-二氧六环	17	2.6-14	23	5.5	11
		89	2.0-14	8.8	23	31
		172	4.7-12	4.1	43	44
		795	1.6-6.6	10	1.1×10^2	2.5×10^2
23	三氯乙烯	26	3.3-10	20	6.5	15
		146	3.9-12	5.2	29	35
		259	2.5-11	4.1	61	62
		1.11×10^3	1.4-7.9	18	1.7×10^2	5.7×10^2
24	甲基丙烯酸甲酯	19	4.2-11	26	4.9	15
		108	2.3-8.7	6.6	19	26
		199	1.7-9.6	4.3	40	44
		837	2.6-9.4	28	1.6×10^2	6.8×10^2
25	庚烷	19	4.7-8.3	29	3.6	15
		107	3.8-9.9	7.9	20	30
		199	2.4-10	3.8	45	46
		805	1.4-11	24	1.6×10^2	5.5×10^2
26	顺式-1,3-二氯丙烯	21	5.6-14	26	5.4	17
		121	3.8-9.5	7.3	25	33
		222	2.5-11	6.0	45	54
		986	1.1-8.4	24	1.5×10^2	6.6×10^2
27	4-甲基-2-戊酮	20	5.8-12	27	4.9	16
		102	4.7-21	14	29	49
		201	4.3-9.5	3.6	44	45
		830	2.8-7.3	20	1.3×10^2	4.7×10^2
28	反式-1,3-二氯丙烯	22	6.2-11	32	5.4	21
		120	3.4-13	8.2	29	39
		228	2.1-13	3.7	52	54
		1.00×10^3	2.1-7.4	24	1.4×10^2	7.0×10^2

续表

序号	化合物名称	总平均值 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	实验室内相对标准偏差 (%)	实验室间相对标准偏差 (%)	重复性限 r ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 R ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
29	1,1,2-三氯乙烷	27	2.4-13	13	6.5	10
		143	3.0-11	8.8	33	46
		269	4.6-11	6.0	60	70
		1.18×10^3	2.4-9.1	12	2.2×10^2	4.6×10^2
30	甲苯	18	4.2-9.0	23	3.3	12
		95	1.9-15	11	24	38
		184	4.7-11	3.3	42	42
		815	2.3-7.2	17	1.2×10^2	4.1×10^2
31	2-己酮	19	4.0-17	26	4.9	15
		101	4.0-20	15	28	50
		205	3.7-9.6	5.0	41	47
		825	4.4-11	18	1.6×10^2	4.3×10^2
32	二溴一氯甲烷	45	4.6-21	8.3	13	16
		225	4.2-10	9.1	46	71
		424	2.1-11	4.4	88	97
		1.95×10^3	1.7-9.6	4.2	3.4×10^2	3.9×10^2
33	1,2-二溴乙烷	39	4.7-11	13	9.2	17
		207	4.9-11	10	50	76
		385	1.6-11	6.3	80	1.0×10^2
		1.72×10^3	1.9-7.2	7.1	2.6×10^2	4.2×10^2
34	四氯乙烯	30	3.4-11	4.1	8.1	8.1
		188	4.9-12	4.7	44	46
		326	1.6-11	7.5	77	98
		1.33×10^3	1.2-8.6	2.5	2.5×10^2	2.5×10^2
35	氯苯	23	2.2-9.6	13	4.0	10
		125	3.8-11	5.2	30	32
		231	1.6-10	6.3	39	55
		1.02×10^3	1.7-6.5	6.1	1.4×10^2	2.1×10^2
36	乙苯	21	3.6-8.0	18	3.8	12
		117	3.7-16	7.3	33	38
		222	1.9-11	10	50	77
		902	1.5-9.2	14	1.5×10^2	3.8×10^2
37	溴仿	55	3.7-14	18	12	32
		293	4.9-12	7.7	70	88
		521	1.8-9.0	3.9	82	95
		2.36×10^3	1.0-6.5	6.8	3.3×10^2	5.4×10^2
38 3 9	间, 对-二甲基苯	42	2.7-8.3	29	8.1	36
		217	5.7-14	20	63	1.3×10^2
		408	1.4-9.5	24	66	2.8×10^2

续表

序号	化合物名称	总平均值 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	实验室内相对标准偏差 (%)	实验室间相对标准偏差 (%)	重复性限 r ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 R ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
		1.75×10^3	1.3-6.4	27	2.1×10^2	1.4×10^3
40	苯乙烯	21	4.4-12	27	5.1	16
		115	5.2-14	6.5	32	36
		216	2.9-10	3.2	38	39
		914	2.2-9.1	7.7	1.5×10^2	2.4×10^2
41	1,1,2,2-四氯乙烷	36	4.2-16	19	10	19
		193	5.8-13	8.9	50	67
		344	2.8-9.9	3.9	61	67
		1.47×10^3	2.2-6.7	13	2.1×10^2	5.7×10^2
42	邻二甲苯	21	4.4-30	16	8.1	10
		120	5.5-15	8.7	33	43
		216	1.1-9.8	3.7	44	45
		950	2.1-9.0	6.8	1.5×10^2	2.2×10^2
43	4-乙基甲苯	24	3.0-12	23	5.9	15
		138	5.9-11	12	38	57
		246	4.6-11	4.6	66	68
		1.06×10^3	4.1-9.8	4.4	2.0×10^2	2.3×10^2
44	1,3,5-三甲基苯	24	3.1-11	16	5.9	12
		136	3.6-12	9.5	34	48
		244	3.4-13	4.6	63	64
		1.07×10^3	2.8-9.5	3.9	1.8×10^2	2.0×10^2
45	1,2,4-三甲基苯	25	4.1-12	22	5.9	17
		137	5.4-10	9.0	30	44
		250	2.5-8.7	3.6	47	49
		1.05×10^3	2.9-7.0	3.9	1.4×10^2	1.7×10^2
46	氯代甲苯	27	5.2-17	15	7.9	14
		137	5.0-13	11	38	54
		263	3.3-8.1	6.0	44	60
		1.09×10^3	1.9-5.6	8.7	1.3×10^2	2.9×10^2
47	1,3-二氯苯	31	6.2-14	8.5	9.2	11
		167	5.4-10	13	37	68
		299	2.9-9.4	5.1	62	70
		1.30×10^3	2.9-9.2	5.3	2.3×10^2	2.8×10^2
48	1,4-二氯苯	27	4.1-15	32	7.2	26
		164	6.3-24	14	59	85
		299	3.4-13	5.3	76	81
		1.29×10^3	3.8-10	7.3	2.5×10^2	3.5×10^2
49	1,2-二氯苯	32	4.2-19	14	9.2	16
		167	4.6-9.6	11	35	60

续表

序号	化合物名称	总平均值 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	实验室内相对标准 偏差 (%)	实验室间相对标准 偏差 (%)	重复性限 r ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 R ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
		303	1.6-9.9	4.3	60	66
		1.30×10^3	2.8-9.3	5.4	2.2×10^2	2.8×10^2
50	1,2,4-三氯苯	39	2.2-19	15	14	18
		207	3.8-11	12	45	82
		360	1.6-13	4.0	88	91
		1.64×10^3	2.3-9.0	5.6	2.8×10^2	3.6×10^2
51	萘	26	2.7-13	15	6.3	13
		145	3.7-11	12	34	58
		256	3.3-12	3.4	58	58
		1.16×10^3	2.4-8.8	5.0	2.0×10^2	2.4×10^2
52	1,1,2,3,4,4,-六氯 -1,3-丁二烯	58	3.9-25	14	20	26
		306	1.8-10	16	69	1.5×10^2
		516	1.4-13	4.5	1.3×10^2	1.4×10^2
		2.34×10^3	2.8-9.6	8.2	4.3×10^2	6.6×10^2

表 D.2 方法的准确度

序号	化合物名称	加标浓度(nmol/mol)	\bar{P} (%)	$S_{\bar{P}}$ (%)	$\bar{P} \pm 2S_{\bar{P}}$ (%)
1	丙烯腈	5.0	93.9	5.1	93.9 \pm 10.2
		45.0	98.3	3.9	98.3 \pm 7.8
		200	98.5	7.1	98.5 \pm 14.2
2	1,1-二氯乙烯	5.0	95.3	8.0	95.3 \pm 16.0
		45.0	97.7	4.4	97.7 \pm 8.8
		200	98.6	8.5	98.6 \pm 17.0
3	溴乙烷	5.0	91.5	6.1	91.5 \pm 12.2
		45.0	97.1	6.7	97.1 \pm 13.4
		200	98.3	6.8	98.3 \pm 13.6
4	二氯甲烷	5.0	101	14.5	101 \pm 29.0
		45.0	93.0	10.3	93.0 \pm 20.6
		200	103	3.9	103 \pm 7.8
5	1,1,2-三氯-1,2,2-三 氟乙烷	5.0	96.4	7.1	96.4 \pm 14.2
		45.0	98.4	5.3	98.4 \pm 10.6
		200	99.6	11.7	99.6 \pm 23.4
6	二硫化碳	5.0	107	7.1	107 \pm 14.2
		45.0	99.7	6.2	99.7 \pm 12.5
		200	103	9.8	103 \pm 19.6
7	反式-1,2-二氯乙烯	5.0	90.8	7.2	90.8 \pm 14.4
		45.0	92.7	6.6	92.7 \pm 13.2

续表

序号	化合物名称	加标浓度(nmol/mol)	\bar{P} (%)	$S_{\bar{P}}$ (%)	$\bar{P} \pm 2S_{\bar{P}}$ (%)
		200	101	5.0	101±10.0
8	1,1-二氯乙烷	5.0	96.7	5.0	96.7±10.0
		45.0	97.8	4.8	97.8±9.6
		200	104	2.2	104±4.4
9	甲基叔丁基醚	5.0	86.5	8.7	86.5±17.4
		45.0	98.4	2.7	98.4±5.4
		200	104	13.0	104±26.0
10	2-丁酮	5.0	99.1	9.5	99.1±19.0
		45.0	94.5	6.0	94.5±12.0
		200	102	12.6	102±25.2
11	顺式-1,2-二氯乙烯	5.0	90.1	8.3	90.1±16.6
		45.0	96.7	5.0	96.7±10.0
		200	103	10.7	103±21.4
12	乙酸乙酯	5.0	96.8	12.4	96.8±24.8
		45.0	98.2	5.6	98.2±11.2
		200	103	11.8	103±23.6
13	正己烷	5.0	101	8.8	101±17.6
		45.0	101	6.2	101±12.4
		200	99.1	10.5	99.1±21.0
14	三氯甲烷	5.0	95.5	9.7	95.5±19.4
		45.0	98.6	4.4	98.6±8.8
		200	103	6.7	103±13.4
15	1,2-二氯乙烷	5.0	99.9	5.3	99.9±10.6
		45.0	99.6	3.3	99.6±6.6
		200	103	2.6	103±5.2
16	1,1,1-三氯乙烷	5.0	96.7	5.5	96.7±11.0
		45.0	98.9	2.9	98.9±5.8
		200	101	11.3	101±22.6
17	苯	5.0	99.7	11.3	99.7±22.6
		45.0	98.6	4.4	98.6±8.8
		200	106	11.1	106±22.2
18	四氯化碳	5.0	101	4.9	101±9.8
		45.0	99.8	2.2	99.8±4.4
		200	102	6.7	102±13.4
19	环己烷	5.0	94.8	11.2	94.8±22.4
		45.0	99.8	4.4	99.8±8.8
		200	98.9	8.3	98.9±16.6
20	1,2-二氯丙烷	5.0	97.6	8.6	97.6±17.2
		45.0	97.0	3.8	97.0±7.6
		200	103	3.5	103±7.0

续表

序号	化合物名称	加标浓度(nmol/mol)	\bar{P} (%)	$S_{\bar{P}}$ (%)	$\bar{P} \pm 2S_{\bar{P}}$ (%)
21	二氯一溴甲烷	5.0	92.9	7.7	92.9±15.4
		45.0	99	4.9	99.0±9.8
		200	104	8.2	104±16.4
22	1,4-二氧六环	5.0	101	8.2	101±16.4
		45.0	97.6	5.5	97.6±11.0
		200	101	11.3	101±22.6
23	三氯乙烯	5.0	92.0	10.8	92.0±21.7
		45.0	98.7	5.6	98.7±11.2
		200	102	2.8	102±5.6
24	甲基丙烯酸甲酯	5.0	90.0	15.2	90.0±30.4
		45.0	96.9	5.7	96.9±11.4
		200	102	8.8	102±17.6
25	庚烷	5.0	90.3	14.5	90.3±29.0
		45.0	101	5.4	101±10.8
		200	96.9	9.1	96.9±18.2
26	顺式-1,3-二氯丙烯	5.0	98.6	18.1	98.6±36.2
		45.0	97.9	6.0	97.9±12.0
		200	106	13.9	106±27.8
27	4-甲基-2-戊酮	5.0	105	15.1	105±30.2
		45.0	97.2	8.6	97.2±17.2
		200	101	4.1	101±8.2
28	反式-1,3-二氯丙烯	5.0	105	14.6	105±29.2
		45.0	93.9	7.3	93.9±14.6
		200	94.7	13	94.7±26.0
29	1,1,2-三氯乙烷	5.0	96.0	8.8	96.0±17.6
		45.0	98.5	5.7	98.5±11.4
		200	96.8	9.4	96.8±18.8
30	甲苯	5.0	104	8.3	104.0±16.6
		45.0	101	4.3	101±8.6
		200	99.0	16.5	99.0±33.0
31	2-己酮	5.0	97.3	8.8	97.3±17.6
		45.0	100	13.5	100±27.0
		200	97.5	9.4	97.5±18.8
32	二溴一氯甲烷	5.0	96.2	7.1	96.2±14.2
		45.0	100	4.3	100±8.6
		200	103	4.6	103±9.2
33	1,2-二溴乙烷	5.0	94.4	8.1	94.4±16.2
		45.0	99.6	3.9	99.6±7.8
		200	102	8.4	102±16.8
34	四氯乙烯	5.0	99.0	10.4	99.0±20.8
		45.0	102	4.7	102±9.4

续表

序号	化合物名称	加标浓度(nmol/mol)	\bar{P} (%)	$S_{\bar{P}}$ (%)	$\bar{P} \pm 2S_{\bar{P}}$ (%)
		200	99.3	5.4	99.3±10.8
35	氯苯	5.0	92.5	12.6	92.5±25.2
		45.0	101	5.1	101±10.2
		200	100	8.2	100±16.4
36	乙苯	5.0	94.7	9.8	94.7±19.6
		45.0	102	4.2	102±8.4
		200	98.8	13.1	98.8±26.2
37	溴仿	5.0	106	7.4	106±14.8
		45.0	99.0	9.1	99.0±18.2
		200	104	4.8	104±9.6
38,39	间,对-二甲苯	5.0	104	12.3	104±24.6
		45.0	102	8.7	102±17.4
		200	101	12.6	101±25.2
40	苯乙烯	5.0	99.1	4.6	99.1±9.2
		45.0	97.1	10.5	97.1±21.0
		200	99.1	7.8	99.1±15.6
41	1,1,2,2-四氯乙烷	5.0	102	5.9	102±11.8
		45.0	101	9.2	101±18.4
		200	97.7	13.9	97.7±27.8
42	邻二甲苯	5.0	101	12.7	101±25.4
		45.0	102	6.0	102±12.0
		200	98.8	8.2	98.8±16.4
43	4-乙基甲苯	5.0	93.9	14.9	93.9±29.8
		45.0	102	11.8	102±23.6
		200	98.0	5.2	98.0±10.4
44	1,3,5-三甲基苯	5.0	93.5	12.6	93.5±25.2
		45.0	104	6.2	104±12.4
		200	98.9	6.5	98.9±13.0
45	1,2,4-三甲基苯	5.0	103	12.3	103±24.6
		45.0	105	8.2	105±16.4
		200	96.3	6.9	96.3±13.8
46	氯代甲苯	5.0	97.2	12.9	97.2±25.8
		45.0	101	3.7	101±7.4
		200	96.5	8.2	96.5±16.4
47	1,3-二氯苯	5.0	95.9	8.6	95.9±17.2
		45.0	102	5.5	102±11.0
		200	96.4	7.0	96.4±14.0
48	1,4-二氯苯	5.0	94.5	11.1	94.5±22.2
		45.0	104	7.0	104±14.0
		200	95.6	6.3	95.6±12.6

续表

序号	化合物名称	加标浓度(nmol/mol)	\bar{P} (%)	$S_{\bar{P}}$ (%)	$\bar{P} \pm 2S_{\bar{P}}$ (%)
49	1,2-二氯苯	5.0	96.2	9.5	96.2±19.0
		45.0	103	4.6	103±9.2
		200	96.4	8.4	96.4±16.8
50	1,2,4-三氯苯	5.0	97.2	15.1	97.2±30.2
		45.0	103	4.2	103±8.4
		200	97.2	6.5	97.2±13.0
51	萘	5.0	104	9.2	104±18.4
		45.0	101	3.0	101±6.0
		200	96.0	6.6	96.0±13.2
52	1,1,2,3,4,4,-六氯-1,3- 丁二烯	5.0	102	5.3	102±10.6
		45.0	102	6.5	102±13.0
		200	94.3	5.9	94.3±11.8