

中华人民共和国国家生态环境标准

HJ □□□□—202□

环境空气 117 种挥发性有机物的测定 罐采样/气相色谱-氢火焰离子化检测器/ 质谱检测器联用法

Ambient air—Determination of 117 Volatile organic compounds—Collected in
canisters and analyzed by gas chromatography- flame ionization detector and
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 方法原理	1
4 试剂和材料	1
5 仪器和设备	2
6 样品	3
7 分析步骤	6
8 结果计算与表示	8
9 准确度	10
10 质量保证和质量控制	11
11 注意事项	13
附录 A（规范性附录） 方法检出限	15
附录 B（资料性附录） 采样罐加湿方法	19
附录 C（资料性附录） 参考色谱图	21
附录 D（资料性附录） 目标化合物和内标化合物的定量离子和定性离子	21
附录 E（资料性附录） 方法准确度	25

前 言

为贯彻《中华人民共和国环境保护法》《中华人民共和国大气污染防治法》，防治生态环境污染，改善生态环境质量，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罐采样/气相色谱-氢火焰离子化检测器/质谱检测器联用法。

本标准的附录A为规范性附录，附录B～附录E为资料性附录。

本标准首次发布。

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。

本标准主要起草单位：中国环境监测总站、北京市生态环境监测中心、中国测试技术研究院化学研究所。

本标准验证单位：国家环境分析测试中心、河北省生态环境监测中心、安徽省生态环境监测中心、河南省郑州生态环境监测中心、山东省青岛生态环境监测中心、江苏省常州环境监测中心、内蒙古自治区环境监测总站呼和浩特分站、福州市环境科学研究院、北京博赛泰克质量技术检测有限公司。

本标准生态环境部202□年□□月□□日批准。

本标准自202□年□□月□□日起实施。

本标准由生态环境部解释。

环境空气 117种挥发性有机物的测定 罐采样/气相色谱-氢火焰 离子化检测器/质谱检测器联用法

警告：实验中所使用的标准气体为易挥发的有毒化学品，应在通风条件下使用；操作时应按要求佩戴防护器具，避免吸入呼吸道或接触皮肤和衣物。

1 适用范围

本标准规定了测定环境空气中 117 种挥发性有机物的罐采样/气相色谱-氢火焰离子化检测器/质谱检测器联用方法。

本标准适用于环境空气中 117 种挥发性有机物的测定。

取样体积为 300 mL 时，在全扫描（Scan）模式下，目标化合物的方法检出限为 $0.2 \mu\text{g}/\text{m}^3 \sim 2 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ，测定下限为 $0.8 \mu\text{g}/\text{m}^3 \sim 8 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ；在选择离子监测（SIM）模式下，目标化合物的方法检出限为 $0.09 \mu\text{g}/\text{m}^3 \sim 0.7 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ，测定下限为 $0.36 \mu\text{g}/\text{m}^3 \sim 2.8 \mu\text{g}/\text{m}^3$ 。详见附录 A。

2 规范性引用文件

本标准引用了下列文件或其中的条款。凡是注明日期的引用标准，仅注日期的版本适用于本标准。凡是未注日期的引用标准，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本标准。其他文件被新文件废止、修改、修订的，新文件适用于本标准。

HJ 194 环境空气质量手工监测技术规范

3 方法原理

用内壁惰性化处理的真空不锈钢罐采集环境空气样品，经冷阱预浓缩，除去水及惰性气体，热解吸后进入气相色谱分离，氢火焰离子化检测器（FID）检测乙烯、乙烷、乙炔等目标化合物，质谱检测器（MS）检测其余目标化合物。FID 检测的目标化合物用保留时间定性，外标法定量；MS 检测的目标化合物根据保留时间、特征离子丰度比定性，内标法定量。

4 试剂和材料

实验用水为新制备不含目标化合物的纯水。

4.1 标准气体：117 种组分，具体组分参见附录 A。高压钢瓶储存，钢瓶压力不低于 1.0 MPa，参考有证标准气体的相关说明保存。

注 1：可分别购买不同组分的标准气体配制成 117 种混合标准气体。

注 2：标准气体减压阀和气体管路不得使用铜制产品，建议使用不锈钢或者经惰性化处理的其他材质产品，避免因

材质对挥发性有机物的吸附所带来的分析误差。

4.2 标准使用气：使用气体稀释装置（5.11），用氮气（4.7）将标准气体（4.1）稀释至 1.0 nmol/mol（甲醛为 5.0 nmol/mol）和 10.0 nmol/mol（甲醛为 50.0 nmol/mol），采样罐（5.1）内气体湿度为 40%~50%，压力为 96.5 kPa~207 kPa。配制完成 2 h 后再使用，可保存 5 d。

注：采样罐（5.1）中标准使用气的加湿方法参见附录 B。

4.3 内标标准气体：组分为一溴一氯甲烷、1,4-二氟苯、氯苯-*d*₅，摩尔分数为 1 μmol/mol。高压钢瓶储存，钢瓶压力不低于 1.0 MPa。亦可根据实际工作需要，购买适当浓度的有证内标标准气体，参考有证标准气体的相关说明保存。

注：本标准推荐使用上述 3 种内标物，也可采用其他内标物。内标物数量可视目标化合物数量酌情增减。

4.4 内标标准使用气：使用气体稀释装置（5.11），将内标标准气体（4.3）用氮气（4.7）稀释至 10.0 nmol/mol，可保存 30 d。

注：内标标准使用气罐建议配备压力表，使用过程中可通过查看罐内压力判断剩余量。

4.5 4-溴氟苯标准气体：摩尔分数为 1 μmol/mol，高压钢瓶储存，压力不低于 1.0 MPa。亦可根据实际工作需要，购买适当浓度的有证内标标准气体，参考有证标准气体的相关说明保存。

4.6 4-溴氟苯标准使用气：使用气体稀释装置（5.11），将 4-溴氟苯标准气体（4.5）用氮气（4.7）稀释至 100 nmol/mol，可保存 30 d。

4.7 氮气：纯度≥99.999%，除烃。

4.8 氦气：纯度≥99.999%，除烃。

4.9 氢气：纯度≥99.999%。应以安全形式存储，保证运输和现场使用安全；可采用仪器内置发生器、储氢合金等产生的氢气，或采用储氢气瓶。

4.10 空气：纯度≥99.999%，或通过净化、干燥和除烃的洁净环境空气。

4.11 制冷剂：液氮（电制冷方式不需要制冷剂）。

5 仪器和设备

5.1 采样罐：不锈钢罐，内壁经惰性化处理，容积≥3 L，耐压值>241 kPa，不得吸附目标化合物或析出干扰物质。

5.2 流量控制器：具有颗粒物过滤功能，与采样罐（5.1）配套使用。

5.3 气体流量计：准确度等级为 0.5 级，流量范围为 0.5 mL/min~10.0 mL/min 或 10 mL/min~200 mL/min。

5.4 过滤器：孔径≤10 μm，经惰性化处理的不锈钢过滤头或聚四氟乙烯过滤头。

5.5 自动采样器：选配仪器，管路经惰性化处理，具流量控制、定时启动或结束采样等功能。

5.6 气相色谱-氢火焰离子化检测器/质谱检测器联用仪：色谱部分具分流/不分流进样口，柱温箱可程序升温，具中心切割装置（5.7）；具氢火焰离子化检测器和质谱检测器；质谱检测器具电子轰击离子源（EI）。

注：气相色谱-氢火焰离子化检测器/质谱检测器联用仪可配备柱温箱制冷装置。

5.7 中心切割装置：可根据目标化合物在色谱柱的流出时间切割至不同的检测器测定。

5.8 色谱柱：气相色谱-氢火焰离子化检测器/质谱检测器联用仪（5.6）若配置柱温箱制冷装置，选择组合 I，否则选择组合 II。

组合 I：石英毛细管色谱柱 1，60 m（柱长） $\times$ 320 μ m（内径） $\times$ 1 μ m（膜厚），固定相为 100% 二甲基聚硅氧烷；石英毛细管色谱柱 2，30 m（柱长） $\times$ 320 μ m（内径） $\times$ 20 μ m（膜厚），固定相为苯乙烯-二乙烯基苯；石英毛细管色谱柱 3 为一定长度内径为 150 μ m 无涂层的毛细管色谱柱。也可使用其他等效的毛细管色谱柱。

组合 II：石英毛细管色谱柱 1，60 m（柱长） $\times$ 320 μ m（内径） $\times$ 1.4 μ m（膜厚），固定相为 6% 氰丙基苯基-94% 二甲基聚硅氧烷；石英毛细管色谱柱 2，30 m（柱长） $\times$ 320 μ m（内径） $\times$ 20 μ m（膜厚），固定相为苯乙烯-二乙烯基苯；石英毛细管色谱柱 3 为一定长度内径为 150 μ m 无涂层的毛细管色谱柱。也可使用其他等效的毛细管色谱柱。

5.9 气体冷阱浓缩仪：具有自动定量取样及自动添加标准气体、内标气体的功能。可采用液氮制冷或电制冷方式，具有富集和聚焦进样挥发性有机物的功能。气体冷阱浓缩仪与气相色谱仪连接管路均使用惰性化材质，并能在 50 $^{\circ}$ C $\sim$ 150 $^{\circ}$ C 范围加热。

5.10 采样罐清洗装置：具有加温、加湿、加压清洗功能，能将采样罐（5.1）内压力抽至真空（ <6.7 Pa）。

5.11 气体稀释装置：具有动态或静态稀释功能，最大稀释倍数不低于 100 倍，管路均经惰性化处理，不得与目标化合物发生反应、吸附目标化合物或析出干扰物质。

5.12 压力真空表：精确度等级不低于 2.5 级，测量范围： -0.1 MPa $\sim$ 0.3 MPa。

5.13 一般实验室常用仪器和设备。

6 样品

6.1 采样前准备

6.1.1 采样罐清洗

使用采样罐清洗装置（5.10）清洗采样罐（5.1），清洗过程按罐清洗装置操作说明书进行。清洗过程中可对采样罐做加湿处理，必要时可在 50 $^{\circ}$ C $\sim$ 80 $^{\circ}$ C 加温清洗，至少清洗 3 个循环。

采样罐清洗后，将压力抽至真空（ ≤ 6.7 Pa），用密封帽密封，待用。清洗后的采样罐应在 30 d 内使用，否则应重新清洗。

6.1.2 过滤器和流量控制器检查

采样前，将流量控制器（5.2）与过滤器（5.4）组合连接至抽成真空的采样罐（5.1），检查采样流量是否达到预设值，确保流量控制器（5.2）流量正常、过滤器（5.4）没有堵塞后方可使用。

实验室应依据采样频次和颗粒物浓度水平，定期清洗或更换过滤器。清洗方式：在水中超声 15 min 后，用实验用水冲洗，再在约 50 $^{\circ}$ C 的烘箱中干燥至少 12 h。

6.2 样品采集

6.2.1 采样方式及选择

按照 HJ 194 中相关规定采集样品。采样方式根据监测目的或要求，选择瞬时采样或恒定流量采样。

6.2.2 瞬时采样

将清洗后并抽成真空的采样罐（5.1）带至采样点。安装过滤器（5.4）后，打开采样罐阀门，开始采样。待采样罐内压力与采样点大气压力一致后，关闭阀门，用密封帽密封。记录采样时间、地点、温度、湿度、大气压和采样罐压力等。

注：采样罐压力应采用压力真空表（5.12）测量。

6.2.3 恒定流量采样

将清洗后并抽成真空的采样罐（5.1）带至采样点。安装流量控制器（5.2）后，打开采样罐阀门，开始采样。在设定的采样时间达到后，关闭阀门，用密封帽密封。记录采样时间、地点、温度、湿度、大气压和采样罐压力等。

可采用手工或自动方式采样。采样前应对流量控制器（5.2）校准。采样流量按公式（1）计算：

$$q_v = \frac{P_s \times V_0 \times 1000}{P_0 \times t \times 60} \quad (1)$$

式中： q_v ——采样流量，mL/min；

P_s ——采样后环境温度下采样罐内绝对压力，一般为采样时环境大气压的87%~95%，kPa；

V_0 ——采样罐容积，L；

1000 ——L换算为mL的单位换算系数；

P_0 ——采样时环境大气压，kPa；

t ——采样时间，h；

60 ——h换算为min的单位换算系数。

注：样品采集结束后，应确认阀门完全关闭，用密封帽密封采样罐采样口，隔绝外界气体。

6.3 样品保存

样品采集后应尽快分析，若仅检测样品中的苯系物、烷烃和烯烃，则样品常温保存 20 d 内分析完毕；若检测样品中的 117 种 VOCs，则样品常温保存 7 d 内分析完毕。

6.4 试样

6.4.1 试样的核验

试样测试前，应核验采样罐压力。核验方法：用压力真空表（5.12）测定采样罐（5.1）压力，测得的采样罐绝对压力与采样结束时绝对压力间的变化应 ≤ 0.69 kPa/d。超过该范围的压力变化表明采样罐已泄漏，此样品应标记为无效。

采样环境温度与实验室内温度差 >10 °C时，应按公式（2）计算出试样运回实验室当天，在实验室

内温度下的绝对压力，再与测试前的采样罐绝对压力比较，判断采样罐是否发生泄漏。

$$P'_s = \frac{P_s \times T_2}{T_1} \quad (2)$$

式中： P'_s ——试样运回实验室当天，在实验室内温度下的绝对压力，kPa；

P_s ——采样结束时，试样在采样环境温度下的绝对压力，kPa；

T_2 ——实验室内温度，K；

T_1 ——采样环境温度，K。

6.4.2 试样的制备

多次进样后，若采样罐压力小于气体冷阱浓缩仪（5.9）规定的最小压力，不能继续进样，可用氮气（4.7）加压后继续分析，并按公式（3）计算稀释倍数。

$$D = \frac{P_2}{P_1} \quad (3)$$

其中： D ——稀释倍数，无量纲；

P_2 ——稀释后采样罐的绝对压力，kPa；

P_1 ——稀释前采样罐的绝对压力，kPa。

6.5 空白试样的制备

6.5.1 采样罐加湿

用于配制空白试样的真空采样罐，在配制前应做加湿处理，相对湿度加至 40%~50%为宜。加湿方法参见附录 B。

6.5.2 实验室空白

按照气体稀释装置（5.11）操作说明书，冲洗气体稀释装置的配气管路，然后将预先清洗好、抽至真空并加湿的采样罐（6.5.1）连在气体稀释装置上，打开氮气（4.7）阀门和采样罐阀门，待采样罐压力达到预设值（一般为 88 kPa）后，关闭采样罐阀门以及氮气阀门，取下，盖好密封帽，待用。

6.5.3 运输空白

采样前，按照 6.5.2 制备空白样品，带至采样现场，但不采集样品，与同批次样品一起运回实验室。

7 分析步骤

7.1 仪器参考条件

7.1.1 气体冷阱浓缩仪参考条件

7.1.1.1 液氮制冷方式

进样流速：60 mL/min；浓缩系统管线和阀体温度：100 °C。

一级冷阱：捕集温度：-40 °C；解吸温度：10 °C；烘烤温度：120 °C；烘烤时间：15 min；样品转移体积：50 mL；一级冷阱为空阱或填装玻璃微珠和聚 2,6-二苯基对苯醚的捕集阱。

二级冷阱：捕集温度：-60 °C；解吸温度：220 °C；烘烤温度：230 °C；烘烤时间：15 min；二级冷阱类型为填装聚 2,6-二苯基对苯醚的捕集阱。

三级聚焦：聚焦温度：-185 °C；解吸温度：80 °C；解吸时间：1.5 min。

7.1.1.2 电制冷方式

进样流速：50 mL/min；浓缩系统管线和阀体温度：120 °C。

除水冷阱：捕集温度：-30 °C；烘烤温度：300 °C；

聚焦冷阱：捕集温度：-30 °C；解吸温度：250 °C；升温速率：100 °C/s，解吸时间：3 min。

7.1.2 气相色谱参考条件

采用氢火焰离子化检测器分析乙烯、乙炔和乙烷，采用质谱检测器分析其他目标化合物。

注：也可采用氢火焰离子化检测器分析乙烯、乙炔、乙烷、丙烯和丙烷，采用质谱检测器分析其他目标化合物。

色谱柱1（5.8）：前端接进样口，末端接中心切割装置（5.7），色谱柱流量：1.5 mL/min（液氮制冷）或2.0 mL/min（电制冷）；色谱柱2（5.8）：前端接中心切割装置（5.7），末端接氢火焰离子化检测器，色谱柱流量：3.5 mL/min；色谱柱3（5.8）：前端接中心切割装置（5.7），末端接质谱检测器，色谱柱流量：3.5 mL/min。

进样口温度：250 °C；进样模式：不分流；氢火焰离子化检测器温度：300 °C；氢气流量：30 mL/min；空气流量：400 mL/min。

色谱柱组合I（5.8）条件下升温程序：5 °C保持6 min，以5 °C/min的速率升温至170 °C，保持5 min，然后以15 °C/min的速率升温至220 °C，保持10 min。

色谱柱组合II（5.8）条件下升温程序：35 °C保持10 min，以6 °C/min的速率升温至150 °C，保持5 min，以10 °C/min的速率升温至260 °C，保持10 min。

7.1.3 质谱参考条件

离子源：电子轰击离子源（EI）；离子源温度：230 °C；离子化能量：70 eV；传输线温度：250 °C；扫描方式：Scan 或 SIM；全扫描范围：29 u~300 u；目标化合物和内标化合物的总离子色谱图见附录 C，定量离子和定性离子见附录 D。

7.2 仪器性能检查

样品分析前，将 4-溴氟苯标准使用气（4.6）经气体冷阱浓缩仪（5.9）进样 50 mL，经质谱仪分析，得到的 4-溴氟苯的关键离子丰度应满足表 1 中的要求，否则应对质谱仪的参数进行调整或清洗离子源。

表 1 4-溴氟苯关键离子丰度标准

质量	离子丰度标准	质量	离子丰度标准
50	95 峰的 8%~40%	174	95 峰的 50%~120%
75	95 峰的 30%~66%	175	174 峰的 4%~9%
95	基峰，100%相对丰度	176	174 峰的 93%~101%
96	95 峰的 5%~9%	177	176 峰的 5%~9%
173	小于 174 峰的 2%	—	—

7.3 校准

7.3.1 采样罐加湿

用于配制标准使用气的采样罐（6.1.1），在配制前应按 6.5.1 做加湿处理，相对湿度在 40%~50% 之间为宜。

7.3.2 校准曲线的建立

FID/MS（Scan）模式：配制甲醛摩尔分数分别为 2.50 nmol/mol、5.00 nmol/mol、10.0 nmol/mol、25.0 nmol/mol、50.0 nmol/mol，其余目标化合物摩尔分数分别为 0.50 nmol/mol、1.00 nmol/mol、2.00 nmol/mol、5.00 nmol/mol、10.0 nmol/mol 的标准系列（校准曲线浓度可根据实际样品情况做相应调整），内标化合物摩尔分数为 2.0 nmol/mol。按照仪器参考条件，采用 Scan 扫描模式，依次从低浓度到高浓度进行测定。

FID/MS（SIM）模式：配制甲醛摩尔分数分别为 1.25 nmol/mol、2.50 nmol/mol、5.00 nmol/mol、10.0 nmol/mol、25.0 nmol/mol、50.0 nmol/mol，其余目标化合物摩尔分数分别为 0.25 nmol/mol、0.50 nmol/mol、1.00 nmol/mol、2.00 nmol/mol、5.00 nmol/mol、10.0 nmol/mol 的标准系列（校准曲线浓度可根据实际样品情况做相应调整），内标化合物摩尔分数为 2.0 nmol/mol。按照仪器参考条件，采用 SIM 扫描模式，依次从低浓度到高浓度进行测定。

7.3.3 平均相对响应因子的计算

标准系列中第 i 点某目标化合物的相对响应因子（ RRF_{ij} ），按照公式（4）计算：

$$RRF_{ij} = \frac{A_{ij}}{A_{ISij}} \times \frac{x_{ISj}}{x_{ij}} \quad (4)$$

式中： RRF_{ij} ——标准系列中第 i 点某目标化合物 j 的相对响应因子；

A_{ij} ——标准系列中第 i 点某目标化合物 j 定量离子的响应值；

$A_{IS,ij}$ ——标准系列中第 i 点与目标化合物对应的内标化合物 j 定量离子的响应值；

$x_{IS,j}$ ——标准系列中内标化合物 j 的摩尔分数，nmol/mol；

x_{ij} ——标准系列中第 i 点目标化合物 j 的摩尔分数，nmol/mol。

某目标化合物的平均相对响应因子 $\overline{RRF_j}$ ，按照公式（5）计算：

$$\overline{RRF_j} = \frac{\sum_{i=1}^n RRF_{ij}}{n} \quad (5)$$

式中： $\overline{RRF_j}$ ——某目标化合物 j 的平均相对响应因子；

RRF_{ij} ——标准系列中第 i 点某目标化合物 j 的相对响应因子；

n ——标准系列点数。

7.3.4 校准曲线法

7.3.4.1 采用 FID 检测的目标化合物

以目标化合物的浓度为横坐标，响应值为纵坐标，建立校准曲线。

7.3.4.2 采用 MS 检测的目标化合物

以目标化合物的浓度为横坐标，以目标化合物定量离子响应值与内标化合物定量离子响应值的比值和内标化合物浓度的乘积为纵坐标，建立校准曲线。

7.4 试样测定

样品分析前，按照 6.4.1 进行试样核验，若判定采样罐存在泄漏，样品应重新采集。

经核验合格或制备后的试样（6.4）连接至气体冷阱浓缩仪（5.9），取 300 mL（取样体积可根据试样浓度做适当调整）样品浓缩分析，加入 60.0 mL 内标标准使用气（4.4），按照仪器条件（7.1）测定。

注 1：样品分析后，应查看液氮制冷浓缩仪三级冷阱实际聚焦温度，应 ≤ -187 °C，否则乙烯、乙烷捕集效率较低，应重新测定试样。

注 2：样品分析后，应及时用不锈钢密封帽密封采样罐，以免空气中颗粒物落入而导致采样罐阀门部件受损。

7.5 空白试验

按照与试样测定（7.4）相同的仪器条件和步骤测定空白试样（6.5）。

8 结果计算与表示

8.1 定性分析

采用 FID 检测的目标化合物根据相对保留时间定性。

采用 MS 检测的目标化合物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和质谱图比较进行定性。目标化合物的定量离子和定性离子参见附录 D。

分析标准使用气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。

样品中目标化合物定量离子、定性离子的相对丰度与标准系列中该目标化合物的相对丰度比较，其相对偏差应在±30%以内。

8.2 定量分析

目标化合物经定性鉴别后，FID 检测的目标化合物采用校准曲线法进行定量计算，MS 检测的目标化合物采用平均相对响应因子或校准曲线法进行定量计算。

8.3 结果计算

8.3.1 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，按公式（6）计算。

$$\rho_{sj} = \frac{A_{sj} \times x_{IS,j} \times M_j \times D}{A_{IS,j} \times \overline{RRF}_j \times V_m} \quad (6)$$

式中： ρ_{sj} ——样品中目标化合物 j 的质量浓度， $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ；

A_{sj} ——样品中目标化合物 j 定量离子的响应值；

$x_{IS,j}$ ——样品中内标化合物 j 的摩尔分数， nmol/mol ；

M_j ——目标化合物 j 的摩尔质量， g/mol ；

D ——稀释倍数；

$A_{IS,j}$ ——样品中内标化合物 j 定量离子的响应值；

$\overline{RRF}_j$ ——某目标化合物 j 的平均相对响应因子；

V_m ——根据相关质量标准确定相应状态下气体的摩尔体积，参比状态下为 $24.5 \text{ L}/\text{mol}$ ，标准状态下为 $22.4 \text{ L}/\text{mol}$ 。

8.3.2 校准曲线法

采用校准曲线法计算时，样品中目标化合物的质量浓度，按公式（7）计算。

$$\rho_{sj} = \frac{x_{sj} \times M_j \times D}{V_m} \quad (7)$$

式中： ρ_{sj} ——样品中目标化合物 j 的质量浓度， $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ；

x_{sj} ——校准曲线得出样品中目标化合物 j 的摩尔分数， nmol/mol ；

M_j ——目标化合物 j 的摩尔质量， g/mol ；

D ——稀释倍数；

V_m ——根据相关质量标准确定相应状态下气体的摩尔体积，参比状态下为 $24.5 \text{ L}/\text{mol}$ ，标准状态下为 $22.4 \text{ L}/\text{mol}$ 。

8.4 结果表示

测定结果小数点后位数的保留与方法检出限一致，最多保留 3 位有效数字。

9 准确度

9.1 精密度

9 家实验室在 FID/MS (Scan) 模式下对目标化合物摩尔分数为 0.50 nmol/mol、2.50 nmol/mol、9.00 nmol/mol (其中甲醛摩尔分数分别是 2.50 nmol/mol、12.5 nmol/mol 和 45.0 nmol/mol) 的统一空白加标样品重复测定 6 次：实验室内相对标准偏差范围分别为 0.43%~24%、0.30%~14%、0.17%~18%，实验室间相对标准偏差分别为 4.5%~18%、2.5%~16%、2.1%~17%；重复性限分别为 0.063 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ~0.67 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 、0.18 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ~2.8 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 、0.49 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ~11 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ，再现性限范围分别为 0.12 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ~1.8 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 、0.36 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ~10 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 、0.85 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ~30 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 。

9 家实验室在 FID/MS (Scan) 模式下对各自实验室采集的浓度范围为未检出~3.52 nmol/mol 和未检出~5.78 nmol/mol 的非统一样品，加标量为 2.00 nmol/mol 和 9.00 nmol/mol (其中甲醛加标量分别是 10.0 nmol/mol 和 45.0 nmol/mol) 的实际加标样品重复测定 6 次：实验室内相对标准偏差范围分别为 0.32%~19%、0.24%~18%。

9 家实验室在 FID/MS (SIM) 模式下对目标化合物摩尔分数为 0.20 nmol/mol、1.00 nmol/mol、9.00 nmol/mol (其中甲醛摩尔分数分别是 1.00 nmol/mol、5.00 nmol/mol 和 45.0 nmol/mol) 的统一空白加标样品重复测定 6 次：实验室内相对标准偏差范围分别为 0.98%~18%、0.34%~19%、0.16%~19%，实验室间相对标准偏差分别为 3.6%~19%、3.8%~15%、1.7%~16%；重复性限分别为 0.037 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ~0.3 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 、0.12 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ~1.4 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 、0.62 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ~15 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ，再现性限范围分别为 0.080 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ~0.92 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 、0.23 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ~4.5 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 、0.079 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ~27 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 。

9 家实验室在 FID/MS (SIM) 模式下对各自实验室采集的浓度范围为未检出~5.76 nmol/mol 和未检出~5.99 nmol/mol 的非统一样品，加标量为 2.00 nmol/mol 和 9.00 nmol/mol (其中甲醛加标量分别是 10.0 nmol/mol 和 45.0 nmol/mol) 的实际加标样品重复测定 6 次：实验室内相对标准偏差范围分别为 0.25%~18%和 0.13%~15%。

方法精密度测试结果参见附录 E 中表 E.1~表 E.4。

9.2 正确度

9 家实验室在 FID/MS (Scan) 模式下对目标化合物摩尔分数为 0.50 nmol/mol、2.50 nmol/mol、9.00 nmol/mol (其中甲醛摩尔分数分别是 2.50 nmol/mol、12.5 nmol/mol 和 45.0 nmol/mol) 的统一空白加标样品重复测定 6 次：加标回收率范围分别为 68.0%~130%、68.0%~126%和 73.4%~129%，加标回收率最终值分别为 92.4% $\pm$ 17%~107% $\pm$ 24%、87.2% $\pm$ 18%~104% $\pm$ 13%和 94.0% $\pm$ 28%~106% $\pm$ 30%。

9 家实验室在 FID/MS (Scan) 模式下对各自实验室采集的浓度范围为未检出~3.52 nmol/mol 和未检出~5.78 nmol/mol 的非统一样品，加标量为 2.00 nmol/mol 和 9.00 nmol/mol (其中甲醛加标量分别是

10.0 nmol/mol 和 45.0 nmol/mol) 的实际加标样品重复测定 6 次: 加标回收率范围分别为 65.5%~132% 和 70.1%~132%。

9 家实验室在 FID/MS (SIM) 模式下对目标化合物摩尔分数为 0.20 nmol/mol、1.00 nmol/mol、9.00 nmol/mol (其中甲醛摩尔分数分别是 1.00 nmol/mol、5.00 nmol/mol 和 45.0 nmol/mol) 的统一空白加标样品重复测定 6 次: 加标回收率分别为 70.0%~130%、71.0%~132% 和 72.7%~129%, 加标回收率最终值分别为 $88.9\% \pm 24\%$ ~ $108\% \pm 22\%$ 、 $91.6\% \pm 16\%$ ~ $108\% \pm 18\%$ 和 $93.3\% \pm 22\%$ ~ $109\% \pm 18\%$ 。

9 家实验室在 FID/MS (SIM) 模式下对各自实验室采集的浓度范围为未检出~5.76 nmol/mol 和未检出~5.99 nmol/mol 的非统一样品, 加标量为 2.00 nmol/mol 和 9.00 nmol/mol (其中甲醛加标量分别是 10.0 nmol/mol 和 45.0 nmol/mol) 的实际加标样品重复测定 6 次, 加标回收率范围分别为 66.5%~135% 和 69.1%~131%。

方法正确度测试结果参见附录 E 中表 E.5~表 E.8。

10 质量保证和质量控制

10.1 采样过程

10.1.1 采样罐清洁度检验

采样罐 (5.1) 内壁应经惰性化处理。环境空气的采样罐不应与污染源的采样罐混用。

每批次应至少抽取 1 个采样罐检验清洁度, 优先选择之前含有较高浓度样品的采样罐检验。

清洁度检验方法: 真空采样罐充入氮气 (4.7), 静置过夜, 按照与样品相同的分析步骤进行测试, 每个目标化合物的检出浓度均应小于方法检出限, 否则应查找原因并重新清洗至合格为止。

10.1.2 采样罐气密性检查

每 10 个或每批次 (少于 10 个) 采样罐 (5.1), 应至少抽取 1 个进行气密性检查。轮流抽查不同采样罐, 确保在用的采样罐每年至少被检查 1 次。

使用气体稀释装置 (5.11) 或压力真空表 (5.12) 检查采样罐 (5.1) 气密性, 气密性检查可采用加压或抽真空方式。将采样罐 (5.1) 内充入气体至 206 kPa (30 psi), 或将采样罐内抽真空至 27 Pa (200 mTorr), 关闭阀门静置数天后, 采样罐内压力变化不超过 0.69 kPa/d。

10.1.3 采样罐惰性检查

采样罐 (5.1) 内加湿 40%~50% 后, 在采样罐 (5.1) 内配制摩尔分数为 0.5 nmol/mol 的标准气体样品 (其中甲醛摩尔分数为 2.5 nmol/mol), 间隔 24 h 后检测, 测定结果的相对误差应在 $\pm 30\%$ 以内, 所有采样罐不必同时检查, 但每个采样罐每 3 a 至少检查 1 次。为及时发现使用年限长的采样罐可能存在的惰性涂层脱落、接口处有活点等问题, 对年限大于 8 a 的采样罐, 应每年至少检查 1 次。

10.1.4 流量控制器气密性检查

每 10 个或每批次 (少于 10 个) 流量控制器, 应至少抽取 1 个进行气密性检查。轮流抽查不同流量控制器, 确保在用的流量控制器每年至少检查 1 次。对检查不合格的流量控制器应查找漏气原因。

气密性检查方法：将流量控制器连接在真空采样罐上，拧紧流量控制器的入口，打开和关闭真空采样罐阀，观察压力表至少 2 min，不应出现可察觉的压力升高。如果观察到压力升高，则流量控制器不合格。

10.1.5 自动采样器检查

若采用自动采样器采集样品，应进行清洁度和惰性检查。自动采样器初始使用前、维护（如部件更换）后、采集潜在污染样品后、以及定期（如每年）应进行检查。

清洁度检查：通过自动采样器采集加湿的氮气（4.7），按照与样品相同的分析步骤进行测试，每个目标化合物检出浓度应小于实验室的方法检出限，否则应查找原因并采取措施至合格为止。

惰性检查：采样罐（5.1）内加湿 40%~50%后，在采样罐（5.1）内配制摩尔分数为 0.5 nmol/mol 的标准气体样品（其中甲醛摩尔分数为 2.5 nmol/mol），通过自动采样器采集后，按照与样品相同的分析步骤测试，测定结果的相对误差应在±30%以内，否则应查找原因并采取措施至合格为止。

10.2 分析过程

10.2.1 仪器性能检查

气体稀释装置（5.11）的质量流量计每年至少核查 1 次。

每批样品分析之前或每 24 h 需进行仪器性能检查，得到的 4-溴氟苯质谱图离子丰度应全部符合要求。

10.2.2 初始校准

校准曲线至少包含 5 个浓度点，初始校准曲线相关系数 ≥ 0.990 或校准曲线各浓度点的相对响应因子（RRF）的相对标准偏差（RSD）应 $\leq 30\%$ ，否则应查找原因并重新制作校准曲线。

10.2.3 连续校准

每 24 h 分析 1 次校准曲线中间浓度点，测定结果与初始浓度值的相对误差应在±30%以内，否则应重新制作校准曲线。

10.2.4 内标

内标与校准曲线中间点内标的保留时间变化不超过 20 s，定量离子响应值变化应在 70%~130%之间。

10.2.5 实验室空白

每批样品分析前应测试实验室空白，实验室空白中目标化合物检出浓度不得高于方法检出限，否则应通过 10.2.6 和 10.2.7 等措施分析查找原因，并采取相应措施，消除干扰或污染。

10.2.6 自动进样器空白

以清洁采样罐中注入加湿的氮气（4.7）作为空白，将采样罐依次连接至自动进样器每个端口，按

照与样品测定相同的步骤进行分析，每个目标化合物的浓度需小于方法检出限。

10.2.7 仪器空白

设置进样体积为 0 mL，按照与样品测定相同的步骤进行分析，每个目标化合物的浓度需小于方法检出限。

10.2.8 运输空白

每批样品至少分析 1 个运输空白。运输空白中目标化合物检出浓度应低于方法检出限，否则应查找原因，并采取相应措施，消除干扰或污染。

10.2.9 平行样品

每 10 个样品或每批次样品（少于 10 个）应分析 1 个平行样，平行样中目标化合物的相对偏差应在 ±30% 以内。

10.2.10 方法检出限

实验室每年至少测定 1 次方法检出限，仪器维修或有较大变动后，需重新测定。

11 注意事项

11.1 各实验室进行方法验证时，若甲醛的定性离子和定量离子受其他小分子干扰，或甲醛方法检出限、精密度或正确度等方法性能指标不满足本标准要求，建议采用其他方法开展监测。

11.2 采样罐（5.1）中有液态水时，极性较强的目标化合物回收率较低。采样时，应注意当室内外温度不同的情况下，水分的饱和蒸气压不同，采样罐在室外存放和室内存放的湿度亦不同。当相对湿度高于 50%、室内温度比室外温度低 10℃ 以上时，不能立即测定，需按公式（8）计算在室内存放时，采样罐（5.1）内相对湿度，若 > 100%，应在采样罐清洗装置（5.10）或其他加热设备中，与采样现场相同温度下放置，并尽快分析。

$$RH_2 = \frac{RH_1 \times \rho_1}{\rho_2} \quad (8)$$

式中：RH₂——采样罐在室内存放时，罐内的湿度，%；

RH₁——采样罐在室外存放时，环境空气的湿度，%；

ρ₁——室外环境温度条件下，气体中饱和水分含量，mg/L，由附录 B 中表 B.1 获得；

ρ₂——室内环境温度条件下，气体中饱和水分含量，mg/L，由附录 B 中表 B.1 获得。

11.3 当发现标准样品中高沸点或极性组分响应值明显偏低，或标准曲线相对响应因子的相对标准偏差或线性方程线性相关系数超出方法规定范围时，可通过提高气体冷阱浓缩仪二级冷阱脱附温度、核查采样罐性能、更换浓缩仪吸附材料或清洗离子源等方式，排查出现异常的原因，确认是否存在气体冷阱浓缩仪二级脱附温度偏低、浓缩仪吸附剂性能下降或被不可逆污染、采样罐有吸附活点以及质谱离子源被

污染等问题。

11.4 切勿过于用力或使用不适当的工具过度拧紧采样阀，以防损坏采样阀并导致采样罐漏气。采样罐阀门只能手动拧紧至关闭状态，不得使用工具拧紧。采用不锈钢波纹管设计的阀门，过紧会损坏阀座，导致泄漏。

附 录 A
(规范性附录)
方法检出限

当取样量为 300 mL 时, FID/MS (Scan) 和 FID/MS (SIM) 模式下, 方法检出限和测定下限见表 A.1。

表 A.1 方法检出限和测定下限

序号	化合物名称	CAS No.	FID/MS (Scan) 模式			FID/MS (SIM) 模式		
			检出限 (nmol/mol)	检出限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	测定下限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	检出限 (nmol/mol)	检出限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	测定下限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
1	乙烯	74-85-1	0.2	0.2	0.8	0.09	0.2	0.8
2	乙烷	74-80-0	0.2	0.2	0.8	0.1	0.2	0.8
3	乙炔	74-86-2	0.2	0.2	0.8	0.08	0.09	0.36
4	甲醛	50-00-0	1	2	8	0.5	0.6	2.4
5	丙烯	115-07-1	0.1	0.2	0.8	0.1	0.2	0.8
6	丙烷	74-98-6	0.2	0.4	1.6	0.07	0.2	0.8
7	二氟二氯甲烷	75-71-8	0.05	0.3	1.2	0.05	0.3	1.2
8	一氯甲烷	74-87-3	0.2	0.3	1.2	0.05	0.1	0.4
9	异丁烷	75-28-5	0.2	0.5	2.0	0.06	0.2	0.8
10	乙醛	75-07-0	0.3	0.6	2.4	0.05	0.1	0.4
11	1,1,2,2-四氟-1,2-二氯乙烷	76-14-2	0.09	0.7	2.8	0.04	0.3	1.2
12	氯乙烯	75-01-4	0.09	0.3	1.2	0.05	0.2	0.8
13	正丁烯	106-98-9	0.2	0.3	1.2	0.05	0.2	0.8
14	丁二烯	106-99-0	0.2	0.3	1.2	0.06	0.2	0.8
15	正丁烷	106-97-8	0.1	0.3	1.2	0.04	0.1	0.4
16	反式-2-丁烯	624-64-6	0.2	0.4	1.6	0.05	0.2	0.8
17	一溴甲烷	74-83-9	0.2	0.5	2.0	0.05	0.2	0.8
18	顺式-2-丁烯	590-18-1	0.09	0.3	1.2	0.06	0.2	0.8
19	氯乙烷	75-00-3	0.09	0.3	1.2	0.05	0.2	0.8
20	丙烯醛	107-02-8	0.2	0.3	1.2	0.05	0.2	0.8
21	丙酮	67-64-1	0.07	0.2	0.8	0.08	0.2	0.8
22	异戊烷	78-78-4	0.2	0.4	1.6	0.06	0.2	0.8
23	丙醛	123-38-6	0.2	0.4	1.6	0.09	0.3	1.2
24	一氟三氯甲烷	75-69-4	0.07	0.5	2.0	0.05	0.3	1.2
25	异丙醇	67-63-0	0.2	0.5	2.0	0.05	0.2	0.8
26	1-戊烯	109-67-1	0.2	0.6	2.4	0.05	0.2	0.8
27	正戊烷	109-66-0	0.09	0.3	1.2	0.05	0.2	0.8
28	2-甲基-1,3-丁二烯	78-79-5	0.1	0.3	1.2	0.05	0.2	0.8
29	反式-2-戊烯	646-04-8	0.09	0.3	1.2	0.05	0.2	0.8

序号	化合物名称	CAS No.	FID/MS (Scan) 模式			FID/MS (SIM) 模式		
			检出限 (nmol/mol)	检出限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	测定下限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	检出限 (nmol/mol)	检出限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	测定下限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
30	1,1-二氯乙烯	75-35-4	0.07	0.3	1.2	0.05	0.2	0.8
31	顺式-2-戊烯	627-20-3	0.09	0.3	1.2	0.05	0.2	0.8
32	二氯甲烷	75-09-2	0.2	0.5	2.0	0.05	0.2	0.8
33	二硫化碳	75-15-0	0.07	0.3	1.2	0.05	0.2	0.8
34	1,2,2-三氟-1,1,2-三氯乙烷	76-13-1	0.06	0.5	2.0	0.05	0.4	1.6
35	2,2-二甲基丁烷	75-83-2	0.2	0.4	1.6	0.05	0.2	0.8
36	甲基丙烯醛	78-85-3	0.2	0.6	2.4	0.05	0.2	0.8
37	反式-1,2-二氯乙烯	156-60-5	0.06	0.3	1.2	0.05	0.2	0.8
38	1,1-二氯乙烷	75-34-3	0.06	0.3	1.2	0.05	0.3	1.2
39	甲基叔丁基醚	1634-04-4	0.08	0.4	1.6	0.04	0.2	0.8
40	环戊烷	287-92-3	0.2	0.4	1.6	0.06	0.2	0.8
41	2,3-二甲基丁烷	79-29-8	0.2	0.5	2.0	0.05	0.2	0.8
42	乙酸乙烯酯	108-05-4	0.1	0.4	1.6	0.05	0.2	0.8
43	2-甲基戊烷	107-83-5	0.2	0.7	2.8	0.06	0.3	1.2
44	正丁醛	123-72-8	0.3	0.8	3.2	0.06	0.3	1.2
45	2-丁酮	78-93-3	0.1	0.4	1.6	0.05	0.2	0.8
46	3-甲基戊烷	96-14-0	0.07	0.3	1.2	0.05	0.2	0.8
47	1-己烯	592-41-6	0.2	0.6	2.4	0.05	0.2	0.8
48	顺式-1,2-二氯乙烯	156-59-2	0.09	0.4	1.6	0.04	0.2	0.8
49	乙酸乙酯	141-78-6	0.1	0.4	1.6	0.05	0.2	0.8
50	正己烷	110-54-3	0.09	0.4	1.6	0.05	0.2	0.8
51	三氯甲烷	67-66-3	0.05	0.3	1.2	0.04	0.3	1.2
52	四氢呋喃	109-99-9	0.07	0.3	1.2	0.05	0.2	0.8
53	丁烯醛	123-73-9	0.2	0.5	2.0	0.06	0.2	0.8
54	1,2-二氯乙烷	107-06-2	0.1	0.5	2.0	0.05	0.2	0.8
55	甲基环戊烷	96-37-7	0.2	0.5	2.0	0.04	0.2	0.8
56	2,4-二甲基戊烷	108-08-7	0.2	0.6	2.4	0.05	0.2	0.8
57	1,1,1-三氯乙烷	71-55-6	0.06	0.4	1.6	0.05	0.3	1.2
58	苯	71-43-2	0.1	0.4	1.6	0.05	0.2	0.8
59	四氯化碳	56-23-5	0.04	0.3	1.2	0.04	0.3	1.2
60	环己烷	110-82-7	0.2	0.7	2.8	0.05	0.2	0.8
61	2-甲基己烷	591-76-4	0.2	0.6	2.4	0.05	0.2	0.8
62	2,3-二甲基戊烷	565-59-3	0.2	0.5	2.0	0.04	0.2	0.8
63	戊醛	110-62-3	0.2	0.6	2.4	0.05	0.2	0.8
64	3-甲基己烷	589-34-4	0.2	0.7	2.8	0.05	0.2	0.8
65	1,2-二氯丙烷	78-87-5	0.08	0.4	1.6	0.05	0.3	1.2
66	一溴二氯甲烷	75-27-4	0.08	0.6	2.4	0.05	0.3	1.2

序号	化合物名称	CAS No.	FID/MS (Scan) 模式			FID/MS (SIM) 模式		
			检出限 (nmol/mol)	检出限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	测定下限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	检出限 (nmol/mol)	检出限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	测定下限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
67	1,4-二氧六环	123-91-1	0.2	0.6	2.4	0.05	0.2	0.8
68	三氯乙烯	79-01-6	0.1	0.6	2.4	0.05	0.3	1.2
69	2,2,4-三甲基戊烷	540-84-1	0.2	0.6	2.4	0.05	0.3	1.2
70	甲基丙烯酸甲酯	80-62-6	0.2	0.7	2.8	0.05	0.3	1.2
71	正庚烷	142-82-5	0.2	0.8	3.2	0.05	0.3	1.2
72	反式-1,3-二氯-1-丙烯	10061-02-6	0.07	0.4	1.6	0.04	0.2	0.8
73	4-甲基-2-戊酮	108-10-1	0.09	0.4	1.6	0.05	0.2	0.8
74	甲基环己烷	108-87-2	0.09	0.4	1.6	0.04	0.2	0.8
75	顺式-1,3-二氯-1-丙烯	10061-01-5	0.05	0.3	1.2	0.05	0.3	1.2
76	1,1,2-三氯乙烷	79-00-5	0.06	0.4	1.6	0.05	0.3	1.2
77	2,3,4-三甲基戊烷	565-75-3	0.08	0.5	2.0	0.05	0.3	1.2
78	甲苯	108-88-3	0.08	0.4	1.6	0.04	0.2	0.8
79	2-甲基庚烷	592-27-8	0.2	0.6	2.4	0.06	0.3	1.2
80	2-己酮	591-78-6	0.2	0.8	3.2	0.05	0.2	0.8
81	3-甲基庚烷	589-81-1	0.2	0.6	2.4	0.05	0.3	1.2
82	二溴一氯甲烷	124-48-1	0.06	0.6	2.4	0.05	0.4	1.6
83	己醛	66-25-1	0.3	2	8	0.05	0.2	0.8
84	1,2-二溴乙烷	106-93-4	0.05	0.5	2.0	0.05	0.4	1.6
85	正辛烷	111-65-9	0.06	0.3	1.2	0.06	0.3	1.2
86	四氯乙烯	127-18-4	0.08	0.6	2.4	0.04	0.3	1.2
87	氯苯	108-90-7	0.08	0.4	1.6	0.05	0.3	1.2
88	乙苯	100-41-4	0.08	0.4	1.6	0.05	0.2	0.8
89/ 90	间/对-二甲苯	108-38-3/ 106-42-3	0.2	0.7	2.8	0.2	0.7	2.8
91	三溴甲烷	75-25-2	0.08	0.9	3.6	0.05	0.5	2.0
92	苯乙烯	100-42-5	0.07	0.3	1.2	0.04	0.2	0.8
93	四氯乙烷	79-34-5	0.06	0.5	2.0	0.05	0.4	1.6
94	邻二甲苯	95-47-6	0.06	0.3	1.2	0.05	0.2	0.8
95	正壬烷	111-84-2	0.06	0.3	1.2	0.05	0.3	1.2
96	异丙苯	98-82-8	0.07	0.4	1.6	0.05	0.3	1.2
97	苯甲醛	100-52-7	0.2	0.8	3.2	0.05	0.3	1.2
98	正丙苯	103-65-1	0.07	0.4	1.6	0.05	0.3	1.2
99	间乙基甲苯	620-14-4	0.2	0.8	3.2	0.04	0.2	0.8
100	对乙基甲苯	622-96-8	0.2	1	4	0.05	0.3	1.2
101	1,3,5-三甲苯	108-67-8	0.08	0.5	2.0	0.06	0.3	1.2
102	邻乙基甲苯	611-14-3	0.2	0.6	2.4	0.05	0.3	1.2

序号	化合物名称	CAS No.	FID/MS (Scan) 模式			FID/MS (SIM) 模式		
			检出限 (nmol/mol)	检出限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	测定下限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	检出限 (nmol/mol)	检出限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	测定下限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
103	1,2,4-三甲苯	95-63-6	0.06	0.4	1.6	0.05	0.3	1.2
104	癸烷	124-18-5	0.09	0.6	2.4	0.04	0.3	1.2
105	氯代甲苯	100-44-7	0.09	0.5	2.0	0.05	0.3	1.2
106	对二氯苯	106-46-7	0.2	2	8	0.04	0.3	1.2
107	间二氯苯	541-73-1	0.1	0.6	2.4	0.05	0.3	1.2
108	1,2,3-三甲苯	526-73-8	0.2	0.6	2.4	0.05	0.3	1.2
109	邻二氯苯	95-50-1	0.06	0.4	1.6	0.05	0.3	1.2
110	间二乙基苯	141-93-5	0.1	0.6	2.4	0.05	0.3	1.2
111	对二乙基苯	105-05-5	0.1	0.6	2.4	0.04	0.3	1.2
112	间甲基苯甲醛	620-23-5	0.3	2	8	0.05	0.3	1.2
113	十一烷	1120-21-4	0.06	0.4	1.6	0.05	0.3	1.2
114	1,2,4-三氯苯	120-82-1	0.2	2	8	0.05	0.4	1.6
115	萘	91-20-3	0.2	0.8	3.2	0.05	0.3	1.2
116	十二烷	112-40-3	0.2	2	8	0.05	0.4	1.6
117	1,1,2,3,4,4-六氯 -1,3-丁二烯	87-68-3	0.09	1	4	0.04	0.4	1.6

附 录 B
(资料性附录)
采样罐加湿方法

采样罐加湿方法为：拧开已抽真空采样罐（5.1）的密封帽，采用脱脂棉签清理采样罐入口螺母，使用注射器在采样罐口注入适量实验用水后，立即将采样罐接至气体稀释装置（5.11）配气口，打开采样罐阀门 5 s~10 s 后关闭，并重复开、关阀门 2 次。

注：亦可使用其它方式或使用自动加湿装置做加湿处理。

采样罐中注入的水量按照公式（B.1）计算：

$$V_w = \rho_{\text{sat}} \times RH_d \times V_c \times \frac{1}{\rho_w} \quad (\text{B.1})$$

式中： V_w ——需要添加到采样罐中水的体积， μL ；

ρ_{sat} ——加湿时，实验室环境温度下气体中饱和水分含量， mg/L （见表 B.1）；

RH_d ——以十进制表示的采样罐内相对湿度水平（如：相对湿度 $RH=50\%$ 时， $RH_d=0.5$ ），无量纲；

V_c ——采样罐容积， L ；

ρ_w ——实验室环境温度下水的密度，通常按 $1 \text{ mg}/\mu\text{L}$ 计算。

注 1：当采样罐内压力与环境大气压不同时，气体在采样罐内的湿度与在环境条件下的湿度亦不同，本公式为采样罐内湿度。

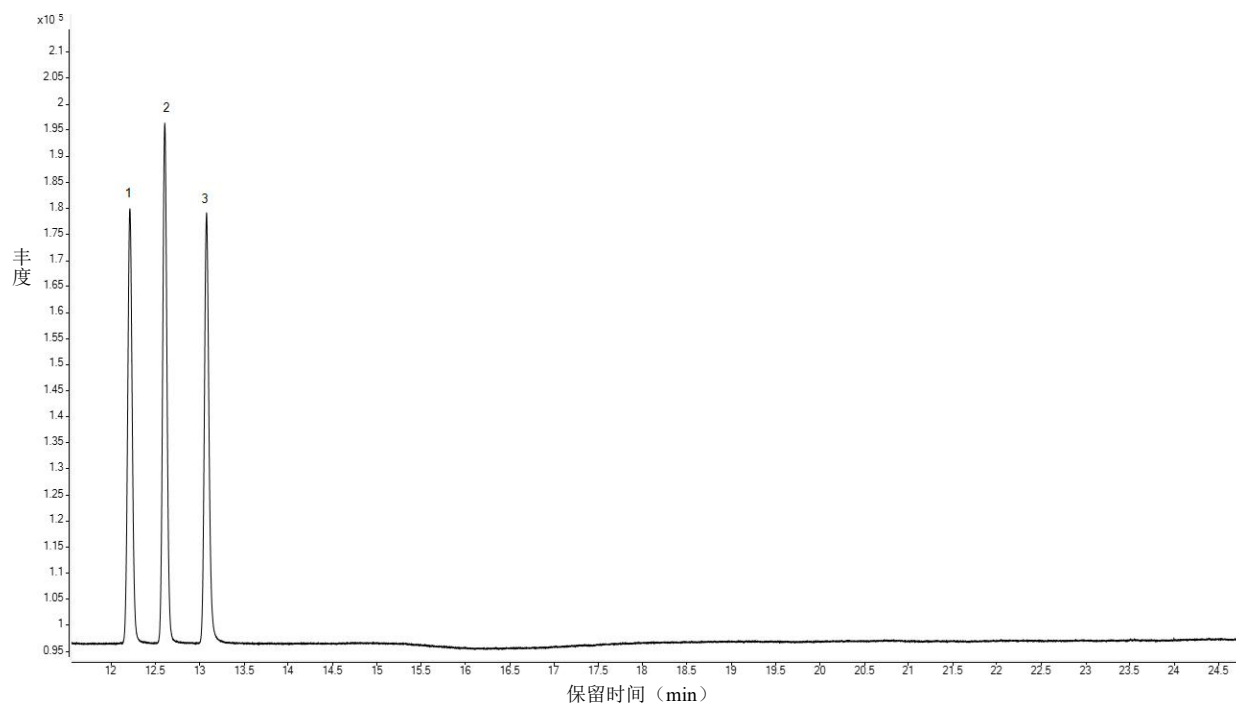
注 2：采样罐内湿度不得 $\geq 100\%$ ，否则部分目标化合物回收率较低。

表 B.1 不同温度下气体中饱和水分含量

温度（℃）	饱和水分含量（mg/L）	温度（℃）	饱和水分含量（mg/L）
15	12.8	25	23.1
16	13.6	26	24.4
17	14.4	27	25.9
18	15.3	28	27.3
19	16.3	29	28.9
20	17.3	30	30.5
21	18.3	31	32.2
22	19.4	32	34.0
23	20.6	33	35.8
24	21.8	/	/
$\rho_{\text{sat}} (\text{mg/L}) = 5.018 + 0.32321T + 8.1847 \times 10^{-3}T^2 + 3.1243 \times 10^{-4}T^3$			

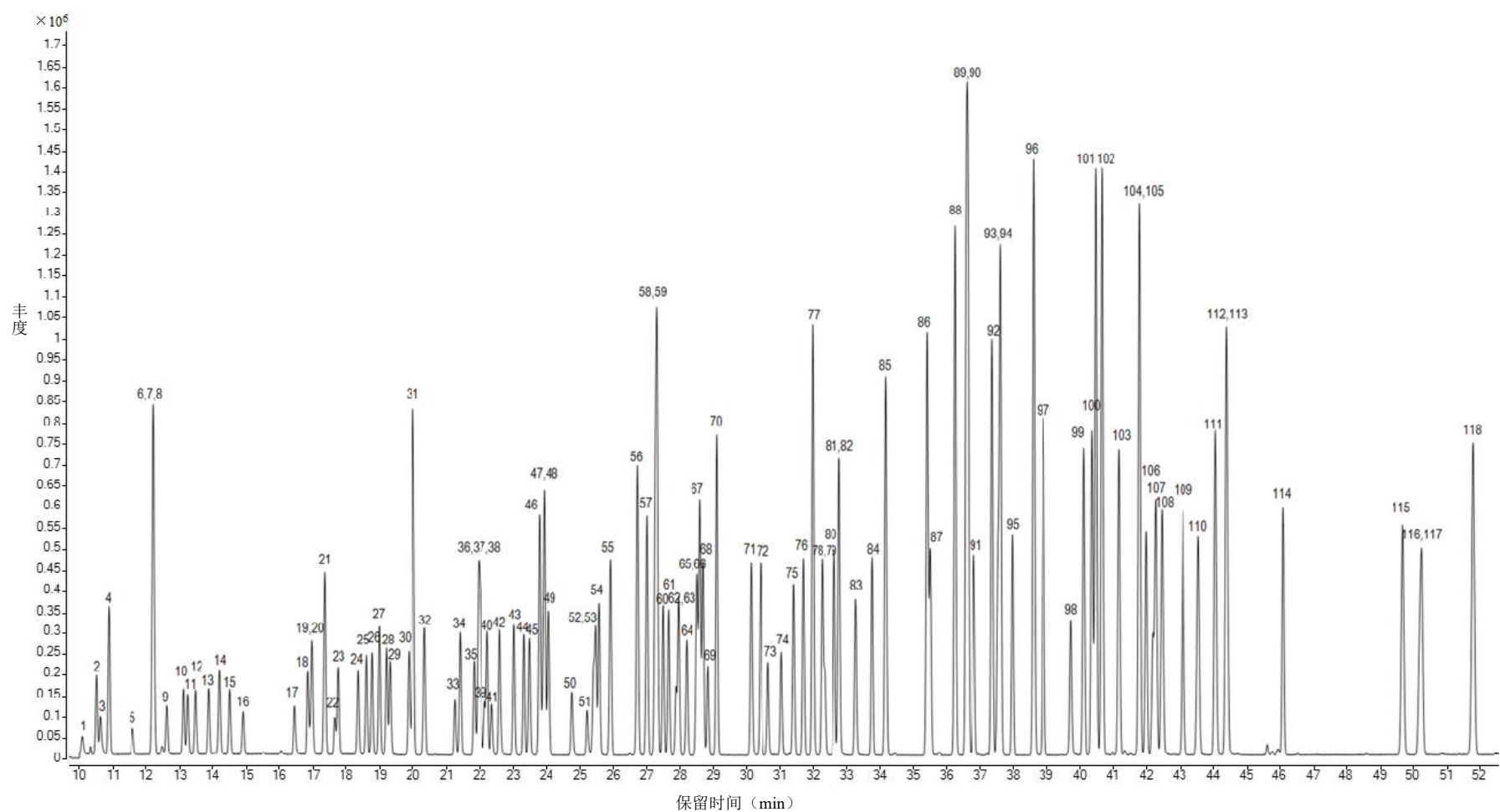
附录 C
(资料性附录)
参考色谱图

参考条件下 FID 测定乙烯、乙炔和乙烷等 3 种目标化合物，MS 测定其他目标化合物标准使用气体 ($\phi=2.00$ nmol/mol) 得到的色谱图见图 C.1 和图 C.2。



1——乙烯；2——乙烷；3——乙炔。

图 C.1 FID 测定的目标化合物色谱图

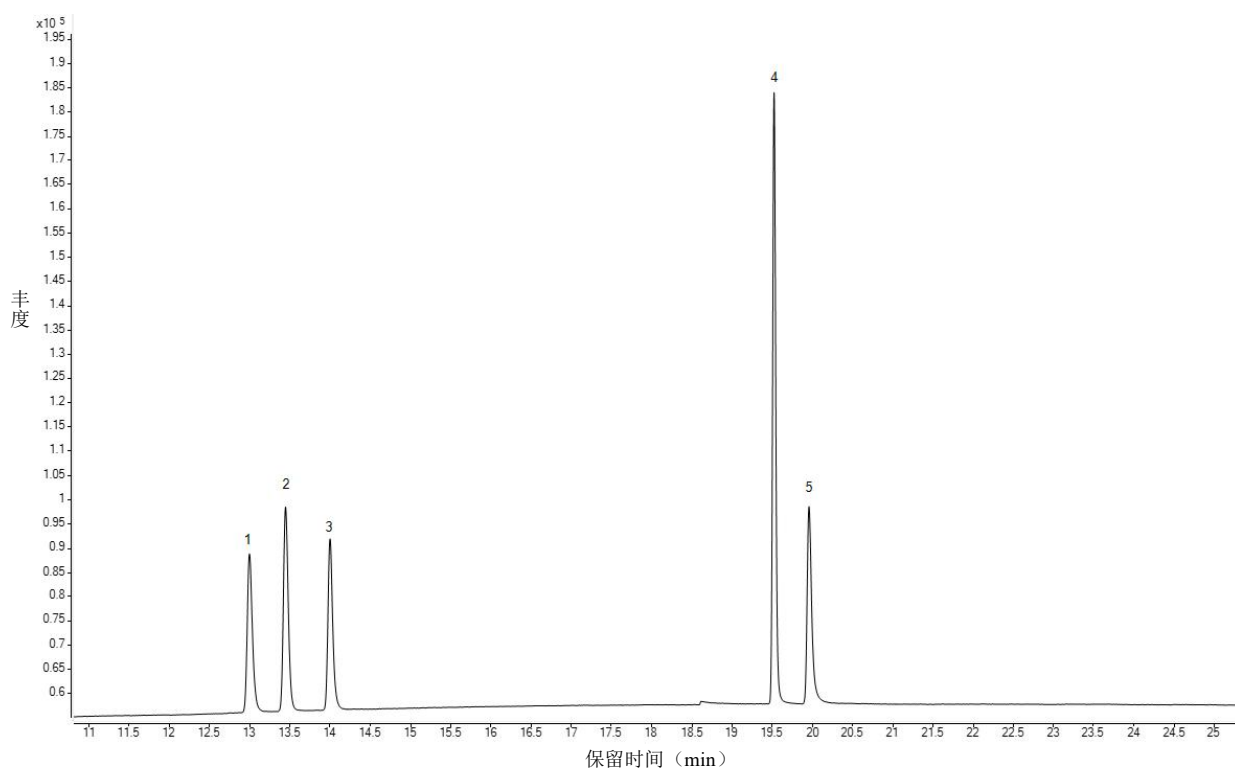


1——甲醛；2——丙烯；3——丙烷；4——二氟二氯甲烷；5——一氯甲烷；6——异丁烷；7——乙醛；8——1,1,2,2-四氟-1,2-二氯乙烷；9——氯乙烯；10——正丁烯；11——丁二烯；12——正丁烷；13——反式-2-丁烯；14——一溴甲烷；15——顺式-2-丁烯；16——氯乙烷；17——丙烯醛；18——丙酮；19——异戊烷；20——丙醛；21——一氟三氯甲烷；22——异丙醇；23——1-戊烯；24——正戊烷；25——2-甲基-1, 3-丁二烯；26——反式-2-戊烯；27——1,1-二氯乙烯；28——顺式-2-戊烯；29——二氯甲烷；30——二硫化碳；

31——1, 2, 2-三氟-1,1,2-三氯乙烷; 32——2,2-二甲基丁烷; 33——甲基丙烯醛; 34——反式-1,2-二氯乙烯; 35——1,1-二氯乙烷; 36——甲基叔丁基醚; 37——环戊烷; 38——2,3-二甲基丁烷; 39——乙酸乙烯酯; 40——2-甲基戊烷; 41——正丁醛; 42——2-丁酮; 43——3-甲基戊烷; 44——1-己烯; 45——顺式-1,2-二氯乙烯; 46——一溴一氯甲烷 (内标); 47——乙酸乙酯; 48——正己烷; 49——三氯甲烷; 50——四氢呋喃; 51——丁烯醛; 52——1,2-二氯乙烷; 53——甲基环戊烷; 54——2,4-二甲基戊烷; 55——1,1,1-三氯乙烷; 56——苯; 57——四氯化碳; 58——环己烷; 59——1,4-二氟苯 (内标); 60——2-甲基己烷; 61——2,3-二甲基戊烷; 62——戊醛; 63——3-甲基己烷; 64——1,2-二氯丙烷; 65——一溴二氯甲烷; 66——1,4-二氧六环; 67——三氯乙烯; 68——2,2,4-三甲基戊烷; 69——甲基丙烯酸甲酯; 70——正庚烷; 71——反式-1,3-二氯-1-丙烯; 72——4-甲基-2-戊酮; 73——甲基环己烷; 74——顺式-1,3-二氯-1-丙烯; 75——1,1,2-三氯乙烷; 76——2,3,4-三甲基戊烷; 77——甲苯; 78——2-甲基庚烷; 79——2-己酮; 80——3-甲基庚烷; 81——二溴一氯甲烷; 82——己醛; 83——1,2-二溴乙烷; 84——正辛烷; 85——四氯乙烯; 86——氯苯-*d*₅ (内标); 87——氯苯; 88——乙苯; 89,90——间/对-二甲苯; 91——三溴甲烷; 92——苯乙烯; 93——四氯乙烷; 94——邻二甲苯; 95——正壬烷; 96——4-溴氟苯 (BFB); 97——异丙苯; 98——苯甲醛; 99——正丙苯; 100——间乙基甲苯; 101——对乙基甲苯; 102——1,3,5-三甲苯; 103——邻乙基甲苯; 104——1,2,4-三甲苯; 105——癸烷; 106——氯代甲苯; 107——对二氯苯; 108——间二氯苯; 109——1,2,3-三甲苯; 110——邻二氯苯; 111——间二乙基苯; 112——对二乙基苯; 113——间甲基苯甲醛; 114——十一烷; 115——1,2,4-三氯苯; 116——萘; 117——十二烷; 118——1,1,2,3,4,4-六氯-1,3-丁二烯。

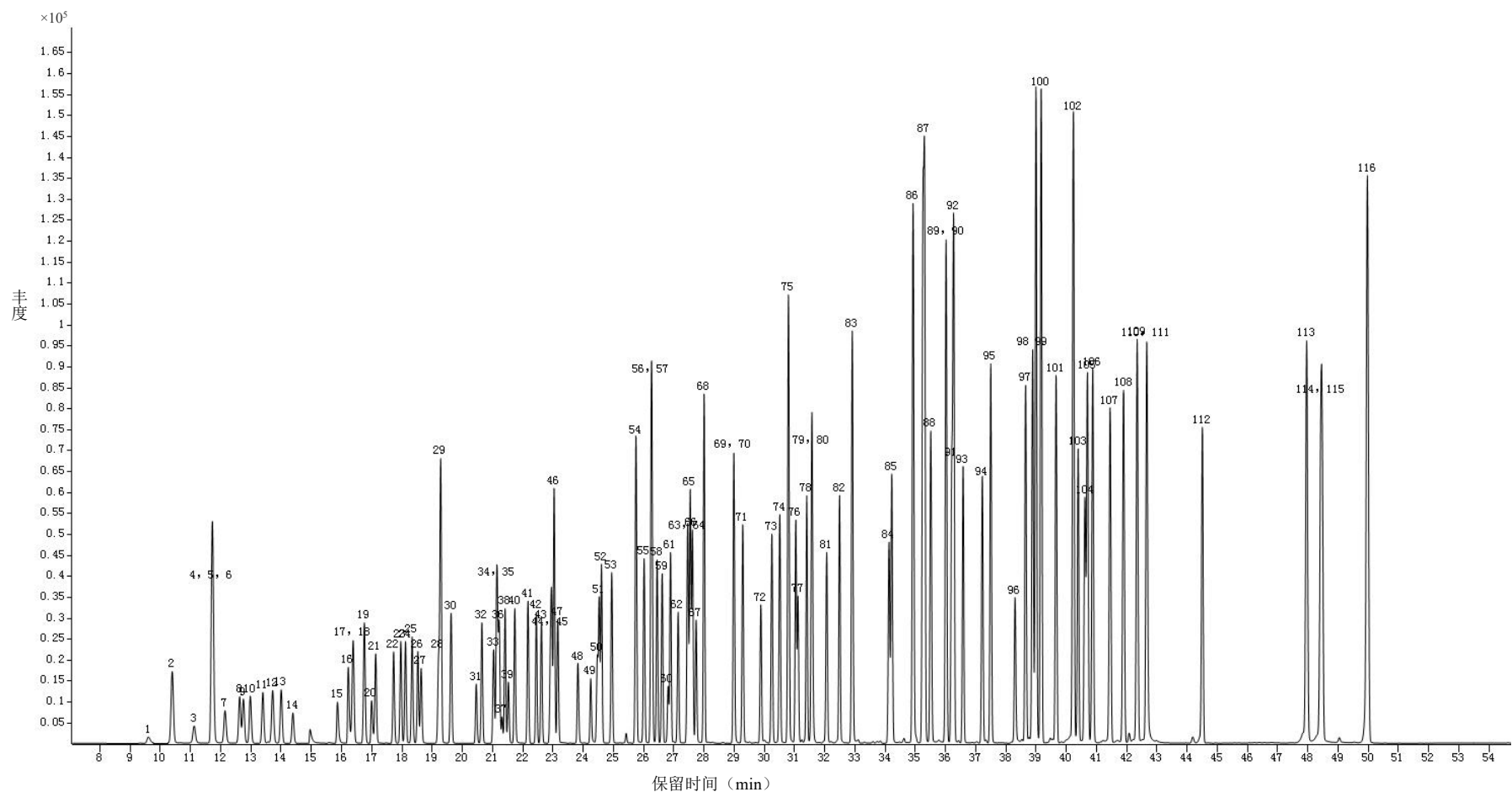
图 C. 2 MS 测定的目标化合物和内标化合物总离子色谱图

图 C.3 和图 C.4 分别给出了参考条件下 FID 测定乙烯、乙炔、乙烷、丙烯和丙烷等 5 种目标化合物，MS 测定其他目标化合物标准使用气体 ($\phi=2.00$ nmol/mol) 得到的色谱图。



1——乙烯；2——乙烷；3——乙炔；4——丙烯；5——丙烷。

图 C.3 FID 测定的目标化合物色谱图



1——甲醛；2——二氟二氯甲烷；3——一氯甲烷；4——异丁烷；5——乙醛；6——1,1,2,2-四氟-1,2-二氯乙烷；7——氯乙烯；8——正丁烯；9——丁二烯；10——正丁烷；11——反式-2-丁烯；12——一溴甲烷；13——顺式-2-丁烯；14——氯乙烷；15——丙烯醛；16——丙酮；17——异戊烷；18——丙醛；19——一氟三氯甲烷；20——异丙醇；21——1-戊烯；22——正戊烷；23——2-甲基-1,3-丁二烯；24——反式-2-戊烯；25——1,1-二氯乙烯；26——顺式-2-戊烯；27——二氯甲烷；28——二硫化碳；29——1,2,2-三氟-1,1,2-三氯乙烷；30——2,2-二甲基丁烷；31——甲基丙烯醛；32——反式-1,2-二氯乙烯；33——1,1-二氯乙烷；34——甲基叔丁基醚；35——环戊烷；36——2,3-二甲基丁烷；37——乙酸乙烯酯；38——2-甲基戊烷；39——正丁醛；40——2-丁酮；41——3-甲基戊烷；42——1-己烯；43——顺式-1,2-二氯乙烯；44——一溴一氯甲烷（内标）；45——乙酸乙酯；46——

正己烷；47——三氯甲烷；48——四氢呋喃；49——丁烯醛；50——1,2-二氯乙烷；51——甲基环戊烷；52——2,4-二甲基戊烷；53——1,1,1-三氯乙烷；54——苯；55——四氯化碳；56——环己烷；57——1,4-二氟苯（内标）；58——2-甲基己烷；59——2,3-二甲基戊烷；60——戊醛；61——3-甲基己烷；62——1,2-二氯丙烷；63——一溴二氯甲烷；64——1,4-二氧六环；65——三氯乙烯；66——2,2,4-三甲基戊烷；67——甲基丙烯酸甲酯；68——正庚烷；69——反式-1,3-二氯-1-丙烯；70——4-甲基-2-戊酮；71——甲基环己烷；72——顺式-1,3-二氯-1-丙烯；73——1,1,2-三氯乙烷；74——2,3,4-三甲基戊烷；75——甲苯；76——2-甲基庚烷；77——2-己酮；78——3-甲基庚烷；79——二溴一氯甲烷；80——己醛；81——1,2-二溴乙烷；82——正辛烷；83——四氯乙烯；84——氯苯-*d*₅（内标）；85——氯苯；86——乙苯；87,88——间/对-二甲苯；89——三溴甲烷；90——苯乙烯；91——四氯乙烷；92——邻二甲苯；93——正壬烷；94——4-溴氟苯（BFB）；95——异丙苯；96——苯甲醛；97——正丙苯；98——间乙基甲苯；99——对乙基甲苯；100——1,3,5-三甲苯；101——邻乙基甲苯；102——1,2,4-三甲苯；103——癸烷；104——氯代甲苯；105——对二氯苯；106——间二氯苯；107——1,2,3-三甲苯；108——邻二氯苯；109——间二乙基苯；110——对二乙基苯；111——间甲基苯甲醛；112——十一烷；113——1,2,4-三氯苯；114——萘；115——十二烷；116——1,1,2,3,4,4-六氯-1,3-丁二烯。

图 C. 4 MS 测定的目标化合物和内标化合物总离子色谱图

附 录 D
(资料性附录)

目标化合物和内标化合物的定量离子和定性离子

MS 检测的目标化合物和内标化合物的中英文名称、定量离子和定性离子见表 D.1。

表 D.1 目标化合物和内标化合物的定量离子和定性离子

出峰 顺序	化合物 中文名称	化合物 英文名称	CAS No.	类型	定量离子 (<i>m/z</i>)	定性离子 (<i>m/z</i>)	对应内标
1	甲醛	Formaldehyde	50-00-0	目标化合物	29	30	一溴一氯甲烷
2	丙烯	Propylene	115-07-1	目标化合物	41	39,42	一溴一氯甲烷
3	丙烷	Propane	74-98-6	目标化合物	29	27,28	一溴一氯甲烷
4	二氟二氯甲烷	Dichlorodifluoromethane	75-71-8	目标化合物	85	87,101	一溴一氯甲烷
5	一氯甲烷	Chloromethane	74-87-3	目标化合物	50	52	一溴一氯甲烷
6	异丁烷	Isobutane	75-28-5	目标化合物	43	41	一溴一氯甲烷
7	乙醛	Acetaldehyde	75-07-0	目标化合物	29	44	一溴一氯甲烷
8	1,1,2,2-四氟 -1,2-二氯乙烷	1,2-Dichloro-1,1,2,2-tetrafluoroethane	76-14-2	目标化合物	85	135,137,87	一溴一氯甲烷
9	氯乙烯	Vinyl chloride	75-01-4	目标化合物	62	64	一溴一氯甲烷
10	正丁烯	1-Butene	106-98-9	目标化合物	41	39,56	一溴一氯甲烷
11	丁二烯	1,3-Butadiene	106-99-0	目标化合物	39	53,54	一溴一氯甲烷
12	正丁烷	<i>n</i> -Butane	106-97-8	目标化合物	43	29,41	一溴一氯甲烷
13	反式-2-丁烯	<i>trans</i> -2-Butene	624-64-6	目标化合物	41	39,56	一溴一氯甲烷
14	一溴甲烷	Bromomethane	74-83-9	目标化合物	94	96	一溴一氯甲烷
15	顺式-2-丁烯	<i>cis</i> -2-Butene	590-18-1	目标化合物	41	56,39	一溴一氯甲烷
16	氯乙烷	Chlorethane	75-00-3	目标化合物	64	66,29	一溴一氯甲烷
17	丙烯醛	Acrolein	107-02-8	目标化合物	56	55,29	一溴一氯甲烷
18	丙酮	Acetone	67-64-1	目标化合物	43	58	一溴一氯甲烷
19	异戊烷	Isopentane	78-78-4	目标化合物	42	41	一溴一氯甲烷
20	丙醛	Propanal	123-38-6	目标化合物	29	27	一溴一氯甲烷
21	一氟三氯甲烷	Trichlorofluoroethane	75-69-4	目标化合物	101	103	一溴一氯甲烷
22	异丙醇	Isopropyl Alcohol	67-63-0	目标化合物	45	43	一溴一氯甲烷
23	1-戊烯	1-Pentene	109-67-1	目标化合物	42	55,70	一溴一氯甲烷
24	正戊烷	<i>n</i> -pentane	109-66-0	目标化合物	43	42,41	一溴一氯甲烷
25	2-甲基-1,3-丁二烯	Isoprene	78-79-5	目标化合物	67	53,68	一溴一氯甲烷
26	反式-2-戊烯	<i>trans</i> -2-Pentene	646-04-8	目标化合物	55	70,39	一溴一氯甲烷
27	1,1-二氯乙烯	1,1-Dichloroethene	75-35-4	目标化合物	61	96,98	一溴一氯甲烷
28	顺式-2-戊烯	<i>cis</i> -2-Pentene	627-20-3	目标化合物	55	70,39	一溴一氯甲烷
29	二氯甲烷	Methylene chloride	75-09-2	目标化合物	49	86,84	一溴一氯甲烷
30	二硫化碳	Carbon disulfide	75-15-0	目标化合物	76	44	一溴一氯甲烷
31	1,2,2-三氟 -1,1,2-三氯乙烷	1,1,2-Trichloro-1,2,2-trifluoroethane	76-13-1	目标化合物	101	151,85	一溴一氯甲烷

出峰 顺序	化合物 中文名称	化合物 英文名称	CAS No.	类型	定量离子 (<i>m/z</i>)	定性离子 (<i>m/z</i>)	对应内标
32	2,2-二甲基丁烷	2,2-Dimethylbutane	75-83-2	目标化合物	57	71,43	一溴一氯甲烷
33	甲基丙烯醛	Methylacrolein	78-85-3	目标化合物	41	39,70	一溴一氯甲烷
34	反式-1,2-二氯 乙烯	<i>trans</i> -1,2-Dichloro ethylene	156-60-5	目标化合物	96	98,61	一溴一氯甲烷
35	1,1-二氯乙烷	1,1-Dichloroethane	75-34-3	目标化合物	63	65,83	一溴一氯甲烷
36	甲基叔丁基醚	2-Methoxy-2-methylpropane	1634-04-4	目标化合物	73	41	一溴一氯甲烷
37	环戊烷	Cyclopentane	287-92-3	目标化合物	42	55,70	一溴一氯甲烷
38	2,3-二甲基丁烷	2,3-Dimethylbutane	79-29-8	目标化合物	42	71	一溴一氯甲烷
39	乙酸乙烯酯	Vinyl acetate	108-05-4	目标化合物	43	86	一溴一氯甲烷
40	2-甲基戊烷	2-Methylpentane	107-83-5	目标化合物	71	42	一溴一氯甲烷
41	正丁醛	<i>n</i> -Butanal	123-72-8	目标化合物	44	72	一溴一氯甲烷
42	2-丁酮	2-Butanone	78-93-3	目标化合物	43	72	一溴一氯甲烷
43	3-甲基戊烷	3-Methylpentane	96-14-0	目标化合物	57	56,41	一溴一氯甲烷
44	1-己烯	1-Hexene	592-41-6	目标化合物	41	56	一溴一氯甲烷
45	顺式-1,2-二氯 乙烯	<i>cis</i> -1,2-Dichloro ethylene	156-59-2	目标化合物	96	98,61	一溴一氯甲烷
	一溴一氯甲烷	Bromochloromethane	74-97-5	内标化合物	49	130,128	——
46	乙酸乙酯	Ethyl acetate	141-78-6	目标化合物	43	61	一溴一氯甲烷
47	正己烷	<i>n</i> -Hexane	110-54-3	目标化合物	57	41,86	一溴一氯甲烷
48	三氯甲烷	Trichloromethane	67-66-3	目标化合物	83	85,47	一溴一氯甲烷
49	四氢呋喃	Tetrahydrofuran	109-99-9	目标化合物	42	72	一溴一氯甲烷
50	丁烯醛	2-Butenal	123-73-9	目标化合物	41	39,70	一溴一氯甲烷
51	1,2-二氯乙烷	1,2-Dichloroethane	107-06-2	目标化合物	62	64	1,4-二氟苯
52	甲基环戊烷	Methylcyclopentane	96-37-7	目标化合物	56	41,69	1,4-二氟苯
53	2,4-二甲基戊烷	2,4-Dimethylpentane	108-08-7	目标化合物	43	57,85	1,4-二氟苯
54	1,1,1-三氯乙烷	1,1,1-Trichloroethane	71-55-6	目标化合物	97	61,99	1,4-二氟苯
55	苯	Benzene	71-43-2	目标化合物	78	77	1,4-二氟苯
56	四氯化碳	Carbon tetrachloride	56-23-5	目标化合物	117	119,121	1,4-二氟苯
57	环己烷	Cyclohexane	110-82-7	目标化合物	56	41,84	1,4-二氟苯
	1,4-二氟苯	1,4-Difluorobenzene	540-36-3	内标化合物	114	88,63	——
58	2-甲基己烷	2-Methylhexane	591-76-4	目标化合物	43	57,85	1,4-二氟苯
59	2,3-二甲基戊烷	2,3-Dimethylpentane	565-59-3	目标化合物	56	41,71	1,4-二氟苯
60	戊醛	<i>n</i> -Pentanal	110-62-3	目标化合物	44	29	1,4-二氟苯
61	3-甲基己烷	3-Methylhexane	589-34-4	目标化合物	57	71	1,4-二氟苯
62	1,2-二氯丙烷	1,2-Dichloropropane	78-87-5	目标化合物	63	76,41	1,4-二氟苯
63	一溴二氯甲烷	Bromodichloromethane	75-27-4	目标化合物	83	129,85	1,4-二氟苯
64	1,4-二氧六环	1,4-Dioxane	123-91-1	目标化合物	88	58	1,4-二氟苯
65	三氯乙烯	Trichloroethene	79-01-6	目标化合物	130	132,95	1,4-二氟苯
66	2,2,4-三甲基戊 烷	2,2,4-Trimethylpentane	540-84-1	目标化合物	57	56,41	1,4-二氟苯
67	甲基丙烯酸甲 酯	Methyl methacrylate	80-62-6	目标化合物	69	39	1,4-二氟苯

出峰 顺序	化合物 中文名称	化合物 英文名称	CAS No.	类型	定量离子 (<i>m/z</i>)	定性离子 (<i>m/z</i>)	对应内标
68	正庚烷	<i>n</i> -Heptane	142-82-5	目标化合物	43	71,57	1,4-二氟苯
69	反式-1,3-二氯 -1-丙烯	<i>trans</i> -1,3-Dichloropropene	10061-02-6	目标化合物	75	110,39	1,4-二氟苯
70	4-甲基-2-戊酮	Methyl Isobutyl Ketone	108-10-1	目标化合物	43	58	1,4-二氟苯
71	甲基环己烷	Methylcyclopentane	108-87-2	目标化合物	83	98,55	氯苯- <i>d</i> ₅
72	顺式-1,3-二氯 -1-丙烯	<i>cis</i> -1,3-Dichloropropene	10061-01-5	目标化合物	75	110,39	氯苯- <i>d</i> ₅
73	1,1,2-三氯乙烷	1,1,2-Trichloroethane	79-00-5	目标化合物	97	83,61	氯苯- <i>d</i> ₅
74	2,3,4-三甲基戊 烷	2,3,4-Trimethylpentane	565-75-3	目标化合物	43	71	氯苯- <i>d</i> ₅
75	甲苯	Toluene	108-88-3	目标化合物	91	92	氯苯- <i>d</i> ₅
76	2-甲基庚烷	2-Methylheptane	592-27-8	目标化合物	57	43,70	氯苯- <i>d</i> ₅
77	2-己酮	2-Hexanone	591-78-6	目标化合物	43	58,100	氯苯- <i>d</i> ₅
78	3-甲基庚烷	3-Methylheptane	589-81-1	目标化合物	85	57	氯苯- <i>d</i> ₅
79	二溴一氯甲烷	Dibromochloromethane	124-48-1	目标化合物	129	127	氯苯- <i>d</i> ₅
80	己醛	Hexaldehyde	66-25-1	目标化合物	56	44	氯苯- <i>d</i> ₅
81	1,2-二溴乙烷	1,2-Dibromoethane	106-93-4	目标化合物	107	109	氯苯- <i>d</i> ₅
82	正辛烷	<i>n</i> -Octane	111-65-9	目标化合物	43	85,57	氯苯- <i>d</i> ₅
83	四氯乙烯	Tetrachloroethene	127-18-4	目标化合物	166	129	氯苯- <i>d</i> ₅
	氯苯- <i>d</i> ₅	Chlorobenzene- <i>d</i> ₅	3114-55-4	内标化合物	117	119,82	——
84	氯苯	Chlorobenzene	108-90-7	目标化合物	112	77,114	氯苯- <i>d</i> ₅
85	乙苯	Ethylbenzene	100-41-4	目标化合物	91	106	氯苯- <i>d</i> ₅
86	间二甲苯	1,3-Dimethylbenzene	108-38-3	目标化合物	91	106	氯苯- <i>d</i> ₅
87	对二甲苯	1,4-Dimethylbenzene	106-42-3	目标化合物	91	106	氯苯- <i>d</i> ₅
88	三溴甲烷	Bromoform	75-25-2	目标化合物	173	171,175	氯苯- <i>d</i> ₅
89	苯乙烯	Styrene	100-42-5	目标化合物	104	51,78	氯苯- <i>d</i> ₅
90	四氯乙烷	1,1,2,2-Tetrachloroethane	79-34-5	目标化合物	83	85	氯苯- <i>d</i> ₅
91	邻二甲苯	1,2-Dimethylbenzene	95-47-6	目标化合物	91	106	氯苯- <i>d</i> ₅
92	正壬烷	<i>n</i> -Nonane	111-84-2	目标化合物	43	57,85	氯苯- <i>d</i> ₅
93	异丙苯	Isopropylbenzene	98-82-8	目标化合物	105	120	氯苯- <i>d</i> ₅
94	苯甲醛	Benzaldehyde	100-52-7	目标化合物	77	106	氯苯- <i>d</i> ₅
95	正丙苯	Propylbenzene	103-65-1	目标化合物	91	120	氯苯- <i>d</i> ₅
96	间乙基甲苯	1-Ethyl-3-methyl benzene	620-14-4	目标化合物	105	120	氯苯- <i>d</i> ₅
97	对乙基甲苯	1-Ethyl-4-methyl benzene	622-96-8	目标化合物	105	120	氯苯- <i>d</i> ₅
98	1,3,5-三甲苯	1,3,5-Trimethyl benzene	108-67-8	目标化合物	105	120	氯苯- <i>d</i> ₅
99	邻乙基甲苯	1-Ethyl-2-methyl benzene	611-14-3	目标化合物	105	120	氯苯- <i>d</i> ₅
100	1,2,4-三甲苯	1,2,4-Trimethyl benzene	95-63-6	目标化合物	105	120	氯苯- <i>d</i> ₅
101	癸烷	<i>n</i> -Decane	124-18-5	目标化合物	43	57,71	氯苯- <i>d</i> ₅
102	氯代甲苯	Benzyl chloride	100-44-7	目标化合物	91	126	氯苯- <i>d</i> ₅
103	对二氯苯	1,4-Dichlorobenzene	106-46-7	目标化合物	146	111,148	氯苯- <i>d</i> ₅
104	间二氯苯	1,3-Dichlorobenzene	541-73-1	目标化合物	146	111,148	氯苯- <i>d</i> ₅

出峰 顺序	化合物 中文名称	化合物 英文名称	CAS No.	类型	定量离子 (<i>m/z</i>)	定性离子 (<i>m/z</i>)	对应内标
105	1,2,3-三甲苯	1,2,3-Trimethyl benzene	526-73-8	目标化合物	105	120	氯苯- <i>d</i> ₅
106	邻二氯苯	1,2-Dichlorobenzene	95-50-1	目标化合物	146	111,148	氯苯- <i>d</i> ₅
107	间二乙基苯	1,3-Diethylbenzene	141-93-5	目标化合物	119	105,134	氯苯- <i>d</i> ₅
108	对二乙基苯	1,4-Diethyl benzene	105-05-5	目标化合物	119	105,134	氯苯- <i>d</i> ₅
109	间甲基苯甲醛	3-methyl-Benzaldehyde	620-23-5	目标化合物	91	120	氯苯- <i>d</i> ₅
110	十一烷	<i>n</i> -Undecane	1120-21-4	目标化合物	57	71,43	氯苯- <i>d</i> ₅
111	1,2,4-三氯苯	1,2,4-Trichlorobenzene	120-82-1	目标化合物	180	145,182	氯苯- <i>d</i> ₅
112	萘	Naphthalene	91-20-3	目标化合物	128	102,127	氯苯- <i>d</i> ₅
113	十二烷	<i>n</i> -Dodecane	112-40-3	目标化合物	57	43,71	氯苯- <i>d</i> ₅
114	1,1,2,3,4,4-六氯 -1,3-丁二烯	Hexachloro-1,3-butadiene	87-68-3	目标化合物	225	190,118	氯苯- <i>d</i> ₅

附 录 E
(资料性附录)
方法准确度

精密度数据汇总见表 E.1～表 E.4；正确度数据汇总见表 E.5～表 E.8。

表 E.1 FID/MS (SCAN) 模式方法精密度 (空白样品加标)

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	测定均值 (nmol/mol)	实验室内相 对标准偏差 (%)	实验室间 相对标准 偏差 (%)	重复性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
1	乙烯	0.50	0.50	1.3~8.4	5.2	0.084	0.12
		2.50	2.52	0.47~9.1	2.5	0.30	0.36
		9.00	8.85	0.51~7.9	4.7	0.97	1.7
2	乙烷	0.50	0.50	1.1~10	11	0.083	0.22
		2.50	2.52	0.44~4.4	4.8	0.21	0.49
		9.00	8.89	0.21~2.5	2.1	0.49	0.85
3	乙炔	0.50	0.52	1.0~6.6	7.1	0.063	0.13
		2.50	2.49	0.74~4.7	5.2	0.18	0.47
		9.00	8.95	0.35~6.3	3.2	0.79	1.2
4	甲醛	2.50	2.52	1.0~12	8.3	0.76	1.1
		12.5	12.4	1.4~10	7.3	2.6	4.2
		45.0	44.3	1.3~12	7.0	11	16
5	丙烯	0.50	0.49	1.1~13	6.9	0.12	0.21
		2.50	2.53	0.60~8.6	3.4	0.55	0.67
		9.00	9.00	0.34~3.7	2.6	0.97	1.5
6	丙烷	0.50	0.47	2.0~19	5.5	0.24	0.26
		2.50	2.51	0.40~11	3.3	0.69	0.78
		9.00	8.82	0.48~8.7	2.6	1.7	2.0
7	二氟二氯甲烷	0.50	0.49	1.4~6.4	11	0.25	0.87
		2.50	2.46	0.70~9.4	8.9	1.7	3.6
		9.00	8.98	0.53~7.2	7.6	5.4	11
8	一氯甲烷	0.50	0.48	1.1~12	8.5	0.15	0.29
		2.50	2.58	0.73~6.6	5.8	0.68	1.1
		9.00	9.35	0.72~9.2	8.7	3.2	5.9
9	异丁烷	0.50	0.53	1.2~7.4	11	0.16	0.46
		2.50	2.49	0.56~6.9	3.2	0.69	0.85
		9.00	8.89	0.71~8.9	8.1	3.1	6.0
10	乙醛	0.50	0.51	0.98~19	7.6	0.21	0.29
		2.50	2.42	0.87~9.6	8.3	0.72	1.3
		9.00	8.47	0.71~8.6	15	2.2	7.5
11	1,1,2,2-四氟-1,2-二 氯乙烷	0.50	0.48	0.87~6.1	7.1	0.35	0.79
		2.50	2.47	0.90~7.7	4.9	2.3	3.3
		9.00	9.00	0.73~9.9	5.6	10	14

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	测定均值 (nmol/mol)	实验室内相 对标准偏差 (%)	实验室间 相对标准 偏差 (%)	重复性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
12	氯乙烯	0.50	0.50	1.6~13	10	0.23	0.45
		2.50	2.53	0.59~9.2	2.8	0.84	0.95
		9.00	9.09	0.70~7.4	6.8	3.1	5.6
13	正丁烯	0.50	0.49	1.7~17	6.1	0.27	0.32
		2.50	2.51	0.95~6.2	5.2	0.78	1.2
		9.00	9.14	0.64~8.5	8.8	2.8	6.2
14	丁二烯	0.50	0.48	2.4~17	6.9	0.25	0.32
		2.50	2.52	1.2~8.6	4.8	0.84	1.1
		9.00	9.09	1.0~6.7	7.0	2.7	5.0
15	正丁烷	0.50	0.51	1.3~8.1	6.7	0.18	0.30
		2.50	2.51	0.81~8.2	3.3	0.77	0.92
		9.00	9.09	0.66~4.6	7.2	2.1	5.1
16	反式-2-丁烯	0.50	0.50	2.0~13	11	0.25	0.45
		2.50	2.53	0.63~8.9	4.0	0.88	1.1
		9.00	9.21	0.88~7.5	7.7	2.8	5.6
17	一溴甲烷	0.50	0.48	0.89~6.2	6.5	0.21	0.42
		2.50	2.48	0.59~7.0	7.3	1.1	2.3
		9.00	9.04	0.70~7.8	6.4	4.8	8.2
18	顺式-2-丁烯	0.50	0.50	1.7~7.5	8.2	0.15	0.32
		2.50	2.53	1.1~6.3	5.1	0.72	1.1
		9.00	9.16	0.81~7.1	7.6	2.5	5.4
19	氯乙烷	0.50	0.50	1.5~9.6	7.2	0.17	0.33
		2.50	2.50	0.76~7.3	5.6	0.74	1.3
		9.00	9.13	0.56~5.5	6.7	2.6	5.5
20	丙烯醛	0.50	0.49	2.4~10	14	0.20	0.52
		2.50	2.54	1.2~5.9	5.5	0.59	1.1
		9.00	9.22	0.78~6.4	8.5	1.9	5.7
21	丙酮	0.50	0.53	1.5~9.1	11	0.16	0.45
		2.50	2.48	0.93~9.4	6.9	0.79	1.4
		9.00	8.71	0.82~5.4	11	2.1	7.2
22	异戊烷	0.50	0.51	2.3~12	10	0.31	0.55
		2.50	2.45	1.0~6.6	4.5	0.99	1.3
		9.00	8.98	0.62~10	7.0	3.7	6.6
23	丙醛	0.50	0.46	1.6~19	9.6	0.29	0.41
		2.50	2.50	1.6~8.2	6.4	1.0	1.5
		9.00	8.82	1.2~10	9.2	3.3	6.6
24	一氟三氯甲烷	0.50	0.49	1.1~6.4	8.6	0.28	0.76
		2.50	2.48	0.56~6.5	4.8	1.3	2.5
		9.00	8.99	0.73~6.7	6.0	4.9	10
25	异丙醇	0.50	0.49	1.3~9.4	12	0.22	0.48

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	测定均值 (nmol/mol)	实验室内相 对标准偏差 (%)	实验室间 相对标准 偏差 (%)	重复性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
		2.50	2.49	0.45~9.2	6.4	0.90	1.5
		9.00	8.80	1.2~18	12	4.2	8.9
26	1-戊烯	0.50	0.51	0.84~11	6.9	0.26	0.39
		2.50	2.49	0.78~9.0	6.0	0.91	1.6
		9.00	9.11	0.57~8.0	8.0	3.1	7.0
27	正戊烷	0.50	0.49	0.84~7.5	8.4	0.19	0.41
		2.50	2.54	0.67~6.0	6.7	0.82	1.7
		9.00	9.25	0.81~8.8	7.8	3.2	7.1
28	2-甲基-1,3-丁二烯	0.50	0.47	1.3~14	6.4	0.27	0.36
		2.50	2.55	0.86~7.6	5.1	1.0	1.5
		9.00	9.43	1.3~6.4	7.3	3.0	6.5
29	反式-2-戊烯	0.50	0.48	0.91~6.1	6.2	0.15	0.30
		2.50	2.52	0.87~5.7	4.4	0.69	1.1
		9.00	9.31	0.80~5.6	6.9	2.4	6.0
30	1,1-二氯乙烯	0.50	0.49	1.6~5.0	7.3	0.18	0.47
		2.50	2.54	0.56~7.0	5.1	1.0	1.8
		9.00	9.24	0.81~5.5	6.9	3.4	8.3
31	顺式-2-戊烯	0.50	0.47	1.4~17	10	0.29	0.49
		2.50	2.48	0.64~5.6	4.0	0.70	1.1
		9.00	9.21	0.89~5.5	8.4	2.0	7.0
32	二氯甲烷	0.50	0.49	0.96~8.4	6.3	0.21	0.39
		2.50	2.47	0.73~5.5	7.3	0.73	2.0
		9.00	9.00	0.44~6.3	6.2	3.1	6.6
33	二硫化碳	0.50	0.48	1.3~6.2	6.0	0.15	0.31
		2.50	2.48	0.81~5.5	8.1	0.71	2.0
		9.00	9.42	0.70~6.1	7.6	2.9	7.3
34	1,2,2-三氟-1,1,2-三 氯乙烷	0.50	0.49	1.1~5.9	6.3	0.34	0.79
		2.50	2.47	0.56~6.1	8.5	1.7	5.1
		9.00	9.07	0.64~5.7	5.0	6.4	12
35	2,2-二甲基丁烷	0.50	0.48	0.84~7.9	6.2	0.23	0.39
		2.50	2.55	1.0~7.0	5.5	1.2	1.9
		9.00	9.33	0.65~5.3	8.4	2.9	8.8
36	甲基丙烯醛	0.50	0.47	2.2~20	11	0.37	0.57
		2.50	2.50	1.0~6.3	8.0	0.86	1.9
		9.00	9.07	0.51~9.2	11	2.8	9.2
37	反式-1,2-二氯乙烯	0.50	0.49	1.1~2.7	6.3	0.13	0.39
		2.50	2.51	0.60~5.5	4.0	1.0	1.6
		9.00	9.17	0.72~5.4	6.7	3.0	7.8
38	1,1-二氯乙烷	0.50	0.49	0.96~8.3	4.5	0.23	0.34
		2.50	2.51	0.71~6.0	8.4	1.1	2.7

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	测定均值 (nmol/mol)	实验室内相 对标准偏差 (%)	实验室间 相对标准 偏差 (%)	重复性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
		9.00	9.18	0.94~3.6	5.1	2.3	6.1
39	甲基叔丁基醚	0.50	0.49	0.91~6.2	11	0.19	0.61
		2.50	2.53	1.3~5.7	7.9	1.0	2.3
		9.00	9.29	1.2~6.2	11	3.5	12
40	环戊烷	0.50	0.48	2.5~6.8	4.6	0.19	0.26
		2.50	2.52	0.83~6.0	6.0	0.79	1.5
		9.00	9.35	1.2~4.5	7.5	2.1	6.4
41	2,3-二甲基丁烷	0.50	0.49	1.6~14	4.5	0.39	0.43
		2.50	2.60	0.73~6.2	6.2	1.1	2.0
		9.00	9.43	0.89~5.5	7.7	3.1	8.3
42	乙酸乙酯	0.50	0.47	2.0~9.1	10	0.26	0.57
		2.50	2.58	1.3~6.6	8.5	1.2	2.6
		9.00	9.36	0.69~7.4	9.4	2.9	9.9
43	2-甲基戊烷	0.50	0.49	0.87~11	5.5	0.36	0.44
		2.50	2.54	0.95~5.0	5.9	0.81	1.8
		9.00	9.28	1.2~8.4	7.8	3.6	8.4
44	正丁醛	0.50	0.51	1.9~24	7.8	0.58	0.68
		2.50	2.39	0.89~9.6	11	1.3	3.1
		9.00	9.14	0.40~11	13	4.4	13
45	2-丁酮	0.50	0.50	0.91~6.5	11	0.19	0.54
		2.50	2.51	0.81~6.9	11	0.94	2.6
		9.00	9.06	0.44~8.0	11	3.2	9.5
46	3-甲基戊烷	0.50	0.47	1.1~14	9.6	0.29	0.55
		2.50	2.51	0.72~5.8	3.5	0.93	1.3
		9.00	9.31	1.1~5.4	6.8	2.6	7.2
47	1-己烯	0.50	0.48	1.1~7.9	15	0.25	0.77
		2.50	2.54	0.75~6.9	4.7	1.1	1.6
		9.00	9.32	0.93~7.8	7.8	2.9	8.1
48	顺式-1,2-二氯乙烯	0.50	0.49	1.1~4.9	5.5	0.16	0.35
		2.50	2.52	0.48~5.7	5.2	0.99	1.8
		9.00	9.19	0.97~5.2	6.6	2.9	7.9
49	乙酸乙酯	0.50	0.50	1.7~7.3	10	0.26	0.61
		2.50	2.51	0.83~6.3	6.0	1.0	1.9
		9.00	9.24	0.53~5.1	9.7	2.3	10
50	正己烷	0.50	0.49	0.85~5.8	8.4	0.19	0.47
		2.50	2.54	0.62~6.1	5.9	0.85	1.8
		9.00	9.40	0.66~5.3	6.7	3.2	7.4
51	三氯甲烷	0.50	0.49	1.1~3.9	8.8	0.18	0.66
		2.50	2.45	0.71~6.1	7.8	1.2	3.0
		9.00	9.00	0.64~4.4	5.8	3.5	8.4

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	测定均值 (nmol/mol)	实验室内相 对标准偏差 (%)	实验室间 相对标准 偏差 (%)	重复性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
52	四氢呋喃	0.50	0.47	1.0~8.7	13	0.19	0.59
		2.50	2.48	0.81~6.6	6.9	0.86	1.7
		9.00	9.21	0.49~7.2	9.2	3.0	8.1
53	丁烯醛	0.50	0.47	2.5~15	11	0.26	0.52
		2.50	2.40	0.96~7.4	6.7	0.95	1.7
		9.00	9.02	1.3~11	11	3.4	9.0
54	1,2-二氯乙烷	0.50	0.49	0.68~7.2	11	0.20	0.70
		2.50	2.46	0.48~7.1	6.5	1.1	2.2
		9.00	9.00	0.61~4.7	6.7	3.1	7.9
55	甲基环戊烷	0.50	0.48	1.2~8.6	5.8	0.22	0.36
		2.50	2.56	0.48~7.7	4.7	1.0	1.5
		9.00	9.22	0.72~7.3	4.2	3.5	5.2
56	2,4-二甲基戊烷	0.50	0.49	0.84~13	5.7	0.33	0.46
		2.50	2.55	0.60~7.3	5.9	1.3	2.2
		9.00	9.09	0.71~7.5	5.0	4.6	7.1
57	1,1,1-三氯乙烷	0.50	0.48	0.98~11	12	0.28	1.0
		2.50	2.43	0.40~5.9	9.9	1.2	4.1
		9.00	9.05	0.66~4.6	5.5	3.8	9.0
58	苯	0.50	0.49	1.0~4.2	6.7	0.11	0.34
		2.50	2.52	0.32~6.8	4.8	0.80	1.4
		9.00	9.03	0.46~7.1	6.4	3.0	6.3
59	四氯化碳	0.50	0.48	1.0~13	11	0.36	1.1
		2.50	2.44	0.68~6.0	9.8	1.2	4.7
		9.00	9.15	0.66~4.7	5.9	4.7	11
60	环己烷	0.50	0.47	1.1~12	5.1	0.23	0.32
		2.50	2.48	0.39~6.9	6.5	0.92	1.8
		9.00	9.04	0.54~7.9	6.0	3.4	6.5
61	2-甲基己烷	0.50	0.50	1.3~7.1	6.6	0.24	0.47
		2.50	2.52	0.30~7.7	7.5	1.3	2.7
		9.00	9.07	0.51~5.7	5.2	3.2	6.6
62	2,3-二甲基戊烷	0.50	0.48	1.3~14	9.6	0.31	0.65
		2.50	2.55	0.40~9.1	6.7	1.4	2.5
		9.00	9.07	0.56~3.3	6.4	2.5	7.6
63	戊醛	0.50	0.48	1.0~12	13	0.33	0.72
		2.50	2.48	0.91~8.0	7.7	1.1	2.3
		9.00	9.18	0.71~5.5	13	3.0	13
64	3-甲基己烷	0.50	0.50	1.5~3.6	11	0.16	0.70
		2.50	2.54	0.63~9.6	6.7	1.5	2.5
		9.00	9.07	0.62~4.6	4.9	3.4	6.3
65	1,2-二氯丙烷	0.50	0.50	0.72~9.6	7.0	0.24	0.53

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	测定均值 (nmol/mol)	实验室内相 对标准偏差 (%)	实验室间 相对标准 偏差 (%)	重复性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
		2.50	2.49	0.68~6.3	5.6	1.2	2.2
		9.00	9.04	0.53~4.2	5.0	3.2	6.9
66	一溴二氯甲烷	0.50	0.48	1.1~8.7	8.3	0.40	0.90
		2.50	2.46	0.49~6.4	11	1.5	5.6
		9.00	9.27	0.96~4.6	6.8	5.0	14
67	1,4-二氧六环	0.50	0.49	1.4~10	12	0.31	0.73
		2.50	2.52	0.83~9.6	8.7	1.3	2.7
		9.00	9.17	0.68~12	9.2	4.6	10
68	三氯乙烯	0.50	0.49	0.76~5.2	8.6	0.23	0.72
		2.50	2.47	0.76~7.7	9.3	1.4	4.0
		9.00	8.94	0.60~6.4	6.5	4.9	10
69	2,2,4-三甲基戊烷	0.50	0.50	1.3~3.7	5.6	0.14	0.43
		2.50	2.52	0.80~7.0	7.9	1.4	3.1
		9.00	9.29	0.48~4.6	6.4	3.6	9.0
70	甲基丙烯酸甲酯	0.50	0.47	1.9~10	11	0.35	0.75
		2.50	2.53	0.64~8.5	8.3	1.5	2.9
		9.00	9.30	0.46~6.0	8.4	3.6	10
71	正庚烷	0.50	0.49	1.1~8.8	9.2	0.26	0.61
		2.50	2.55	0.76~6.7	7.8	1.1	2.7
		9.00	9.20	0.42~6.3	7.0	3.5	8.6
72	反式-1,3-二氯-1-丙烯	0.50	0.48	1.6~6.1	8.3	0.23	0.60
		2.50	2.58	0.85~6.0	7.0	1.2	2.8
		9.00	9.34	0.51~6.2	8.6	3.9	12
73	4-甲基-2-戊酮	0.50	0.50	0.79~6.8	9.4	0.22	0.62
		2.50	2.55	0.76~9.6	9.0	1.5	3.2
		9.00	9.18	0.38~7.3	7.0	4.5	9.0
74	甲基环己烷	0.50	0.49	1.1~5.6	7.8	0.23	0.51
		2.50	2.53	0.89~7.5	7.9	1.0	2.6
		9.00	9.08	0.65~7.1	6.1	4.1	7.7
75	顺式-1,3-二氯-1-丙烯	0.50	0.47	1.1~4.8	6.4	0.18	0.45
		2.50	2.51	0.89~6.1	7.2	1.2	2.7
		9.00	9.55	0.46~6.0	9.0	3.4	12
76	1,1,2-三氯乙烷	0.50	0.50	1.1~13	6.0	0.43	0.64
		2.50	2.47	0.72~6.8	8.9	1.6	3.9
		9.00	8.97	0.30~5.0	5.8	4.5	9.6
77	2,3,4-三甲基戊烷	0.50	0.48	1.2~6.3	7.7	0.26	0.58
		2.50	2.57	0.55~6.8	9.3	1.3	3.6
		9.00	9.16	0.56~7.8	7.0	4.6	10
78	甲苯	0.50	0.49	0.82~7.6	7.6	0.18	0.46
		2.50	2.50	0.59~7.1	10	1.0	3.1

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	测定均值 (nmol/mol)	实验室内相 对标准偏差 (%)	实验室间 相对标准 偏差 (%)	重复性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
		9.00	9.06	0.17~5.1	8.7	3.2	9.5
79	2-甲基庚烷	0.50	0.48	1.7~7.5	7.5	0.33	0.59
		2.50	2.54	0.65~5.7	9.1	1.3	3.5
		9.00	9.23	0.64~6.3	6.9	4.1	9.9
80	2-己酮	0.50	0.50	3.1~8.7	13	0.40	0.91
		2.50	2.55	0.71~7.2	9.4	1.2	3.2
		9.00	8.85	0.50~8.4	14	4.0	15
81	3-甲基庚烷	0.50	0.49	1.2~7.6	8.8	0.28	0.67
		2.50	2.52	0.55~7.2	9.9	1.4	3.9
		9.00	9.06	0.65~6.9	7.5	4.6	11
82	二溴一氯甲烷	0.50	0.47	1.1~5.2	8.9	0.35	1.1
		2.50	2.47	0.61~5.1	9.7	1.7	6.4
		9.00	9.28	0.36~5.7	5.8	6.5	15
83	己醛	0.50	0.48	1.6~19	16	0.47	1.1
		2.50	2.52	0.66~9.2	9.1	1.6	3.3
		9.00	9.17	0.87~5.9	14	3.7	17
84	1,2-二溴乙烷	0.50	0.48	0.82~4.2	7.1	0.22	0.82
		2.50	2.48	0.77~7.1	8.1	2.0	5.1
		9.00	9.10	0.35~6.0	6.7	6.0	15
85	正辛烷	0.50	0.48	1.1~8.5	11	0.26	0.79
		2.50	2.52	0.51~9.5	9.5	1.7	3.8
		9.00	9.05	0.51~4.8	7.7	3.5	11
86	四氯乙烯	0.50	0.49	1.0~5.7	5.3	0.28	0.60
		2.50	2.45	0.41~8.2	5.3	2.1	3.3
		9.00	8.85	0.49~7.2	5.9	7.2	13
87	氯苯	0.50	0.48	0.89~3.2	8.3	0.12	0.57
		2.50	2.46	0.60~7.7	8.5	1.3	3.2
		9.00	8.80	0.36~7.2	10	4.2	13
88	乙苯	0.50	0.47	1.0~5.7	9.1	0.19	0.60
		2.50	2.45	0.71~6.7	9.8	1.1	3.4
		9.00	8.91	0.41~5.9	11	3.6	13
89/90	间/对-二甲苯	1.00	0.98	0.43~3.1	6.1	0.25	0.83
		5.00	4.89	0.57~6.4	8.8	2.0	6.0
		18.0	18.0	0.60~4.7	9.4	6.6	24
91	三溴甲烷	0.50	0.46	1.0~3.7	9.1	0.33	1.4
		2.50	2.46	0.78~4.8	13	2.0	10
		9.00	9.54	1.3~5.3	7.8	10	25
92	苯乙烯	0.50	0.47	0.84~7.1	11	0.19	0.72
		2.50	2.42	0.97~7.3	12	1.1	4.0
		9.00	8.92	0.51~5.7	11	3.5	13

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	测定均值 (nmol/mol)	实验室内相 对标准偏差 (%)	实验室间 相对标准 偏差 (%)	重复性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
93	四氯乙烷	0.50	0.49	1.1~6.3	9.8	0.32	1.0
		2.50	2.40	0.71~6.7	12	1.5	6.4
		9.00	9.03	0.45~4.5	9.0	4.9	18
94	邻二甲苯	0.50	0.48	0.85~7.7	8.8	0.22	0.59
		2.50	2.47	0.71~6.3	13	1.1	4.4
		9.00	9.07	0.30~4.7	5.2	3.4	6.9
95	正壬烷	0.50	0.49	0.98~8.5	6.7	0.27	0.58
		2.50	2.48	0.84~6.2	10	1.4	4.4
		9.00	9.04	0.43~5.3	7.2	4.4	11
96	异丙苯	0.50	0.48	0.79~5.9	11	0.24	0.82
		2.50	2.45	0.82~6.5	11	1.4	4.3
		9.00	8.98	0.37~6.2	5.3	4.1	8.1
97	苯甲醛	0.50	0.51	1.2~7.8	18	0.37	1.3
		2.50	2.20	1.1~12	6.8	1.5	2.4
		9.00	9.05	0.75~13	11	5.2	14
98	正丙苯	0.50	0.47	0.79~6.7	12	0.21	0.89
		2.50	2.47	0.94~6.9	8.9	1.4	3.5
		9.00	9.10	0.55~6.8	5.7	4.7	8.9
99	间乙基甲苯	0.50	0.46	1.1~8.1	11	0.29	0.80
		2.50	2.49	1.1~7.9	8.8	1.5	3.6
		9.00	8.90	0.36~7.3	11	5.0	15
100	对乙基甲苯	0.50	0.49	1.1~12	8.6	0.43	0.74
		2.50	2.52	0.74~7.4	9.5	1.6	4.0
		9.00	9.12	0.44~4.1	5.3	4.0	8.0
101	1,3,5-三甲苯	0.50	0.49	0.79~6.0	6.7	0.22	0.53
		2.50	2.56	1.0~11	9.8	1.8	4.1
		9.00	9.37	0.35~4.8	5.3	4.6	8.6
102	邻乙基甲苯	0.50	0.48	1.2~5.7	12	0.23	0.89
		2.50	2.46	0.83~8.6	11	1.5	4.3
		9.00	9.10	0.59~5.2	6.0	3.9	8.9
103	1,2,4-三甲苯	0.50	0.48	0.79~3.9	8.5	0.19	0.64
		2.50	2.41	0.97~6.2	10	1.1	3.8
		9.00	9.25	0.49~5.0	7.2	4.3	11
104	癸烷	0.50	0.50	1.1~6.0	8.2	0.32	0.79
		2.50	2.52	0.89~5.6	12	1.3	5.4
		9.00	9.13	0.93~4.6	10	4.8	17
105	氯代甲苯	0.50	0.50	0.80~5.1	14	0.24	1.1
		2.50	2.34	1.3~3.5	15	0.92	5.8
		9.00	9.37	0.40~6.9	6.9	4.8	11
106	对二氯苯	0.50	0.49	1.1~9.2	5.1	0.35	0.55

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	测定均值 (nmol/mol)	实验室内相 对标准偏差 (%)	实验室间 相对标准 偏差 (%)	重复性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
		2.50	2.43	1.2~12	12	2.4	5.8
		9.00	9.05	0.52~8.4	12	6.4	22
107	间二氯苯	0.50	0.48	1.3~6.5	9.8	0.28	0.90
		2.50	2.49	0.92~11	16	2.2	7.4
		9.00	9.51	0.65~8.4	15	6.7	26
108	1,2,3-三甲苯	0.50	0.48	1.2~6.5	10	0.24	0.79
		2.50	2.42	0.82~6.3	11	1.3	4.1
		9.00	8.94	0.56~5.6	7.9	4.3	11
109	邻二氯苯	0.50	0.49	1.0~4.4	4.7	0.25	0.48
		2.50	2.44	1.2~9.1	11	1.7	5.4
		9.00	9.19	0.55~5.0	8.3	5.1	15
110	间二乙基苯	0.50	0.47	1.1~8.4	14	0.36	1.1
		2.50	2.43	0.70~6.8	13	1.6	5.4
		9.00	9.06	0.81~5.7	11	4.7	18
111	对二乙基苯	0.50	0.47	1.2~8.2	11	0.34	0.93
		2.50	2.45	1.5~7.2	12	1.5	5.0
		9.00	9.20	1.3~6.0	13	5.1	21
112	间甲基苯甲醛	0.50	0.47	1.4~13	16	0.48	1.2
		2.50	2.26	1.4~14	14	2.3	5.1
		9.00	8.95	0.86~14	15	7.3	20
113	十一烷	0.50	0.47	1.7~11	11	0.48	1.1
		2.50	2.46	0.99~5.6	14	1.4	7.0
		9.00	9.33	0.98~5.2	12	5.9	22
114	1,2,4-三氯苯	0.50	0.53	0.95~8.3	14	0.54	1.7
		2.50	2.18	1.0~4.6	10	1.5	5.2
		9.00	9.29	0.72~6.9	12	8.3	25
115	萘	0.50	0.48	1.1~7.3	13	0.34	1.1
		2.50	2.25	0.52~8.0	12	1.4	4.5
		9.00	9.48	0.44~8.7	17	5.8	26
116	十二烷	0.50	0.47	2.5~11	16	0.67	1.8
		2.50	2.43	0.92~6.0	14	1.7	7.3
		9.00	9.45	1.1~8.4	15	7.7	30
117	1,1,2,3,4,4-六氯 -1,3-丁二烯	0.50	0.49	1.2~7.1	5.9	0.63	1.1
		2.50	2.43	0.99~7.3	5.8	2.8	5.2
		9.00	8.94	0.36~6.8	6.0	11	20

表 E.2 FID/MS (SCAN) 模式方法精密度 (实际样品加标)

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	本底浓度 均值 (nmol/mol)	测定均值 (扣本底, nmol/mol)	实验室内相 对标准偏差 (%)	实验室间相 对标准偏差 (%)	重复性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
1	乙烯	2.00	1.04	1.91	0.91~8.0	13	0.38	0.89
		9.00	0.99	8.62	0.24~6.3	13	1.1	3.9
2	乙烷	2.00	1.70	1.85	0.78~15	16	0.50	1.2
		9.00	1.71	8.24	0.39~3.5	10	0.73	3.2
3	乙炔	2.00	1.57	1.84	0.34~9.5	16	0.45	1.0
		9.00	1.53	8.53	0.41~5.4	10	0.83	3.0
4	甲醛	10.0	3.52	9.61	4.1~15	14	4.4	6.5
		45.0	5.78	44.1	3.0~12	13	14	25
5	丙烯	2.00	0.37	1.89	0.47~10	6.9	0.42	0.77
		9.00	0.38	8.47	0.99~9.6	7.7	2.1	3.9
6	丙烷	2.00	1.36	1.72	0.61~13	13	0.75	1.4
		9.00	1.36	8.61	0.35~16	13	4.1	7.0
7	二氟二氯甲烷	2.00	0.40	1.87	1.2~8.3	9.1	1.3	2.9
		9.00	0.42	8.18	1.4~6.6	9.7	4.8	13
8	一氯甲烷	2.00	0.47	1.95	1.3~7.5	11	0.59	1.5
		9.00	0.55	8.50	1.5~6.4	12	2.2	6.5
9	异丁烷	2.00	0.55	1.80	0.80~7.6	12	0.72	1.7
		9.00	0.46	8.13	1.1~9.0	12	2.7	7.4
10	乙醛	2.00	1.25	1.71	0.84~13	16	1.0	1.7
		9.00	1.29	8.86	0.89~8.3	16	2.8	8.2
11	1,1,2,2-四氟-1,2-二氯乙烷	2.00	0.02	1.97	1.1~5.5	13	1.5	5.7
		9.00	0.02	8.75	1.2~11	11	10	24
12	氯乙烯	2.00	0.06	1.92	0.72~11	8.3	0.82	1.5
		9.00	0.06	8.84	1.4~9.3	7.6	4.2	6.5
13	正丁烯	2.00	0.06	1.82	0.89~6.5	14	0.50	1.8
		9.00	0.19	8.46	0.71~7.2	14	2.6	8.9
14	丁二烯	2.00	0.07	1.85	0.93~14	11	0.80	1.6
		9.00	0.13	8.38	1.3~14	6.6	3.3	4.8
15	正丁烷	2.00	0.52	1.78	0.87~6.3	9.0	0.46	1.2
		9.00	0.55	8.40	1.2~7.5	10	2.7	6.8
16	反式-2-丁烯	2.00	0.08	1.88	0.64~4.8	13	0.44	1.8
		9.00	0.08	8.66	0.45~7.9	14	2.9	8.9
17	一溴甲烷	2.00	0.01	1.90	0.95~5.4	8.4	0.77	2.0
		9.00	0.01	8.44	1.3~9.4	8.2	5.6	9.7
18	顺式-2-丁烯	2.00	ND	1.84	1.5~11	14	0.61	1.8
		9.00	0.09	8.30	0.67~8.1	17	2.8	10
19	氯乙烷	2.00	0.55	1.87	1.0~4.9	11	0.50	1.7

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	本底浓度 均值 (nmol/mol)	测定均值 (扣本底, nmol/mol)	实验室内相 对标准偏差 (%)	实验室间相 对标准偏差 (%)	重复性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
		9.00	0.57	8.38	1.1~15	9.8	4.9	8.0
20	丙烯醛	2.00	0.27	1.72	1.3~7.3	13	0.56	1.6
		9.00	0.29	8.43	0.53~8.2	13	2.8	7.8
21	丙酮	2.00	1.97	1.90	1.7~18	17	1.5	2.7
		9.00	1.92	8.43	1.5~6.7	17	3.5	11
22	异戊烷	2.00	0.40	1.74	1.0~14	13	1.1	2.3
		9.00	0.38	8.11	1.5~13	11	3.9	8.8
23	丙醛	2.00	1.23	1.82	1.3~16	11	1.4	1.9
		9.00	1.33	8.14	1.1~17	16	4.8	11
24	一氟三氯甲 烷	2.00	0.16	1.99	0.92~5.1	7.0	0.97	2.6
		9.00	0.17	8.47	1.2~4.0	2.6	3.9	5.2
25	异丙醇	2.00	0.46	1.88	0.88~12	17	1.3	2.7
		9.00	0.44	8.81	0.31~13	12	5.3	9.7
26	1-戊烯	2.00	0.09	1.83	1.2~9.0	15	0.88	2.5
		9.00	0.09	8.64	0.77~4.8	10	2.4	8.0
27	正戊烷	2.00	0.29	1.84	0.95~7.1	14	0.76	2.5
		9.00	0.29	8.80	0.64~4.5	12	2.3	9.9
28	2-甲基-1,3- 丁二烯	2.00	0.09	1.78	0.75~11	9.6	0.80	1.6
		9.00	0.14	8.80	1.0~5.7	12	3.2	9.7
29	反式-2-戊烯	2.00	0.05	1.84	0.46~11	12	0.88	2.1
		9.00	0.10	8.67	0.75~10	14	4.0	11
30	1,1-二氯乙 烯	2.00	0.03	1.89	0.79~10	7.4	1.1	2.0
		9.00	0.06	8.84	1.4~10	12	5.9	15
31	顺式-2-戊烯	2.00	0.05	1.80	1.1~11	12	0.83	2.0
		9.00	0.11	8.54	1.8~9.6	14	3.8	11
32	二氯甲烷	2.00	0.71	1.88	1.2~14	9.0	1.3	2.2
		9.00	0.72	9.01	1.2~14	14	5.9	15
33	二硫化碳	2.00	0.43	1.95	1.2~5.9	7.2	0.63	1.4
		9.00	0.45	8.94	1.0~12	10	5.4	10
34	1,2,2-三氟 -1,1,2-三氯乙 烷	2.00	0.05	1.95	1.0~5.2	4.6	1.3	2.4
		9.00	0.05	8.54	1.0~12	5.6	11	15
35	2,2-二甲基 丁烷	2.00	0.03	1.82	1.0~4.9	12	0.53	2.3
		9.00	0.09	8.68	0.96~7.1	14	4.0	13
36	甲基丙烯醛	2.00	0.07	1.77	1.3~6.5	16	0.54	2.6
		9.00	0.08	8.81	0.65~7.0	12	3.2	10
37	反式-1,2-二 氯乙烯	2.00	0.02	1.90	0.90~7.4	7.4	0.70	1.8
		9.00	0.03	8.83	0.83~12	8.9	6.4	11
38	1,1-二氯乙 烷	2.00	0.04	1.93	1.2~5.4	10	0.66	2.5
		9.00	0.04	8.79	1.2~11	6.8	5.4	8.9

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	本底浓度 均值 (nmol/mol)	测定均值 (扣本底, nmol/mol)	实验室内相 对标准偏差 (%)	实验室间相 对标准偏差 (%)	重复性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
39	甲基叔丁基 醚	2.00	0.07	1.84	1.2~7.1	9.8	0.65	2.1
		9.00	0.15	8.73	0.60~5.0	13	3.4	12
40	环戊烷	2.00	0.08	1.88	1.3~6.6	13	0.74	2.3
		9.00	0.08	8.73	1.0~10	9.9	4.3	8.5
41	2,3-二甲基 丁烷	2.00	0.12	1.89	1.5~19	13	1.8	3.1
		9.00	0.10	8.55	1.0~5.7	4.4	3.1	5.0
42	乙酸乙烯酯	2.00	0.07	1.85	1.2~5.9	17	0.89	3.5
		9.00	0.13	8.74	0.74~5.4	17	3.3	17
43	2-甲基戊烷	2.00	0.13	1.86	1.2~13	12	1.4	2.7
		9.00	0.12	8.79	0.80~10	14	5.8	14
44	正丁醛	2.00	0.43	1.76	3.0~10	12	1.3	2.5
		9.00	0.56	8.58	2.2~8.9	13	5.5	13
45	2-丁酮	2.00	0.38	1.89	0.50~9.9	11	0.83	2.1
		9.00	0.39	8.61	0.53~4.1	11	2.1	8.4
46	3-甲基戊烷	2.00	0.08	1.85	0.82~4.0	11	0.48	2.2
		9.00	0.13	8.70	0.61~4.8	11	2.7	11
47	1-己烯	2.00	0.01	1.88	0.89~9.8	10	0.76	2.1
		9.00	0.11	8.81	0.73~5.3	11	2.5	11
48	顺式-1,2-二 氯乙烯	2.00	0.08	1.85	0.78~3.6	9.7	0.46	2.2
		9.00	0.08	8.70	1.2~7.5	7.4	3.5	8.4
49	乙酸乙酯	2.00	0.67	1.77	1.0~5.7	10	0.69	2.0
		9.00	0.61	8.76	0.88~7.6	11	4.2	12
50	正己烷	2.00	0.12	1.87	1.2~7.3	7.5	0.71	1.6
		9.00	0.18	8.75	0.59~4.2	8.3	2.4	8.1
51	三氯甲烷	2.00	0.16	1.94	0.78~5.8	11	0.88	3.4
		9.00	0.17	8.71	0.79~4.2	6.7	3.0	9.1
52	四氢呋喃	2.00	0.06	1.88	0.81~19	13	1.4	2.5
		9.00	0.06	8.80	0.56~7.2	12	2.6	10
53	丁烯醛	2.00	0.08	1.76	0.42~8.7	12	0.75	1.9
		9.00	0.13	8.66	0.25~13	15	4.5	12
54	1,2-二氯乙 烷	2.00	0.53	1.97	0.66~12	11	1.3	3.0
		9.00	0.35	8.73	0.78~6.4	7.9	4.6	9.5
55	甲基环戊烷	2.00	0.09	1.95	0.60~18	14	2.0	3.4
		9.00	0.09	9.01	1.7~15	6.7	8.2	9.8
56	2,4-二甲基 戊烷	2.00	0.02	1.97	1.1~14	9.1	1.3	2.6
		9.00	0.06	8.75	0.61~18	6.7	7.1	9.9
57	1,1,1-三氯乙 烷	2.00	0.02	2.00	0.97~8.1	8.5	1.2	3.1
		9.00	0.02	8.79	0.91~5.3	4.3	4.6	7.6
58	苯	2.00	0.32	1.93	0.83~5.9	7.8	0.52	1.6
		9.00	0.35	8.71	0.78~5.4	8.5	2.3	7.5

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	本底浓度 均值 (nmol/mol)	测定均值 (扣本底, nmol/mol)	实验室内相 对标准偏差 (%)	实验室间相 对标准偏差 (%)	重复性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
59	四氯化碳	2.00	0.06	2.05	0.90~8.5	9.3	1.6	3.9
		9.00	0.08	8.93	0.50~4.8	6.4	5.0	12
60	环己烷	2.00	0.07	1.86	0.74~5.3	7.0	0.59	1.5
		9.00	0.11	8.57	0.92~7.2	5.5	2.7	5.6
61	2-甲基己烷	2.00	0.09	1.97	0.64~13	9.6	1.2	2.6
		9.00	0.08	8.90	0.74~7.1	7.2	4.1	8.8
62	2,3-二甲基 戊烷	2.00	0.01	2.01	1.0~12	11	1.3	3.1
		9.00	0.06	8.78	0.75~5.7	8.0	3.6	9.3
63	戊醛	2.00	0.16	1.94	0.64~11	13	1.1	3.0
		9.00	0.17	8.99	0.57~5.9	16	3.6	15
64	3-甲基己烷	2.00	0.08	1.96	0.65~12	11	1.2	3.0
		9.00	0.07	8.69	0.73~8.3	7.8	5.1	9.7
65	1,2-二氯丙 烷	2.00	0.16	1.93	0.90~8.2	9.3	0.94	2.7
		9.00	0.12	8.73	1.2~3.9	6.8	3.3	8.9
66	一溴二氯甲 烷	2.00	0.01	2.05	1.1~6.7	12	1.5	5.1
		9.00	0.01	9.19	0.93~5.2	6.3	5.8	13
67	1,4-二氧六 环	2.00	0.07	2.02	1.1~11	17	1.3	4.0
		9.00	0.11	8.95	0.37~9.5	13	5.7	14
68	三氯乙烯	2.00	0.02	2.02	1.1~10	9.9	1.2	3.4
		9.00	0.01	8.88	1.4~6.7	8.3	4.3	13
69	2,2,4-三甲基 戊烷	2.00	0.09	1.97	0.86~10	13	1.5	4.0
		9.00	0.09	8.92	0.63~4.3	5.7	3.6	8.1
70	甲基丙烯酸 甲酯	2.00	0.12	1.81	0.89~9.1	17	1.0	3.8
		9.00	0.05	9.08	0.88~13	11	6.7	14
71	正庚烷	2.00	0.04	1.99	0.75~14	7.5	1.6	2.4
		9.00	0.09	8.95	1.3~6.9	7.6	4.0	9.3
72	反式-1,3-二 氯-1-丙烯	2.00	0.03	1.94	0.71~9.0	13	1.0	3.6
		9.00	0.03	9.44	0.84~5.6	8.8	3.7	12
73	4-甲基-2-戊 酮	2.00	0.07	1.88	0.93~11	17	1.1	4.1
		9.00	0.11	8.67	0.70~8.7	13	5.5	14
74	甲基环己烷	2.00	0.04	1.96	1.0~6.4	11	0.85	2.7
		9.00	0.11	8.84	0.50~5.1	8.1	2.7	9.1
75	顺式-1,3-二 氯-1-丙烯	2.00	0.01	1.96	0.71~8.9	12	0.97	3.4
		9.00	0.01	9.57	1.1~4.6	10	3.8	15
76	1,1,2-三氯乙 烷	2.00	0.03	2.03	0.76~11	8.4	1.6	3.2
		9.00	0.03	8.77	1.2~10	8.0	6.8	13
77	2,3,4-三甲基 戊烷	2.00	0.07	1.92	0.86~12	14	1.4	3.9
		9.00	0.09	8.90	0.70~7.1	7.0	5.0	10
78	甲苯	2.00	0.73	1.94	0.51~4.7	15	0.56	3.3
		9.00	0.69	8.44	0.90~4.4	14	2.9	14

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	本底浓度 均值 (nmol/mol)	测定均值 (扣本底, nmol/mol)	实验室内相 对标准偏差 (%)	实验室间相 对标准偏差 (%)	重复性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
79	2-甲基庚烷	2.00	0.03	1.94	1.0~11	11	1.3	3.2
		9.00	0.03	9.00	1.3~9.9	10	5.6	14
80	2-己酮	2.00	0.09	1.90	0.32~9.0	17	0.93	4.1
		9.00	0.09	8.73	1.1~11	13	6.1	15
81	3-甲基庚烷	2.00	0.07	1.91	0.67~7.0	14	0.99	3.8
		9.00	0.07	8.65	0.98~5.0	8.7	3.8	11
82	二溴一氯甲烷	2.00	0.03	1.96	0.77~6.9	8.7	1.8	4.7
		9.00	0.03	8.97	1.0~5.2	8.7	7.5	22
83	己醛	2.00	0.12	1.84	0.74~9.8	17	1.2	4.1
		9.00	0.23	8.72	2.5~10	11	5.7	14
84	1,2-二溴乙烷	2.00	0.03	1.97	0.70~6.7	11	1.4	5.3
		9.00	0.04	8.86	0.48~5.4	8.2	6.2	18
85	正辛烷	2.00	0.08	1.89	0.73~5.6	13	0.83	3.6
		9.00	0.08	8.74	0.60~5.6	7.6	4.2	10
86	四氯乙烯	2.00	0.07	1.90	0.58~9.6	7.9	1.4	3.3
		9.00	0.06	8.67	1.0~8.6	8.4	5.7	16
87	氯苯	2.00	0.11	1.88	0.53~5.6	14	0.83	3.9
		9.00	0.11	8.47	1.6~7.2	10	4.1	13
88	乙苯	2.00	0.15	1.86	1.0~3.5	13	0.63	3.3
		9.00	0.23	8.59	1.1~5.9	11	3.8	13
89/90	间/对-二甲苯	4.00	0.26	4.03	0.65~5.4	12	1.6	6.5
		18.0	0.31	17.5	1.0~8.1	11	8.6	28
91	三溴甲烷	2.00	0.04	1.97	0.96~7.1	11	2.6	6.9
		9.00	0.05	9.52	1.8~7.9	12	12	36
92	苯乙烯	2.00	0.03	1.86	0.69~4.2	15	0.66	3.6
		9.00	0.10	8.71	1.3~6.7	9.9	4.1	12
93	四氯乙烷	2.00	0.02	2.06	0.99~6.9	15	1.8	6.6
		9.00	0.02	8.89	1.0~9.2	9.8	8.3	20
94	邻二甲苯	2.00	0.19	1.92	0.85~4.6	15	0.74	3.8
		9.00	0.16	8.65	1.6~6.9	8.7	4.1	11
95	正壬烷	2.00	0.03	1.99	1.0~4.9	13	1.0	4.0
		9.00	0.09	8.79	1.2~8.4	8.2	5.6	13
96	异丙苯	2.00	0.09	1.84	0.55~11	17	1.3	5.0
		9.00	0.09	8.58	1.1~7.3	9.1	5.1	13
97	苯甲醛	2.00	0.25	1.63	1.3~16	16	2.1	4.0
		9.00	0.27	8.91	0.71~14	17	8.7	22
98	正丙苯	2.00	0.10	1.88	0.96~14	19	1.6	5.5
		9.00	0.10	8.71	1.2~7.6	13	5.5	17
99	间乙基甲苯	2.00	0.10	1.94	0.79~14	16	1.9	4.9
		9.00	0.10	8.53	0.89~10	13	5.4	17

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	本底浓度 均值 (nmol/mol)	测定均值 (扣本底, nmol/mol)	实验室内相 对标准偏差 (%)	实验室间相 对标准偏差 (%)	重复性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
100	对乙基甲苯	2.00	0.05	2.01	0.75~7.1	15	1.3	4.8
		9.00	0.09	8.53	0.79~8.4	11	5.9	15
101	1,3,5-三甲苯	2.00	0.09	1.92	0.86~9.5	14	1.4	4.1
		9.00	0.09	8.44	0.81~8.4	14	5.6	19
102	邻乙基甲苯	2.00	0.11	1.94	0.85~10	14	1.6	4.4
		9.00	0.11	8.58	0.92~8.8	11	7.0	15
103	1,2,4-三甲苯	2.00	0.10	1.98	0.70~9.8	14	1.6	4.5
		9.00	0.10	8.65	0.96~7.8	12	5.8	16
104	癸烷	2.00	0.10	1.92	0.83~6.4	21	1.3	7.3
		9.00	0.10	9.00	0.95~7.5	8.3	7.6	15
105	氯代甲苯	2.00	0.13	1.75	0.66~11	18	1.4	5.2
		9.00	0.05	9.24	1.0~8.8	14	6.9	21
106	对二氯苯	2.00	0.08	2.01	1.0~9.4	13	1.7	5.0
		9.00	0.08	8.81	1.0~8.6	15	8.0	26
107	间二氯苯	2.00	0.08	1.91	0.91~9.0	18	1.7	6.5
		9.00	0.03	9.06	1.4~7.2	13	7.3	24
108	1,2,3-三甲苯	2.00	0.08	1.89	0.66~6.7	18	1.2	5.2
		9.00	0.12	8.69	0.63~6.5	11	5.7	16
109	邻二氯苯	2.00	0.09	1.99	0.91~7.9	12	1.8	4.6
		9.00	0.09	8.81	0.95~7.6	12	7.8	22
110	间二乙基苯	2.00	0.01	1.98	1.1~6.8	14	1.3	4.7
		9.00	0.06	8.99	1.1~8.5	11	7.1	18
111	对二乙基苯	2.00	0.08	1.96	1.4~12	19	2.0	6.5
		9.00	0.12	9.25	1.3~9.1	14	7.4	23
112	间甲基苯甲 醛	2.00	0.14	1.77	1.8~18	17	2.6	5.0
		9.00	0.20	9.28	1.0~13	16	8.9	24
113	十一烷	2.00	0.07	1.97	1.6~5.8	21	1.4	8.2
		9.00	0.11	9.33	1.4~8.0	10	8.2	20
114	1,2,4-三氯苯	2.00	0.13	1.75	0.93~14	15	2.8	6.5
		9.00	0.19	9.11	1.8~12	12	13	27
115	萘	2.00	0.14	1.80	0.72~18	13	3.0	4.6
		9.00	0.14	9.14	1.5~13	13	8.7	21
116	十二烷	2.00	0.07	1.93	1.3~8.4	23	1.9	9.7
		9.00	0.15	9.46	1.6~6.3	14	8.3	29
117	1,1,2,3,4,4- 六氯-1,3-丁 二烯	2.00	0.03	2.05	0.74~7.9	13	3.1	9.1
		9.00	0.02	8.75	1.1~8.4	13	14	38

表 E.3 FID/MS (SIM) 模式方法精密度 (空白样品加标)

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	测定均值 (nmol/mol)	实验室内相 对标准偏差 (%)	实验室内 相对标准 偏差 (%)	重复性 限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
1	乙烯	0.20	0.20	2.5~12	9.5	0.047	0.080
		1.00	1.03	1.4~6.9	5.7	0.12	0.23
		9.00	9.02	0.20~3.7	5.5	0.65	1.9
2	乙烷	0.20	0.20	2.6~11	13	0.045	0.11
		1.00	1.01	0.74~8.0	7.2	0.14	0.30
		9.00	8.93	0.16~3.5	1.7	0.62	0.79
3	乙炔	0.20	0.20	1.9~9.5	14	0.037	0.094
		1.00	1.02	1.2~7.8	6.0	0.15	0.24
		9.00	8.97	0.16~6.3	2.7	0.78	1.1
4	甲醛	1.00	0.97	2.1~15	14	0.31	0.60
		5.00	5.04	3.3~15	8.9	1.4	2.1
		45.0	46.9	3.6~13	8.7	15	20
5	丙烯	0.20	0.21	1.9~9.1	6.2	0.057	0.087
		1.00	1.05	1.3~9.2	5.9	0.24	0.39
		9.00	9.07	0.44~8.4	3.6	1.6	2.2
6	丙烷	0.20	0.20	2.4~13	10	0.071	0.13
		1.00	1.06	1.2~8.8	5.4	0.29	0.41
		9.00	9.16	0.53~9.1	5.8	1.9	3.4
7	二氟二氯甲烷	0.20	0.21	1.6~3.9	16	0.091	0.51
		1.00	1.02	0.73~9.7	8.1	0.58	1.4
		9.00	9.08	0.83~7.8	9.3	5.6	14
8	一氯甲烷	0.20	0.20	2.0~4.6	13	0.044	0.17
		1.00	1.05	0.68~11	9.1	0.29	0.66
		9.00	8.85	0.67~19	8.0	3.9	5.7
9	异丁烷	0.20	0.20	2.0~4.7	12	0.045	0.18
		1.00	1.02	0.75~15	12	0.38	0.92
		9.00	8.86	1.1~7.7	9.7	2.9	6.8
10	乙醛	0.20	0.21	1.6~7.6	10	0.058	0.13
		1.00	1.02	1.2~14	15	0.29	0.87
		9.00	8.81	0.66~6.5	14	1.9	6.8
11	1,1,2,2-四氟-1,2-二 氯乙烷	0.20	0.20	1.9~7.6	12	0.18	0.56
		1.00	1.04	0.38~11	9.0	0.91	2.2
		9.00	9.01	0.82~8.3	7.0	7.4	15
12	氯乙烯	0.20	0.20	2.0~6.2	9.5	0.059	0.16
		1.00	1.03	1.3~14	8.9	0.40	0.80
		9.00	9.15	0.51~8.5	9.0	3.0	7.0
13	正丁烯	0.20	0.20	2.4~6.5	11	0.053	0.16
		1.00	1.00	1.1~12	14	0.30	0.99

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	测定均值 (nmol/mol)	实验室内相 对标准偏差 (%)	实验室间 相对标准 偏差 (%)	重复性 限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
		9.00	9.03	0.51~4.9	9.9	2.0	6.5
14	丁二烯	0.20	0.20	2.4~9.5	12	0.067	0.18
		1.00	1.00	0.62~19	11	0.38	0.85
		9.00	9.22	0.53~4.3	7.7	1.7	5.1
15	正丁烷	0.20	0.20	2.0~5.9	12	0.048	0.17
		1.00	1.03	0.41~12	9.1	0.29	0.73
		9.00	8.99	0.51~7.5	10	2.5	7.0
16	反式-2-丁烯	0.20	0.20	2.2~9.0	6.5	0.063	0.11
		1.00	1.02	0.82~15	8.0	0.35	0.66
		9.00	9.18	0.38~8.2	9.3	2.4	6.4
17	一溴甲烷	0.20	0.20	2.0~8.7	14	0.092	0.33
		1.00	1.05	0.52~9.1	8.6	0.44	1.1
		9.00	9.15	0.96~9.6	8.2	4.6	9.9
18	顺式-2-丁烯	0.20	0.20	2.0~7.5	10	0.055	0.16
		1.00	1.01	1.1~9.9	7.8	0.26	0.60
		9.00	9.01	0.74~9.4	9.5	2.7	6.5
19	氯乙烷	0.20	0.20	1.9~5.0	14	0.053	0.22
		1.00	1.05	0.70~8.8	8.6	0.27	0.77
		9.00	9.05	0.55~9.5	7.4	2.9	6.0
20	丙烯醛	0.20	0.21	1.9~4.8	8.1	0.050	0.13
		1.00	1.00	0.63~6.9	11	0.23	0.80
		9.00	8.99	0.58~6.2	9.5	1.9	6.2
21	丙酮	0.20	0.21	2.6~6.8	10	0.078	0.17
		1.00	1.05	1.0~7.6	14	0.34	1.1
		9.00	8.39	0.53~9.4	11	2.6	7.3
22	异戊烷	0.20	0.21	2.0~8.0	7.6	0.098	0.17
		1.00	1.08	1.5~8.5	8.5	0.42	0.92
		9.00	8.87	0.59~8.4	9.6	3.5	8.3
23	丙醛	0.20	0.19	4.2~9.1	12	0.091	0.18
		1.00	1.05	1.4~9.6	11	0.40	0.95
		9.00	8.75	1.1~9.4	8.2	2.7	5.8
24	一氟三氯甲烷	0.20	0.21	1.9~4.4	13	0.10	0.49
		1.00	1.05	0.47~5.0	7.3	0.40	1.4
		9.00	9.06	0.61~8.6	8.9	6.5	15
25	异丙醇	0.20	0.22	1.6~11	10	0.068	0.18
		1.00	0.97	1.4~7.5	10	0.36	0.84
		9.00	8.55	0.81~15	16	3.9	11
26	1-戊烯	0.20	0.20	2.0~8.0	14	0.074	0.26
		1.00	1.01	1.3~10	7.3	0.42	0.75
		9.00	8.97	0.53~5.9	10	2.4	8.4

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	测定均值 (nmol/mol)	实验室内相 对标准偏差 (%)	实验室间 相对标准 偏差 (%)	重复性 限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
27	正戊烷	0.20	0.19	2.0~4.3	12	0.052	0.20
		1.00	1.01	0.55~6.8	4.3	0.31	0.48
		9.00	9.06	0.74~5.1	11	2.3	9.1
28	2-甲基-1,3-丁二烯	0.20	0.19	2.0~7.5	8.4	0.066	0.15
		1.00	0.98	0.90~7.4	5.2	0.32	0.52
		9.00	9.19	0.89~3.6	8.2	1.4	6.5
29	反式-2-戊烯	0.20	0.18	2.0~4.4	10	0.046	0.16
		1.00	1.02	0.82~6.9	5.1	0.28	0.53
		9.00	9.15	0.63~5.1	9.0	2.4	7.5
30	1,1-二氯乙烯	0.20	0.19	2.0~5.0	9.5	0.088	0.23
		1.00	1.03	0.68~6.9	4.8	0.38	0.69
		9.00	9.10	0.50~3.7	9.5	2.3	11
31	顺式-2-戊烯	0.20	0.19	2.0~5.2	10	0.061	0.17
		1.00	1.02	0.81~7.1	6.6	0.30	0.64
		9.00	9.03	0.55~4.1	8.5	1.9	7.0
32	二氯甲烷	0.20	0.21	1.8~9.4	11	0.082	0.25
		1.00	1.05	0.41~4.7	8.8	0.23	1.0
		9.00	8.90	0.54~2.9	5.8	1.5	5.7
33	二硫化碳	0.20	0.19	2.0~10	13	0.10	0.25
		1.00	1.00	0.41~5.8	3.8	0.27	0.44
		9.00	9.31	0.52~3.5	8.9	1.6	8.1
34	1,2,2-三氟-1,1,2-三 氯乙烷	0.20	0.21	1.8~5.2	12	0.17	0.60
		1.00	1.06	0.58~3.4	9.2	0.49	2.3
		9.00	9.02	0.51~3.8	6.8	4.5	15
35	2,2-二甲基丁烷	0.20	0.19	2.4~6.0	13	0.076	0.27
		1.00	1.01	1.1~6.7	4.1	0.34	0.54
		9.00	9.14	0.42~4.0	11	2.1	11
36	甲基丙烯醛	0.20	0.19	2.0~10	12	0.081	0.20
		1.00	0.96	1.5~6.6	7.8	0.32	0.72
		9.00	9.09	0.57~3.8	12	1.9	10
37	反式-1,2-二氯乙烯	0.20	0.20	2.0~5.7	6.5	0.085	0.18
		1.00	1.02	0.59~3.7	4.3	0.25	0.58
		9.00	9.08	0.55~3.0	8.3	1.7	9.2
38	1,1-二氯乙烷	0.20	0.20	1.9~4.4	11	0.076	0.28
		1.00	1.05	0.44~2.6	8.3	0.21	1.1
		9.00	9.04	0.59~3.7	6.2	2.2	7.2
39	甲基叔丁基醚	0.20	0.19	2.0~5.9	9.5	0.065	0.21
		1.00	1.01	0.55~4.9	5.8	0.34	0.72
		9.00	9.10	0.65~5.6	11	2.9	11
40	环戊烷	0.20	0.19	2.0~6.5	8.4	0.075	0.15

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	测定均值 (nmol/mol)	实验室内相 对标准偏差 (%)	实验室间 相对标准 偏差 (%)	重复性 限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
		1.00	1.06	0.75~6.1	8.9	0.26	0.86
		9.00	9.21	0.57~3.7	8.4	1.5	6.9
41	2,3-二甲基丁烷	0.20	0.19	1.9~9.5	12	0.12	0.26
		1.00	1.00	1.4~3.5	7.0	0.24	0.78
		9.00	9.16	0.90~5.1	8.5	2.7	8.8
42	乙酸乙烯酯	0.20	0.20	2.2~9.5	14	0.11	0.31
		1.00	1.03	0.63~4.3	9.2	0.37	1.1
		9.00	9.51	0.53~6.1	12	3.5	12
43	2-甲基戊烷	0.20	0.19	2.0~8.9	13	0.096	0.28
		1.00	1.03	1.1~3.6	5.3	0.26	0.64
		9.00	9.00	0.67~7.1	7.2	2.9	7.5
44	正丁醛	0.20	0.20	1.8~16	13	0.17	0.32
		1.00	0.97	0.89~9.0	8.2	0.39	0.93
		9.00	9.15	0.49~11	11	4.0	11
45	2-丁酮	0.20	0.20	1.9~8.2	8.0	0.092	0.17
		1.00	1.00	0.89~3.0	9.7	0.19	0.89
		9.00	9.01	0.51~4.7	11	2.1	9.2
46	3-甲基戊烷	0.20	0.19	2.3~5.8	11	0.078	0.23
		1.00	1.00	0.59~7.2	3.9	0.35	0.53
		9.00	9.16	0.51~4.0	9.8	2.1	9.9
47	1-己烯	0.20	0.18	2.0~7.5	16	0.093	0.31
		1.00	0.98	0.61~4.2	4.7	0.25	0.54
		9.00	9.10	0.51~5.0	10	2.4	10
48	顺式-1,2-二氯乙烯	0.20	0.19	2.0~6.0	8.4	0.089	0.21
		1.00	1.02	0.44~4.0	4.3	0.30	0.59
		9.00	9.10	0.54~3.0	7.8	1.7	8.7
49	乙酸乙酯	0.20	0.20	2.0~5.6	5.0	0.073	0.13
		1.00	1.02	0.63~3.1	9.7	0.22	1.1
		9.00	9.23	0.46~8.9	11	3.7	11
50	正己烷	0.20	0.19	2.0~7.1	6.3	0.074	0.15
		1.00	1.01	1.1~7.2	6.9	0.36	0.82
		9.00	9.11	0.50~3.6	8.9	1.9	8.9
51	三氯甲烷	0.20	0.21	2.4~8.0	13	0.13	0.41
		1.00	1.03	0.50~2.0	6.0	0.23	0.95
		9.00	9.01	0.50~4.2	5.8	3.0	8.2
52	四氢呋喃	0.20	0.19	2.5~7.5	11	0.084	0.21
		1.00	0.95	0.63~5.4	9.1	0.22	0.80
		9.00	8.92	0.50~3.6	12	1.6	9.8
53	丁烯醛	0.20	0.19	2.6~10	14	0.11	0.25
		1.00	0.95	1.1~7.1	7.6	0.33	0.70

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	测定均值 (nmol/mol)	实验室内相 对标准偏差 (%)	实验室间 相对标准 偏差 (%)	重复性 限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
		9.00	8.90	0.48~2.6	11	1.3	8.6
54	1,2-二氯乙烷	0.20	0.21	1.9~4.4	8.1	0.083	0.22
		1.00	1.04	0.37~7.8	6.9	0.42	0.96
		9.00	8.91	0.61~7.1	7.6	3.7	9.1
55	甲基环戊烷	0.20	0.20	2.0~6.7	10	0.091	0.23
		1.00	1.03	0.82~3.0	5.9	0.20	0.67
		9.00	8.68	0.69~4.1	6.1	2.0	5.9
56	2,4-二甲基戊烷	0.20	0.20	1.9~8.6	13	0.12	0.35
		1.00	1.04	0.89~1.9	4.9	0.18	0.66
		9.00	8.66	0.68~3.6	7.9	2.4	8.8
57	1,1,1-三氯乙烷	0.20	0.21	1.7~4.4	12	0.10	0.43
		1.00	1.06	0.47~6.4	9.4	0.47	1.8
		9.00	9.00	0.58~5.0	5.2	4.1	8.7
58	苯	0.20	0.20	2.0~6.0	6.0	0.074	0.14
		1.00	1.03	0.57~2.2	6.7	0.15	0.69
		9.00	8.88	0.70~3.3	5.1	1.7	4.6
59	四氯化碳	0.20	0.21	1.8~8.1	12	0.17	0.50
		1.00	1.06	0.35~6.2	8.7	0.55	1.8
		9.00	9.16	1.1~4.9	5.9	5.0	11
60	环己烷	0.20	0.21	2.0~9.6	8.6	0.11	0.22
		1.00	1.00	0.75~2.6	4.4	0.18	0.49
		9.00	8.85	0.58~3.6	4.9	1.8	4.8
61	2-甲基己烷	0.20	0.20	2.0~8.6	4.2	0.11	0.15
		1.00	1.03	0.52~3.2	8.4	0.22	1.1
		9.00	8.81	0.86~4.0	6.9	2.6	8.0
62	2,3-二甲基戊烷	0.20	0.20	1.9~6.5	3.6	0.097	0.13
		1.00	1.01	0.47~3.8	6.0	0.24	0.79
		9.00	8.79	0.94~4.7	6.7	3.2	8.0
63	戊醛	0.20	0.19	2.0~12	13	0.13	0.29
		1.00	0.97	1.9~13	7.5	0.54	0.93
		9.00	9.09	0.82~4.5	12	2.6	12
64	3-甲基己烷	0.20	0.20	1.9~6.5	6.0	0.096	0.18
		1.00	1.04	0.45~2.1	9.2	0.17	1.2
		9.00	8.77	1.0~4.0	5.5	2.8	6.5
65	1,2-二氯丙烷	0.20	0.21	1.6~6.0	9.5	0.099	0.30
		1.00	1.05	0.75~3.4	9.5	0.26	1.5
		9.00	8.85	0.78~3.4	4.2	2.9	5.8
66	一溴二氯甲烷	0.20	0.21	1.9~6.0	7.1	0.16	0.34
		1.00	1.04	0.45~6.5	7.4	0.61	1.7
		9.00	9.22	0.93~5.4	7.0	5.4	14

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	测定均值 (nmol/mol)	实验室内相 对标准偏差 (%)	实验室间 相对标准 偏差 (%)	重复性 限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
67	1,4-二氧六环	0.20	0.20	2.0~12	8.5	0.13	0.23
		1.00	0.98	1.2~6.6	7.7	0.36	0.89
		9.00	8.77	0.74~10	11	3.7	11
68	三氯乙烯	0.20	0.21	1.8~6.0	8.1	0.13	0.31
		1.00	1.03	0.68~1.9	9.4	0.23	1.6
		9.00	8.95	0.95~5.1	5.0	3.4	8.1
69	2,2,4-三甲基戊烷	0.20	0.20	2.0~10	5.5	0.12	0.19
		1.00	1.04	0.58~1.8	9.2	0.18	1.4
		9.00	8.87	0.97~4.4	5.1	3.4	7.1
70	甲基丙烯酸甲酯	0.20	0.19	2.0~4.4	11	0.085	0.27
		1.00	1.00	0.68~2.3	5.8	0.22	0.75
		9.00	9.23	0.88~2.9	9.4	2.3	11
71	正庚烷	0.20	0.19	1.8~6.0	12	0.081	0.28
		1.00	1.03	0.86~2.2	9.4	0.20	1.2
		9.00	8.87	1.0~3.7	7.0	2.8	8.1
72	反式-1,3-二氯-1-丙烯	0.20	0.19	2.0~6.0	14	0.096	0.38
		1.00	1.00	0.75~2.7	7.1	0.24	1.0
		9.00	9.45	0.59~3.6	10	2.5	14
73	4-甲基-2-戊酮	0.20	0.19	2.5~5.6	15	0.083	0.37
		1.00	1.00	0.51~2.8	8.3	0.25	1.1
		9.00	8.93	0.52~3.7	9.2	2.5	11
74	甲基环己烷	0.20	0.19	2.0~7.1	12	0.098	0.30
		1.00	1.03	0.57~2.5	8.2	0.22	1.1
		9.00	8.89	0.63~3.3	5.4	2.1	6.2
75	顺式-1,3-二氯-1-丙烯	0.20	0.19	2.0~5.9	12	0.090	0.33
		1.00	0.98	0.65~2.9	10	0.26	1.4
		9.00	9.71	0.70~3.7	11	2.7	15
76	1,1,2-三氯乙烷	0.20	0.21	1.8~6.0	14	0.13	0.52
		1.00	1.04	0.88~3.1	6.6	0.33	1.2
		9.00	8.90	0.78~3.3	5.3	3.2	8.3
77	2,3,4-三甲基戊烷	0.20	0.19	2.7~5.5	15	0.10	0.41
		1.00	1.02	0.36~2.0	9.5	0.21	1.4
		9.00	8.94	0.99~3.7	9.3	3.0	12
78	甲苯	0.20	0.19	2.0~7.0	12	0.086	0.28
		1.00	1.02	0.71~2.3	8.9	0.18	1.1
		9.00	8.95	0.60~3.2	7.8	2.2	8.3
79	2-甲基庚烷	0.20	0.19	2.0~6.0	13	0.10	0.37
		1.00	1.02	0.58~2.4	11	0.23	1.6
		9.00	9.07	0.67~4.0	7.2	3.3	9.8
80	2-己酮	0.20	0.20	2.0~10	12	0.12	0.31

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	测定均值 (nmol/mol)	实验室内相 对标准偏差 (%)	实验室间 相对标准 偏差 (%)	重复性 限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
		1.00	1.01	0.94~3.6	11	0.30	1.4
		9.00	9.04	1.0~3.6	5.1	2.9	6.4
81	3-甲基庚烷	0.20	0.19	2.0~6.5	16	0.097	0.45
		1.00	1.02	0.75~4.2	8.6	0.33	1.3
		9.00	8.98	1.2~3.5	7.9	3.2	10
82	二溴一氯甲烷	0.20	0.19	2.0~7.0	13	0.21	0.65
		1.00	1.02	0.91~5.0	11	0.70	2.8
		9.00	9.28	0.85~4.1	6.0	6.6	16
83	己醛	0.20	0.20	2.3~10	16	0.17	0.42
		1.00	1.01	0.88~4.4	8.7	0.33	1.1
		9.00	9.02	0.70~10	16	5.1	18
84	1,2-二溴乙烷	0.20	0.20	2.0~7.0	7.5	0.16	0.38
		1.00	1.04	0.75~2.8	7.9	0.41	2.0
		9.00	9.11	0.77~2.9	6.9	3.8	15
85	正辛烷	0.20	0.18	2.0~7.5	17	0.12	0.45
		1.00	0.97	0.71~2.0	8.9	0.21	1.2
		9.00	8.95	0.71~3.8	9.8	2.9	13
86	四氯乙烯	0.20	0.20	1.9~7.0	9.5	0.15	0.43
		1.00	1.05	0.55~2.4	8.5	0.33	1.9
		9.00	8.94	0.79~2.8	6.6	3.3	13
87	氯苯	0.20	0.21	1.8~7.0	8.1	0.11	0.26
		1.00	1.04	0.57~2.2	9.6	0.21	1.5
		9.00	8.91	0.70~2.9	8.5	2.3	11
88	乙苯	0.20	0.19	2.6~7.0	12	0.10	0.31
		1.00	0.99	0.62~2.3	9.1	0.23	1.2
		9.00	9.07	0.87~3.3	12	2.5	14
89/90	间/对-二甲苯	0.40	0.40	0.98~5.8	6.0	0.15	0.35
		2.00	1.97	0.34~2.2	8.1	0.42	2.2
		18.0	18.4	1.0~4.1	8.7	5.9	22
91	三溴甲烷	0.20	0.18	2.0~7.3	13	0.26	0.81
		1.00	1.01	0.73~5.9	8.2	0.89	2.7
		9.00	9.66	0.93~6.9	7.2	10	24
92	苯乙烯	0.20	0.19	2.3~6.5	14	0.10	0.35
		1.00	0.94	0.79~2.9	7.6	0.24	0.94
		9.00	9.09	0.61~4.4	9.9	2.7	12
93	四氯乙烷	0.20	0.21	2.3~6.0	12	0.15	0.54
		1.00	1.05	0.86~4.2	11	0.56	2.6
		9.00	8.99	1.3~4.3	6.8	5.0	14
94	邻二甲苯	0.20	0.19	2.0~6.0	8.4	0.087	0.22
		1.00	1.01	0.48~3.1	13	0.28	1.7

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	测定均值 (nmol/mol)	实验室内相 对标准偏差 (%)	实验室间 相对标准 偏差 (%)	重复性 限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
		9.00	8.73	0.85~4.4	8.7	2.9	10
95	正壬烷	0.20	0.19	2.2~5.9	10	0.12	0.32
		1.00	1.01	0.50~2.7	13	0.30	2.1
		9.00	8.94	0.73~7.5	5.8	5.1	9.5
96	异丙苯	0.20	0.19	2.0~6.0	10	0.11	0.30
		1.00	1.02	0.52~3.0	12	0.32	1.9
		9.00	8.68	0.89~4.2	9.7	2.7	13
97	苯甲醛	0.20	0.22	2.2~12	10	0.21	0.35
		1.00	0.92	1.9~9.6	8.5	0.73	1.2
		9.00	8.94	0.70~8.8	7.2	4.3	9.4
98	正丙苯	0.20	0.18	2.0~5.0	17	0.080	0.45
		1.00	1.00	0.49~11	13	0.60	2.0
		9.00	8.98	0.88~4.8	11	3.4	15
99	间乙基甲苯	0.20	0.18	2.2~8.0	14	0.11	0.40
		1.00	1.01	0.59~2.9	13	0.28	2.0
		9.00	9.04	0.53~4.7	10	3.2	14
100	对乙基甲苯	0.20	0.19	2.2~5.6	16	0.11	0.46
		1.00	1.01	0.57~3.2	13	0.33	2.0
		9.00	9.01	0.83~5.0	10	3.3	14
101	1,3,5-三甲苯	0.20	0.19	2.0~7.0	13	0.11	0.40
		1.00	1.00	0.58~4.8	14	0.40	2.2
		9.00	8.84	0.76~5.3	9.2	4.5	13
102	邻乙基甲苯	0.20	0.19	2.0~9.5	16	0.13	0.46
		1.00	1.03	0.78~4.3	11	0.35	1.7
		9.00	9.02	0.74~9.5	9.9	5.6	14
103	1,2,4-三甲苯	0.20	0.19	2.2~6.5	11	0.10	0.34
		1.00	0.98	0.53~2.6	11	0.26	1.7
		9.00	8.98	1.3~5.8	8.4	4.6	12
104	癸烷	0.20	0.19	2.2~7.1	10	0.14	0.35
		1.00	1.05	0.41~2.3	10	0.28	2.0
		9.00	8.98	1.7~8.4	6.2	6.6	12
105	氯代甲苯	0.20	0.19	1.9~9.3	13	0.15	0.42
		1.00	0.93	0.75~3.4	10	0.35	1.5
		9.00	8.97	1.3~4.3	9.4	4.1	14
106	对二氯苯	0.20	0.19	2.2~7.1	11	0.15	0.39
		1.00	1.01	0.69~3.2	11	0.36	2.1
		9.00	9.29	1.2~5.1	11	5.3	19
107	间二氯苯	0.20	0.19	2.5~9.1	12	0.17	0.46
		1.00	0.99	1.1~3.2	11	0.32	2.1
		9.00	9.38	1.1~4.0	9.9	4.5	18

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	测定均值 (nmol/mol)	实验室内相 对标准偏差 (%)	实验室间 相对标准 偏差 (%)	重复性 限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
108	1,2,3-三甲苯	0.20	0.19	2.2~6.0	12	0.12	0.35
		1.00	0.99	0.53~6.0	11	0.41	1.7
		9.00	9.08	1.3~5.6	10	4.0	14
109	邻二氯苯	0.20	0.19	2.2~4.8	9.5	0.13	0.35
		1.00	1.02	0.59~3.0	12	0.34	2.1
		9.00	9.29	1.2~4.5	10	5.2	18
110	间二乙基苯	0.20	0.18	2.5~7.5	12	0.15	0.38
		1.00	0.98	0.53~2.8	9.9	0.34	1.7
		9.00	9.23	1.5~5.6	7.6	4.8	13
111	对二乙基苯	0.20	0.19	2.4~7.0	15	0.13	0.50
		1.00	0.97	1.5~5.0	12	0.44	2.0
		9.00	9.20	1.9~5.9	7.4	5.5	12
112	间甲基苯甲醛	0.20	0.18	2.9~18	19	0.28	0.57
		1.00	1.00	1.5~16	15	1.2	2.5
		9.00	9.28	1.4~5.8	7.8	4.8	12
113	十一烷	0.20	0.19	2.0~7.8	15	0.18	0.58
		1.00	0.98	0.38~5.8	11	0.50	2.3
		9.00	9.39	1.2~7.8	10	7.2	19
114	1,2,4-三氯苯	0.20	0.21	1.6~7.4	14	0.19	0.68
		1.00	0.93	2.0~5.3	14	0.75	3.0
		9.00	9.58	1.0~6.0	5.6	6.6	14
115	萘	0.20	0.20	1.6~11	12	0.19	0.43
		1.00	0.95	1.7~6.7	15	0.56	2.3
		9.00	9.82	1.2~6.2	8.0	4.8	13
116	十二烷	0.20	0.20	2.3~8.5	14	0.23	0.66
		1.00	0.96	1.3~10	11	0.90	2.5
		9.00	9.42	1.1~7.1	11	7.3	22
117	1,1,2,3,4,4-六氯 -1,3-丁二烯	0.20	0.19	1.6~7.9	14	0.30	0.92
		1.00	1.06	0.98~3.4	13	0.71	4.5
		9.00	9.16	1.2~7.5	8.4	12	27

表 E.4 FID/MS (SIM) 模式方法精密度 (实际样品加标)

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	本底浓度 均值 (nmol/mol)	测定均值 (扣本底, nmol/mol)	实验室内相 对标准偏差 (%)	实验室间相 对标准偏差 (%)	重复性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
1	乙烯	2.00	1.78	1.82	0.81~7.8	21	0.35	1.4
		9.00	1.61	8.47	0.47~7.5	15	1.4	4.8
2	乙烷	2.00	2.88	1.88	0.63~15	16	0.46	1.2
		9.00	2.77	8.21	0.13~4.2	8.8	0.97	2.8

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	本底浓度 均值 (nmol/mol)	测定均值 (扣本底, nmol/mol)	实验室内相 对标准偏差 (%)	实验室间相 对标准偏差 (%)	重复性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
3	乙炔	2.00	2.86	1.89	0.33~7.8	15	0.35	0.99
		9.00	2.42	8.47	0.30~5.4	12	0.93	3.4
4	甲醛	10.0	5.76	9.47	1.8~8.3	16	4.3	7.0
		45.0	5.99	41.2	2.1~15	16	18	29
5	丙烯	2.00	0.57	1.93	0.25~5.6	14	0.37	1.4
		9.00	0.59	8.53	0.74~11	11	2.1	5.1
6	丙烷	2.00	3.13	1.86	0.43~8.9	17	0.83	1.9
		9.00	2.83	8.70	0.75~9.5	10	2.1	5.2
7	二氟二氯甲烷	2.00	0.40	1.93	0.67~6.6	12	1.1	3.8
		9.00	0.38	8.63	0.84~6.6	9.0	4.1	12
8	一氯甲烷	2.00	0.77	1.90	0.61~6.8	18	0.52	2.2
		9.00	0.77	8.79	0.75~6.8	9.7	2.0	5.7
9	异丁烷	2.00	0.89	1.85	0.48~13	20	1.1	2.9
		9.00	0.80	8.38	0.84~8.0	14	2.5	8.8
10	乙醛	2.00	1.50	2.03	0.53~15	22	1.2	2.7
		9.00	1.44	8.70	0.71~9.7	17	3.0	8.7
11	1,1,2,2-四氯乙烷	2.00	0.02	2.02	0.53~8.7	15	1.4	6.6
		9.00	0.02	9.04	0.74~7.5	15	7.3	30
12	氯乙烯	2.00	0.09	1.85	0.86~9.7	11	0.89	1.8
		9.00	0.08	9.06	0.81~12	11	4.6	9.1
13	正丁烯	2.00	0.10	1.75	0.54~12	14	0.74	1.9
		9.00	0.14	8.62	0.56~14	13	4.3	8.5
14	丁二烯	2.00	0.10	1.78	0.82~16	11	1.0	1.6
		9.00	0.16	8.58	0.52~14	13	3.4	7.9
15	正丁烷	2.00	0.88	1.79	0.58~8.2	20	0.91	2.7
		9.00	0.90	8.45	0.68~14	12	4.3	8.5
16	反式-2-丁烯	2.00	0.09	1.81	0.79~9.4	12	0.69	1.6
		9.00	0.14	8.90	0.43~10	13	3.0	8.9
17	一溴甲烷	2.00	0.01	1.88	0.79~11	11	1.0	2.5
		9.00	0.01	8.77	0.84~8.2	13	4.8	14
18	顺式-2-丁烯	2.00	0.03	1.87	0.66~9.7	13	0.67	1.9
		9.00	0.09	8.83	0.96~8.8	15	3.1	9.3
19	氯乙烷	2.00	0.58	1.95	0.66~6.2	15	0.52	2.5
		9.00	0.57	8.66	0.65~6.9	13	2.1	8.7
20	丙烯醛	2.00	0.34	1.79	0.96~12	21	0.62	2.7
		9.00	0.33	8.58	0.41~7.6	21	2.3	13
21	丙酮	2.00	2.01	1.89	0.81~11	20	0.91	2.8
		9.00	2.12	7.97	0.64~5.3	15	2.3	8.9
22	异戊烷	2.00	0.71	1.87	0.74~5.8	16	0.66	2.8

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	本底浓度 均值 (nmol/mol)	测定均值 (扣本底, nmol/mol)	实验室内相 对标准偏差 (%)	实验室间相 对标准偏差 (%)	重复性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
		9.00	0.54	8.50	1.4~8.7	16	3.2	13
23	丙醛	2.00	0.82	1.77	1.2~12	16	1.0	2.2
		9.00	1.10	8.11	0.97~5.9	16	2.6	9.9
24	一氟三氯甲 烷	2.00	0.18	2.05	0.68~4.7	14	0.78	5.0
		9.00	0.17	8.91	0.47~4.6	11	3.9	18
25	异丙醇	2.00	0.47	1.87	0.66~14	20	0.91	2.9
		9.00	0.44	8.79	0.59~12	17	4.9	12
26	1-戊烯	2.00	0.23	1.86	0.56~5.2	17	0.51	2.8
		9.00	0.22	8.95	0.49~4.5	13	2.1	11
27	正戊烷	2.00	0.69	1.87	0.66~5.9	16	0.57	2.7
		9.00	0.55	8.73	0.49~8.1	17	3.3	14
28	2-甲基-1,3- 丁二烯	2.00	0.08	1.80	0.56~3.8	16	0.31	2.4
		9.00	0.13	8.85	0.49~7.5	14	3.0	11
29	反式-2-戊烯	2.00	0.05	1.85	0.72~5.7	16	0.46	2.7
		9.00	0.10	8.85	0.71~5.5	15	2.8	12
30	1,1-二氯乙烯	2.00	0.03	1.91	0.71~4.9	13	0.61	3.0
		9.00	0.06	8.99	0.51~9.5	13	4.8	15
31	顺式-2-戊烯	2.00	0.05	1.80	0.65~4.5	16	0.40	2.5
		9.00	0.10	8.74	0.53~6.9	16	3.0	12
32	二氯甲烷	2.00	1.30	1.95	0.51~8.5	15	1.2	3.3
		9.00	1.27	8.75	0.57~3.1	15	2.1	14
33	二硫化碳	2.00	0.49	1.88	0.76~6.8	13	0.58	2.4
		9.00	0.53	9.09	0.68~7.1	11	3.3	10
34	1,2,2-三氟 -1,1,2-三氯乙 烷	2.00	0.05	1.96	0.67~3.6	10	0.95	4.8
		9.00	0.05	8.77	0.69~5.4	7.4	5.9	16
35	2,2-二甲基丁 烷	2.00	0.05	1.86	0.55~5.4	12	0.62	2.6
		9.00	0.10	8.88	0.82~4.2	11	2.5	11
36	甲基丙烯醛	2.00	0.05	1.78	0.49~7.5	15	0.55	2.4
		9.00	0.09	8.92	0.44~9.3	17	3.5	13
37	反式-1,2-二 氯乙烯	2.00	0.03	1.89	0.62~5.4	9.5	0.54	2.2
		9.00	0.03	8.95	0.74~8.1	10	4.0	12
38	1,1-二氯乙烷	2.00	0.05	1.94	0.87~3.4	9.8	0.47	2.4
		9.00	0.03	8.84	0.81~4.4	7.5	2.7	8.5
39	甲基叔丁基 醚	2.00	0.13	1.83	0.70~4.8	15	0.43	3.2
		9.00	0.20	8.69	0.73~10	15	4.4	15
40	环戊烷	2.00	0.11	1.87	0.66~8.0	14	0.56	2.3
		9.00	0.11	8.72	0.62~4.8	11	2.1	8.3
41	2,3-二甲基丁 烷	2.00	0.28	1.83	0.93~7.3	14	0.62	2.9
		9.00	0.27	8.56	1.0~8.2	15	3.8	14

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	本底浓度 均值 (nmol/mol)	测定均值 (扣本底, nmol/mol)	实验室内相 对标准偏差 (%)	实验室间相 对标准偏差 (%)	重复性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
42	乙酸乙烯酯	2.00	0.12	1.81	1.1~5.7	18	0.65	3.5
		9.00	0.19	9.07	0.77~4.1	19	2.5	18
43	2-甲基戊烷	2.00	0.18	1.87	0.67~6.3	13	0.69	2.8
		9.00	0.16	8.87	0.95~7.8	8.9	3.5	9.0
44	正丁醛	2.00	0.34	1.78	0.81~15	12	1.5	2.7
		9.00	0.38	8.53	1.5~8.3	13	5.0	13
45	2-丁酮	2.00	0.55	1.84	0.51~5.4	15	0.75	2.6
		9.00	0.51	8.61	0.77~3.3	13	1.9	9.7
46	3-甲基戊烷	2.00	0.12	1.84	0.62~4.5	14	0.45	2.8
		9.00	0.16	8.78	0.58~3.7	14	2.0	13
47	1-己烯	2.00	0.05	1.83	0.64~2.7	13	0.29	2.6
		9.00	0.13	8.94	0.45~3.6	12	1.8	12
48	顺式-1,2-二 氯乙烯	2.00	0.12	1.82	0.63~2.0	9.3	0.32	2.0
		9.00	0.10	8.89	0.38~3.9	8.8	1.9	9.6
49	乙酸乙酯	2.00	1.03	1.83	0.78~2.2	17	0.49	3.6
		9.00	0.84	8.73	0.61~3.1	11	2.2	11
50	正己烷	2.00	0.18	1.87	0.73~4.8	13	0.49	2.7
		9.00	0.26	8.73	0.54~3.4	11	2.2	10
51	三氯甲烷	2.00	0.24	1.96	0.75~3.5	15	0.62	4.3
		9.00	0.25	8.92	0.77~2.8	8.3	2.2	11
52	四氢呋喃	2.00	0.07	1.74	0.63~4.8	14	0.43	2.3
		9.00	0.06	8.69	0.68~3.6	14	1.9	11
53	丁烯醛	2.00	0.11	1.68	0.34~5.1	17	0.39	2.5
		9.00	0.19	8.66	0.49~5.9	20	2.7	15
54	1,2-二氯乙烷	2.00	0.59	1.99	0.66~10	17	1.0	4.3
		9.00	0.58	8.79	0.97~6.8	9.2	4.4	11
55	甲基环戊烷	2.00	0.16	1.77	0.68~2.9	14	0.39	2.6
		9.00	0.15	8.37	1.1~5.9	8.5	2.9	7.9
56	2,4-二甲基戊 烷	2.00	0.05	1.92	0.76~8.9	8.9	0.94	2.3
		9.00	0.10	8.65	0.69~5.2	9.5	3.4	11
57	1,1,1-三氯乙 烷	2.00	0.02	1.99	0.84~3.5	12	0.79	3.9
		9.00	0.02	8.94	0.51~5.5	5.3	4.0	8.6
58	苯	2.00	0.64	1.86	0.72~2.9	12	0.42	2.2
		9.00	0.57	8.61	0.63~3.4	8.0	1.9	6.9
59	四氯化碳	2.00	0.08	2.04	0.86~3.9	11	1.0	4.3
		9.00	0.08	9.17	0.44~4.9	4.7	4.2	9.1
60	环己烷	2.00	0.08	1.87	0.55~3.6	7.5	0.37	1.5
		9.00	0.14	8.66	0.65~3.6	7.0	2.2	6.8
61	2-甲基己烷	2.00	0.10	1.93	0.78~9.0	12	0.83	3.2
		9.00	0.10	8.74	0.77~5.9	6.9	3.4	8.1

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	本底浓度 均值 (nmol/mol)	测定均值 (扣本底, nmol/mol)	实验室内相 对标准偏差 (%)	实验室间相 对标准偏差 (%)	重复性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
62	2,3-二甲基戊烷	2.00	0.03	1.97	0.91~5.4	15	0.62	3.8
		9.00	0.07	8.63	0.52~8.2	6.8	3.4	8.0
63	戊醛	2.00	0.22	1.83	1.1~12	13	1.4	2.8
		9.00	0.24	8.63	0.99~8.5	15	3.8	14
64	3-甲基己烷	2.00	0.10	1.94	0.93~7.4	13	0.71	3.2
		9.00	0.09	8.61	0.65~11	6.5	4.8	8.3
65	1,2-二氯丙烷	2.00	0.32	1.89	0.79~7.0	13	0.76	3.7
		9.00	0.22	8.71	0.71~4.0	6.2	3.1	8.1
66	一溴二氯甲烷	2.00	0.01	2.05	0.78~5.6	13	1.1	5.5
		9.00	0.01	9.27	0.71~5.0	6.4	5.2	13
67	1,4-二氧六环	2.00	0.10	1.84	0.84~10	21	0.88	4.3
		9.00	0.19	8.31	0.78~7.9	16	4.1	15
68	三氯乙烯	2.00	0.03	2.00	0.86~5.2	15	0.75	5.0
		9.00	0.03	8.92	0.63~3.8	6.6	3.2	10
69	2,2,4-三甲基戊烷	2.00	0.09	1.96	0.74~7.0	16	0.75	4.4
		9.00	0.08	8.77	0.74~3.3	5.9	2.7	7.8
70	甲基丙烯酸甲酯	2.00	0.13	1.88	0.83~8.4	12	0.98	2.9
		9.00	0.06	9.15	0.79~15	8.5	7.1	12
71	正庚烷	2.00	0.06	1.96	0.84~7.4	12	0.73	2.9
		9.00	0.11	8.75	0.48~5.9	7.2	3.4	8.5
72	反式-1,3-二氯-1-丙烯	2.00	0.02	1.95	0.47~9.1	13	0.93	3.5
		9.00	0.02	9.51	0.87~5.3	7.0	3.7	9.9
73	4-甲基-2-戊酮	2.00	0.08	1.73	0.86~6.0	17	0.75	3.9
		9.00	0.13	8.26	0.87~7.2	13	4.0	14
74	甲基环己烷	2.00	0.07	1.89	0.69~7.3	12	0.80	2.9
		9.00	0.13	8.81	0.80~3.9	7.9	2.6	9.0
75	顺式-1,3-二氯-1-丙烯	2.00	0.02	1.96	0.80~7.5	12	0.93	3.3
		9.00	0.02	9.73	0.78~3.9	9.9	3.3	14
76	1,1,2-三氯乙烷	2.00	0.04	2.01	0.85~9.5	12	1.3	4.1
		9.00	0.05	8.98	0.97~6.0	8.0	4.8	13
77	2,3,4-三甲基戊烷	2.00	0.09	1.99	0.76~8.2	9.5	1.1	2.9
		9.00	0.09	8.87	0.83~5.1	8.9	3.8	12
78	甲苯	2.00	1.12	1.88	0.93~4.5	18	1.1	3.9
		9.00	0.88	8.50	1.3~3.6	13	2.5	12
79	2-甲基庚烷	2.00	0.03	1.92	1.0~8.3	12	0.96	3.6
		9.00	0.03	8.92	1.1~5.8	6.6	3.8	9.1
80	2-己酮	2.00	0.10	1.77	1.2~5.2	21	0.83	4.9
		9.00	0.13	8.16	1.9~9.6	21	5.2	22
81	3-甲基庚烷	2.00	0.08	2.03	0.97~5.2	13	0.80	3.8
		9.00	0.08	9.05	0.91~3.9	11	3.3	15

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	本底浓度 均值 (nmol/mol)	测定均值 (扣本底, nmol/mol)	实验室内相 对标准偏差 (%)	实验室间相 对标准偏差 (%)	重复性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
82	二溴一氯甲烷	2.00	0.03	1.92	0.94~4.8	12	1.4	6.0
		9.00	0.03	9.22	0.67~6.2	11	7.9	27
83	己醛	2.00	0.43	1.78	1.1~11	18	1.4	4.2
		9.00	0.61	8.45	0.43~8.9	17	4.2	18
84	1,2-二溴乙烷	2.00	0.04	1.97	0.84~4.6	11	1.2	5.2
		9.00	0.04	9.14	0.54~3.9	8.2	5.4	18
85	正辛烷	2.00	0.08	1.96	0.86~4.5	12	0.71	3.4
		9.00	0.08	8.88	0.82~4.3	10	3.4	13
86	四氯乙烯	2.00	0.08	1.88	0.81~4.5	12	0.99	4.9
		9.00	0.08	8.98	0.73~3.8	8.2	4.0	16
87	氯苯	2.00	0.12	1.84	0.25~4.2	17	0.70	4.5
		9.00	0.12	8.62	1.3~3.4	13	2.8	15
88	乙苯	2.00	0.18	1.87	0.90~4.4	19	0.73	4.9
		9.00	0.27	8.68	1.1~3.4	16	2.7	19
89/90	间/对-二甲苯	4.00	0.38	4.02	0.91~4.5	18	1.7	9.9
		18.0	0.44	17.5	0.96~11	13	8.9	30
91	三溴甲烷	2.00	0.03	1.93	0.47~5.8	11	2.2	6.8
		9.00	0.07	9.82	0.40~6.2	12	11	38
92	苯乙烯	2.00	0.04	1.80	0.71~2.9	16	0.40	3.8
		9.00	0.11	8.79	1.2~3.7	17	2.8	20
93	四氯乙烷	2.00	0.02	2.04	1.1~7.1	15	1.6	6.4
		9.00	0.02	8.94	0.64~5.4	11	5.6	22
94	邻二甲苯	2.00	0.22	1.85	0.86~3.1	20	0.59	4.9
		9.00	0.19	8.38	1.1~4.0	16	3.0	17
95	正壬烷	2.00	0.04	1.93	1.0~4.0	13	0.68	4.1
		9.00	0.11	8.77	0.73~3.4	9.0	3.4	13
96	异丙苯	2.00	0.10	1.81	0.65~4.9	17	0.67	4.7
		9.00	0.10	8.36	1.1~3.9	14	3.3	18
97	苯甲醛	2.00	0.23	1.52	1.9~15	7.9	1.9	2.3
		9.00	0.27	8.67	0.68~15	21	7.6	25
98	正丙苯	2.00	0.10	1.81	0.90~6.7	20	1.1	5.7
		9.00	0.09	8.57	0.68~3.9	15	3.1	19
99	间乙基甲苯	2.00	0.11	1.82	1.0~7.3	20	1.1	5.6
		9.00	0.11	8.45	0.34~10	15	5.0	20
100	对乙基甲苯	2.00	0.07	1.87	1.0~11	20	1.4	5.7
		9.00	0.10	8.50	0.46~4.8	14	3.5	18
101	1,3,5-三甲苯	2.00	0.08	1.78	1.1~7.4	19	1.1	5.2
		9.00	0.08	8.36	1.1~4.8	14	4.0	19
102	邻乙基甲苯	2.00	0.11	1.88	0.70~6.0	16	1.1	4.7
		9.00	0.11	8.55	0.37~3.9	15	3.0	19

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	本底浓度 均值 (nmol/mol)	测定均值 (扣本底, nmol/mol)	实验室内相 对标准偏差 (%)	实验室间相 对标准偏差 (%)	重复性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	再现性限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
103	1,2,4-三甲苯	2.00	0.12	1.86	1.0~6.5	19	1.1	5.4
		9.00	0.11	8.62	0.23~4.9	15	3.4	19
104	癸烷	2.00	0.10	1.94	1.0~5.0	18	0.98	6.2
		9.00	0.10	8.93	0.65~4.4	9.1	4.1	15
105	氯代甲苯	2.00	0.12	1.65	0.57~7.1	7.3	0.96	2.1
		9.00	0.06	8.86	0.82~8.4	18	5.9	25
106	对二氯苯	2.00	0.07	1.92	1.0~5.5	20	1.1	7.0
		9.00	0.07	8.97	0.46~5.8	18	5.1	31
107	间二氯苯	2.00	0.08	1.86	1.1~6.6	17	1.3	5.7
		9.00	0.02	9.15	0.50~5.3	15	5.1	26
108	1,2,3-三甲苯	2.00	0.09	1.79	0.78~6.0	22	0.97	5.9
		9.00	0.12	8.70	0.37~5.8	15	3.8	20
109	邻二氯苯	2.00	0.07	1.89	0.51~6.3	17	1.3	6.1
		9.00	0.07	8.87	0.48~6.5	16	5.2	26
110	间二乙基苯	2.00	0.04	1.81	0.65~6.7	19	1.1	5.8
		9.00	0.06	8.89	0.69~5.8	9.9	4.0	15
111	对二乙基苯	2.00	0.12	1.82	1.1~6.3	20	1.2	6.1
		9.00	0.13	8.87	0.75~5.7	12	4.4	19
112	间甲基苯甲 醛	2.00	0.14	1.75	0.66~8.6	18	1.5	5.0
		9.00	0.24	8.65	0.92~12	20	6.5	26
113	十一烷	2.00	0.11	1.93	1.3~5.2	23	1.3	8.8
		9.00	0.11	9.20	0.74~5.7	12	4.9	22
114	1,2,4-三氯苯	2.00	0.14	1.67	1.2~13	22	2.8	8.7
		9.00	0.11	9.55	1.1~8.9	8.6	7.5	20
115	萘	2.00	0.16	1.64	1.0~18	15	2.5	4.6
		9.00	0.16	9.04	0.75~13	13	7.3	20
116	十二烷	2.00	0.15	1.85	1.0~13	18	2.1	7.5
		9.00	0.19	9.12	0.57~11	14	8.9	29
117	1,1,2,3,4,4-六 氯-1,3-丁二 烯	2.00	0.02	1.98	1.1~7.7	20	3.1	13
		9.00	0.01	9.07	0.70~5.9	12	7.6	37

表 E.5 FID/MS (SCAN) 模式方法正确度 (空白样品加标)

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	加标回收率范围 (%)	$\bar{P}(\%)$	$S_{\bar{P}}(\%)$	$\bar{P} \pm 2S_{\bar{P}}(\%)$
1	乙烯	0.50	94.0~112	99.8	5.2	99.8 $\pm$ 10
		2.50	96.4~104	101	2.5	101 $\pm$ 5.0
		9.00	89.0~105	98.3	4.7	98.3 $\pm$ 9.4
2	乙烷	0.50	80.0~112	99.6	11	99.6 $\pm$ 22

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	加标回收率范围 (%)	$\bar{P}(\%)$	$S_p(\%)$	$\bar{P} \pm 2S_p(\%)$
		2.50	91.2~110	101	4.9	101±9.8
		9.00	95.2~102	98.8	2.2	98.8±4.4
3	乙炔	0.50	96.0~118	104	7.5	104±15
		2.50	86.0~104	99.4	5.3	99.4±11
		9.00	95.1~106	99.5	3.3	99.5±6.6
4	甲醛	2.50	94.4~123	101	8.5	101±17
		12.5	86.4~112	98.9	7.2	98.9±14
		45.0	87.8~111	98.4	7.0	98.4±14
5	丙烯	0.50	88.0~108	97.3	6.7	97.3±13
		2.50	97.2~108	101	3.3	101±6.6
		9.00	96.7~105	100	2.7	100±5.4
6	丙烷	0.50	84.0~100	93.8	5.2	93.8±10
		2.50	96.0~106	101	3.3	101±6.6
		9.00	92.0~100	98.0	2.5	98.0±5.0
7	二氟二氯甲烷	0.50	72.0~114	97.3	11	97.3±22
		2.50	76.4~105	98.4	8.7	98.4±17
		9.00	90.4~116	99.8	7.7	99.8±15
8	一氯甲烷	0.50	84.0~106	96.4	8.2	96.4±16
		2.50	94.0~115	103	6.1	103±12
		9.00	91.0~118	104	9.1	104±18
9	异丁烷	0.50	94.0~124	106	12	106±24
		2.50	94.8~104	99.7	3.2	99.7±6.4
		9.00	89.4~118	98.7	8.1	98.7±16
10	乙醛	0.50	92.0~114	102	7.7	102±15
		2.50	83.2~106	96.9	8.0	96.9±16
		9.00	73.7~121	94.0	14	94.0±28
11	1,1,2,2-四氟-1,2-二氯乙烷	0.50	82.0~104	96.0	6.8	96.0±14
		2.50	88.4~104	98.8	4.7	98.8±9.4
		9.00	92.8~112	99.9	5.5	99.9±11
12	氯乙烯	0.50	90.0~124	100	10	100±20
		2.50	96.0~106	101	2.9	101±5.8
		9.00	93.3~117	101	7.0	101±14
13	正丁烯	0.50	90.0~108	98.9	5.9	98.9±12
		2.50	92.8~110	100	5.3	100±11
		9.00	91.1~119	102	8.9	102±18
14	丁二烯	0.50	88.0~110	95.6	6.6	95.6±13
		2.50	92.4~109	101	4.9	101±9.8
		9.00	94.3~119	101	7.2	101±14
15	正丁烷	0.50	94.0~112	102	6.8	102±14
		2.50	95.2~105	100	3.4	100±6.8
		9.00	93.4~119	101	7.3	101±15

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	加标回收率范围 (%)	$\bar{P}(\%)$	$S_p(\%)$	$\bar{P} \pm 2S_p(\%)$
16	反式-2-丁烯	0.50	84.0~124	99.3	11	99.3±22
		2.50	95.6~108	101	4.1	101±8.2
		9.00	94.2~117	102	7.9	102±16
17	一溴甲烷	0.50	88.0~108	96.2	6.3	96.2±13
		2.50	81.6~108	99.3	7.2	99.3±14
		9.00	94.0~114	101	6.4	101±13
18	顺式-2-丁烯	0.50	92.0~114	99.6	8.2	99.6±16
		2.50	92.4~109	101	5.0	101±10
		9.00	94.1~118	102	7.8	102±16
19	氯乙烷	0.50	92.0~112	99.6	7.3	99.6±15
		2.50	87.6~108	100	5.6	100±11
		9.00	94.7~117	101	6.9	101±14
20	丙烯醛	0.50	74.0~120	97.8	14	97.8±28
		2.50	91.2~111	102	5.5	102±11
		9.00	90.7~117	103	8.8	103±18
21	丙酮	0.50	88.0~118	107	12	107±24
		2.50	84.8~109	99.1	6.7	99.1±13
		9.00	79.6~119	96.8	11	96.8±22
22	异戊烷	0.50	88.0~120	102	10	102±20
		2.50	92.4~103	98.2	4.3	98.2±8.6
		9.00	91.1~116	99.7	7.1	99.7±14
23	丙醛	0.50	76.0~104	92.7	8.8	92.7±18
		2.50	92.4~112	100	6.2	100±12
		9.00	84.0~117	98.0	9.1	98.0±18
24	一氟三氯甲烷	0.50	88.0~118	98.7	8.3	98.7±17
		2.50	86.4~103	99.3	5.0	99.3±10
		9.00	94.0~114	99.9	5.9	99.9±12
25	异丙醇	0.50	88.0~122	98.9	12	98.9±24
		2.50	91.6~109	99.6	6.6	99.6±13
		9.00	77.7~120	97.8	12	97.8±24
26	1-戊烯	0.50	92.0~116	102	7.0	102±14
		2.50	88.8~106	99.4	6.0	99.4±12
		9.00	92.0~114	101	8.0	101±16
27	正戊烷	0.50	86.0~112	97.6	8.2	97.6±16
		2.50	94.0~116	102	6.8	102±14
		9.00	93.7~117	103	8.0	103±16
28	2-甲基-1,3-丁二烯	0.50	82.0~102	93.6	6.1	93.6±12
		2.50	93.6~112	102	5.4	102±11
		9.00	94.6~118	105	7.7	105±15
29	反式-2-戊烯	0.50	88.0~104	96.2	6.0	96.2±12
		2.50	94.8~107	101	4.2	101±8.4

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	加标回收率范围 (%)	$\bar{P}(\%)$	$S_{\bar{P}}(\%)$	$\bar{P} \pm 2S_{\bar{P}}(\%)$
		9.00	94.7~116	103	7.1	103±14
30	1,1-二氯乙烯	0.50	92.0~116	98.7	7.2	98.7±14
		2.50	92.8~110	102	5.3	102±11
		9.00	94.7~117	103	7.1	103±14
31	顺式-2-戊烯	0.50	76.0~110	94.9	9.5	94.9±19
		2.50	95.2~106	99.3	4.0	99.3±8.0
		9.00	94.1~118	102	8.7	102±17
32	二氯甲烷	0.50	88.0~108	98.2	6.3	98.2±13
		2.50	84.8~109	98.7	7.1	98.7±14
		9.00	89.9~112	99.9	6.2	99.9±12
33	二硫化碳	0.50	84.0~104	96.2	5.9	96.2±12
		2.50	79.6~109	99.1	8.0	99.1±16
		9.00	94.9~118	105	8.0	105±16
34	1,2,2-三氟-1,1,2-三氯乙烷	0.50	88.0~110	97.6	6.2	97.6±12
		2.50	76.8~104	98.8	8.3	98.8±17
		9.00	94.8~108	101	5.0	101±10
35	2,2-二甲基丁烷	0.50	88.0~104	96.0	6.0	96.0±12
		2.50	93.2~113	102	5.7	102±11
		9.00	93.7~122	104	8.5	104±17
36	甲基丙烯醛	0.50	80.0~108	93.8	10	93.8±20
		2.50	90.4~115	100	8.1	100±16
		9.00	84.4~119	101	11	101±22
37	反式-1,2-二氯乙烯	0.50	90.0~110	97.8	6.1	97.8±12
		2.50	95.2~108	100	4.2	100±8.4
		9.00	93.3~113	102	6.6	102±13
38	1,1-二氯乙烷	0.50	94.0~108	98.2	4.4	98.2±8.8
		2.50	79.2~107	100	8.2	100±16
		9.00	96.2~113	102	5.1	102±10
39	甲基叔丁基醚	0.50	84.0~116	98.2	11	98.2±22
		2.50	87.6~116	101	7.9	101±16
		9.00	87.0~127	103	12	103±24
40	环戊烷	0.50	90.0~104	95.8	4.4	95.8±8.8
		2.50	90.4~112	101	5.8	101±12
		9.00	94.7~117	104	7.8	104±16
41	2,3-二甲基丁烷	0.50	94.0~108	98.7	4.5	98.7±9.0
		2.50	97.2~118	104	6.4	104±13
		9.00	98.3~118	105	8.2	105±16
42	乙酸乙烯酯	0.50	82.0~108	94.7	9.6	94.7±19
		2.50	89.2~114	103	8.6	103±17
		9.00	92.7~120	104	9.9	104±20
43	2-甲基戊烷	0.50	92.0~108	98.4	5.4	98.4±11

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	加标回收率范围 (%)	$\bar{P}(\%)$	$S_{\bar{P}}(\%)$	$\bar{P} \pm 2S_{\bar{P}}(\%)$
		2.50	94.8~116	102	6.1	102±12
		9.00	96.7~120	103	7.9	103±16
44	正丁醛	0.50	88.0~114	101	8.0	101±16
		2.50	77.2~106	95.8	11	95.8±22
		9.00	79.1~120	101	13	101±26
45	2-丁酮	0.50	88.0~120	101	11	101±22
		2.50	76.4~115	100	11	100±22
		9.00	83.3~118	101	11	101±22
46	3-甲基戊烷	0.50	76.0~104	94.2	8.9	94.2±18
		2.50	95.2~106	100	3.5	100±7.0
		9.00	94.9~114	103	6.9	103±14
47	1-己烯	0.50	74.0~124	95.8	14	95.8±28
		2.50	92.8~107	102	4.7	102±9.4
		9.00	95.2~118	103	8.1	103±16
48	顺式-1,2-二氯乙烯	0.50	90.0~108	97.1	5.3	97.1±11
		2.50	92.8~110	101	5.2	101±10
		9.00	94.2~114	102	6.7	102±13
49	乙酸乙酯	0.50	82.0~116	101	10	101±20
		2.50	90.0~108	100	6.0	100±12
		9.00	91.6~120	103	10	103±20
50	正己烷	0.50	82.0~108	98.0	8.2	98.0±16
		2.50	93.6~114	101	5.8	101±12
		9.00	95.1~118	105	7.0	105±14
51	三氯甲烷	0.50	88.0~118	98.7	8.5	98.7±17
		2.50	79.2~103	98.0	7.6	98.0±15
		9.00	91.7~112	99.9	5.7	99.9±11
52	四氢呋喃	0.50	76.0~112	93.3	12	93.3±24
		2.50	86.0~108	99.2	6.9	99.2±14
		9.00	91.0~120	102	9.4	102±19
53	丁烯醛	0.50	82.0~110	94.9	10	94.9±20
		2.50	83.6~105	95.8	6.5	95.8±13
		9.00	86.7~118	100	11	100±22
54	1,2-二氯乙烷	0.50	80.0~120	98.0	11	98.0±22
		2.50	83.2~105	98.6	6.4	98.6±13
		9.00	92.1~114	99.9	6.6	99.9±13
55	甲基环戊烷	0.50	88.0~104	96.2	5.6	96.2±11
		2.50	97.6~111	102	4.8	102±9.6
		9.00	96.1~111	102	4.3	102±8.6
56	2,4-二甲基戊烷	0.50	92.0~110	98.0	5.6	98.0±11
		2.50	94.4~112	102	5.8	102±12
		9.00	94.3~110	101	5.1	101±10

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	加标回收率范围 (%)	$\bar{P}(\%)$	$S_{\bar{P}}(\%)$	$\bar{P} \pm 2S_{\bar{P}}(\%)$
57	1,1,1-三氯乙烷	0.50	68.0~108	96.7	12	96.7±24
		2.50	74.8~110	97.1	9.5	97.1±19
		9.00	95.3~110	100	5.5	100±11
58	苯	0.50	90.0~106	97.6	6.5	97.6±13
		2.50	92.8~107	101	4.8	101±9.6
		9.00	88.7~110	100	6.3	100±13
59	四氯化碳	0.50	68.0~104	95.1	11	95.1±22
		2.50	76.8~112	97.8	9.4	97.8±19
		9.00	95.0~111	102	6.0	102±12
60	环己烷	0.50	88.0~100	94.9	4.7	94.9±9.4
		2.50	85.6~108	99.1	6.3	99.1±13
		9.00	88.9~109	100	6.0	100±12
61	2-甲基己烷	0.50	90.0~108	99.1	6.6	99.1±13
		2.50	89.2~112	101	7.7	101±15
		9.00	92.6~107	101	5.2	101±10
62	2,3-二甲基戊烷	0.50	80.0~110	95.8	9.3	95.8±19
		2.50	91.2~112	102	6.9	102±14
		9.00	92.3~112	101	6.4	101±13
63	戊醛	0.50	76.0~106	95.1	12	95.1±24
		2.50	88.4~116	99.4	7.8	99.4±16
		9.00	76.2~118	102	13	102±26
64	3-甲基己烷	0.50	88.0~124	99.3	11	99.3±22
		2.50	92.8~114	102	6.7	102±13
		9.00	93.3~110	101	5.0	101±10
65	1,2-二氯丙烷	0.50	92.0~114	99.6	6.9	99.6±14
		2.50	89.6~108	99.5	5.4	99.5±11
		9.00	94.0~111	101	5.0	101±10
66	一溴二氯甲烷	0.50	76.0~102	95.3	8.1	95.3±16
		2.50	75.2~117	98.3	11	98.3±22
		9.00	94.6~116	103	7.1	103±14
67	1,4-二氧六环	0.50	82.0~124	98.7	12	98.7±24
		2.50	91.6~115	101	8.8	101±18
		9.00	87.3~119	102	9.4	102±19
68	三氯乙烯	0.50	82.0~108	97.3	8.4	97.3±17
		2.50	81.6~109	98.7	9.2	98.7±18
		9.00	86.9~106	99.3	6.4	99.3±13
69	2,2,4-三甲基戊烷	0.50	90.0~106	99.1	5.7	99.1±11
		2.50	89.2~112	101	7.9	101±16
		9.00	91.7~112	103	6.5	103±13
70	甲基丙烯酸甲酯	0.50	78.0~114	94.4	11	94.4±22
		2.50	91.2~116	101	8.4	101±17

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	加标回收率范围 (%)	$\bar{P}(\%)$	$S_{\bar{P}}(\%)$	$\bar{P} \pm 2S_{\bar{P}}(\%)$
		9.00	92.7~119	103	8.7	103±17
71	正庚烷	0.50	86.0~116	97.8	9.0	97.8±18
		2.50	91.6~114	102	7.9	102±16
		9.00	94.6~116	102	7.2	102±14
72	反式-1,3-二氯-1-丙烯	0.50	80.0~104	95.6	8.0	95.6±16
		2.50	96.0~117	103	7.4	103±15
		9.00	92.6~120	104	8.8	104±18
73	4-甲基-2-戊酮	0.50	86.0~118	99.1	9.4	99.1±19
		2.50	88.4~116	102	9.3	102±19
		9.00	90.1~112	102	7.0	102±14
74	甲基环己烷	0.50	88.0~106	97.1	7.6	97.1±15
		2.50	88.8~116	101	8.1	101±16
		9.00	91.6~109	101	6.0	101±12
75	顺式-1,3-二氯-1-丙烯	0.50	82.0~100	94.2	6.0	94.2±12
		2.50	92.0~116	100	7.1	100±14
		9.00	93.0~124	106	9.4	106±19
76	1,1,2-三氯乙烷	0.50	92.0~110	101	6.1	101±12
		2.50	79.2~108	98.9	8.7	98.9±17
		9.00	91.0~108	99.6	5.8	99.6±12
77	2,3,4-三甲基戊烷	0.50	86.0~106	96.4	7.5	96.4±15
		2.50	88.0~120	103	9.6	103±19
		9.00	91.1~113	102	7.1	102±14
78	甲苯	0.50	84.0~106	97.1	7.4	97.1±15
		2.50	82.8~117	99.9	10	99.9±20
		9.00	83.2~113	101	8.7	101±17
79	2-甲基庚烷	0.50	84.0~104	95.1	7.1	95.1±14
		2.50	87.2~119	102	9.2	102±18
		9.00	93.7~113	102	7.0	102±14
80	2-己酮	0.50	78.0~120	99.3	13	99.3±26
		2.50	90.4~118	102	9.8	102±20
		9.00	74.8~118	98.4	13	98.4±26
81	3-甲基庚烷	0.50	86.0~110	97.8	8.7	97.8±17
		2.50	84.4~117	101	10	101±20
		9.00	88.4~110	101	7.6	101±15
82	二溴一氯甲烷	0.50	80.0~106	93.6	8.4	93.6±17
		2.50	76.4~109	98.7	9.5	98.7±19
		9.00	93.4~112	103	6.0	103±12
83	己醛	0.50	72.0~124	95.1	16	95.1±32
		2.50	90.8~122	101	9.4	101±19
		9.00	78.2~126	102	15	102±30
84	1,2-二溴乙烷	0.50	86.0~106	96.7	6.8	96.7±14

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	加标回收率范围 (%)	$\bar{P}(\%)$	$S_{\bar{p}}(\%)$	$\bar{P} \pm 2S_{\bar{p}}(\%)$
		2.50	84.8~111	99.3	8.1	99.3±16
		9.00	91.0~110	101	6.7	101±13
85	正辛烷	0.50	80.0~108	95.1	10	95.1±20
		2.50	83.2~117	101	9.8	101±20
		9.00	87.9~110	101	7.9	101±16
86	四氯乙烯	0.50	88.0~104	97.6	5.3	97.6±11
		2.50	89.6~105	98.2	5.3	98.2±11
		9.00	88.6~105	98.3	5.8	98.3±12
87	氯苯	0.50	82.0~104	96.0	8.0	96.0±16
		2.50	80.0~108	98.4	8.6	98.4±17
		9.00	76.2~108	97.8	9.9	97.8±20
88	乙苯	0.50	80.0~104	93.1	8.6	93.1±17
		2.50	78.4~110	98.1	9.6	98.1±19
		9.00	74.8~110	98.9	11	98.9±22
89/90	间/对-二甲苯	1.00	88.0~108	98.3	6.0	98.3±12
		5.00	84.0~112	97.8	8.6	97.8±17
		18.0	79.4~111	99.7	9.7	99.7±19
91	三溴甲烷	0.50	82.0~104	92.4	8.4	92.4±17
		2.50	73.6~114	98.4	13	98.4±26
		9.00	93.8~120	106	8.3	106±17
92	苯乙烯	0.50	74.0~104	93.3	11	93.3±22
		2.50	76.8~110	96.7	12	96.7±24
		9.00	73.6~113	99.1	11	99.1±22
93	四氯乙烷	0.50	82.0~112	97.6	9.6	97.6±19
		2.50	68.0~108	96.0	12	96.0±24
		9.00	84.8~112	100	9.0	100±18
94	邻二甲苯	0.50	80.0~104	95.8	8.4	95.8±17
		2.50	76.8~120	98.6	13	98.6±26
		9.00	92.7~109	101	5.1	101±10
95	正壬烷	0.50	88.0~106	97.6	6.5	97.6±13
		2.50	81.6~114	99.3	10	99.3±20
		9.00	85.8~112	100	7.2	100±14
96	异丙苯	0.50	74.0~106	96.4	10	96.4±20
		2.50	73.6~111	97.7	11	97.7±22
		9.00	93.0~111	99.7	5.3	99.7±11
97	苯甲醛	0.50	74.0~126	102	19	102±38
		2.50	80.8~100	88.0	5.9	88.0±12
		9.00	87.4~127	101	12	101±24
98	正丙苯	0.50	74.0~104	93.1	12	93.1±24
		2.50	83.2~111	98.8	8.8	98.8±18
		9.00	93.8~113	101	5.7	101±11

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	加标回收率范围 (%)	$\bar{P}(\%)$	$S_{\bar{P}}(\%)$	$\bar{P} \pm 2S_{\bar{P}}(\%)$
99	间乙基甲苯	0.50	76.0~102	92.9	10	92.9±20
		2.50	80.4~111	99.5	8.8	99.5±18
		9.00	74.0~111	98.8	10	98.8±20
100	对乙基甲苯	0.50	84.0~108	97.8	8.3	97.8±17
		2.50	81.6~112	101	9.8	101±20
		9.00	94.6~111	101	5.2	101±10
101	1,3,5-三甲苯	0.50	88.0~104	98.4	6.5	98.4±13
		2.50	88.0~122	102	10	102±20
		9.00	97.3~111	104	5.6	104±11
102	邻乙基甲苯	0.50	74.0~104	95.3	12	95.3±24
		2.50	74.4~109	98.6	11	98.6±22
		9.00	94.6~116	101	6.2	101±12
103	1,2,4-三甲苯	0.50	78.0~104	95.8	8.3	95.8±17
		2.50	76.8~111	96.3	9.8	96.3±20
		9.00	94.2~117	103	7.5	103±15
104	癸烷	0.50	86.0~112	100	8.2	100±16
		2.50	78.0~117	101	12	101±24
		9.00	83.9~117	102	10	102±20
105	氯代甲苯	0.50	86.0~130	100	14	100±28
		2.50	72.0~124	93.7	15	93.7±30
		9.00	94.0~114	104	7.1	104±14
106	对二氯苯	0.50	88.0~102	97.8	4.9	97.8±9.8
		2.50	74.4~114	97.0	12	97.0±24
		9.00	73.4~118	101	13	101±26
107	间二氯苯	0.50	72.0~102	95.3	9.4	95.3±19
		2.50	72.4~126	99.5	15	99.5±30
		9.00	76.0~129	106	15	106±30
108	1,2,3-三甲苯	0.50	76.0~108	96.0	10	96.0±20
		2.50	77.6~112	97.0	10	97.0±20
		9.00	84.7~112	99.3	7.8	99.3±16
109	邻二氯苯	0.50	92.0~104	98.7	4.6	98.7±9.2
		2.50	78.4~115	97.8	11	97.8±22
		9.00	85.0~111	102	8.4	102±17
110	间二乙基苯	0.50	70.0~112	94.0	13	94.0±26
		2.50	70.8~116	97.3	12	97.3±24
		9.00	78.8~116	101	11	101±22
111	对二乙基苯	0.50	76.0~108	94.9	10	94.9±20
		2.50	77.2~119	98.2	12	98.2±24
		9.00	79.1~119	102	13	102±26
112	间甲基苯甲醛	0.50	76.0~120	93.3	15	93.3±30
		2.50	70.0~105	90.3	12	90.3±24

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	加标回收率范围 (%)	$\bar{P}(\%)$	$S_{\bar{P}}(\%)$	$\bar{P} \pm 2S_{\bar{P}}(\%)$
		9.00	77.3~118	99.4	14	99.4±28
113	十一烷	0.50	74.0~104	93.1	11	93.1±22
		2.50	78.0~126	98.4	14	98.4±28
		9.00	89.6~124	104	12	104±24
114	1,2,4-三氯苯	0.50	84.0~124	106	15	106±30
		2.50	69.6~100	87.2	8.9	87.2±18
		9.00	90.0~122	103	12	103±24
115	萘	0.50	80.0~114	95.6	13	95.6±26
		2.50	70.8~105	90.0	11	90.0±22
		9.00	77.1~127	105	18	105±36
116	十二烷	0.50	78.0~124	94.4	15	94.4±30
		2.50	77.6~119	97.3	13	97.3±26
		9.00	88.0~126	105	15	105±30
117	1,1,2,3,4,4-六氯-1,3-丁二烯	0.50	90.0~108	98.0	5.7	98.0±11
		2.50	85.6~105	97.1	5.5	97.1±11
		9.00	88.9~109	99.3	6.0	99.3±12

表 E.6 FID/MS (SCAN) 模式方法正确度 (实际样品加标)

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	本底浓度均值 (nmol/mol)	加标回收率范围 (%)	$\bar{P}(\%)$	$S_{\bar{P}}(\%)$	$\bar{P} \pm 2S_{\bar{P}}(\%)$
1	乙烯	2.00	1.04	71.0~114	95.7	12	95.7±24
		9.00	0.99	77.7~113	95.7	12	95.7±24
2	乙烷	2.00	1.70	72.5~118	92.4	15	92.4±30
		9.00	1.71	71.0~103	91.5	9.3	91.5±19
3	乙炔	2.00	1.57	73.5~116	91.9	15	91.9±30
		9.00	1.53	78.2~110	94.8	9.8	94.8±20
4	甲醛	10.0	3.52	77.3~116	96.1	13	96.1±26
		45.0	5.78	82.5~115	98.0	13	98.0±26
5	丙烯	2.00	0.37	86.0~102	94.6	6.2	94.6±12
		9.00	0.38	83.0~104	94.1	7.2	94.1±14
6	丙烷	2.00	1.36	71.5~108	86.2	11	86.2±22
		9.00	1.36	75.9~112	95.8	12	95.8±24
7	二氟二氯甲烷	2.00	0.40	76.0~106	93.6	8.7	93.6±17
		9.00	0.42	70.9~105	90.9	8.8	90.9±18
8	一氯甲烷	2.00	0.47	81.5~112	97.7	11	97.7±22
		9.00	0.55	71.2~110	94.4	11	94.4±22
9	异丁烷	2.00	0.55	76.5~110	89.9	11	89.9±22
		9.00	0.46	72.2~104	90.4	11	90.4±22
10	乙醛	2.00	1.25	75.0~118	85.6	13	85.6±26

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	本底浓度均值 (nmol/mol)	加标回收率范围 (%)	$\bar{P}(\%)$	$S_p(\%)$	$\bar{P} \pm 2S_p(\%)$
		9.00	1.29	75.3~117	98.4	16	98.4±32
11	1,1,2,2-四氟-1,2-二 氯乙烷	2.00	0.02	78.0~128	98.6	13	98.6±26
		9.00	0.02	89.2~124	97.2	11	97.2±22
12	氯乙烯	2.00	0.06	82.5~104	96.0	7.9	96.0±16
		9.00	0.06	90.8~111	98.2	7.4	98.2±15
13	正丁烯	2.00	0.06	70.5~108	90.8	12	90.8±24
		9.00	0.19	70.7~121	93.9	13	93.9±26
14	丁二烯	2.00	0.07	74.5~106	92.4	11	92.4±22
		9.00	0.13	78.0~99.1	93.1	6.1	93.1±12
15	正丁烷	2.00	0.52	79.0~101	89.1	7.9	89.1±16
		9.00	0.55	75.2~109	93.3	9.6	93.3±19
16	反式-2-丁烯	2.00	0.08	76.0~114	93.9	12	93.9±24
		9.00	0.08	71.2~124	96.1	13	96.1±26
17	一溴甲烷	2.00	0.01	81.5~105	94.8	7.8	94.8±16
		9.00	0.01	80.0~108	93.8	7.7	93.8±15
18	顺式-2-丁烯	2.00	ND	72.5~110	92.3	12	92.3±24
		9.00	0.09	70.7~126	92.3	16	92.3±32
19	氯乙烷	2.00	0.55	76.0~110	93.7	10	93.7±20
		9.00	0.57	79.1~112	93.1	9.1	93.1±18
20	丙烯醛	2.00	0.27	70.5~106	86.3	11	86.3±22
		9.00	0.29	75.4~109	93.6	12	93.6±24
21	丙酮	2.00	1.97	73.5~118	95.2	16	95.2±32
		9.00	1.92	71.3~116	93.7	16	93.7±32
22	异戊烷	2.00	0.40	70.5~104	87.1	12	87.1±24
		9.00	0.38	70.1~100	90.1	9.8	90.1±20
23	丙醛	2.00	1.23	74.0~104	90.9	9.9	90.9±20
		9.00	1.33	70.2~112	90.4	15	90.4±30
24	一氟三氯甲烷	2.00	0.16	91.0~114	99.4	7.0	99.4±14
		9.00	0.17	91.1~97.6	94.2	2.5	94.2±5.0
25	异丙醇	2.00	0.46	72.5~114	94.0	16	94.0±32
		9.00	0.44	85.9~124	97.9	12	97.9±24
26	1-戊烯	2.00	0.09	71.5~109	91.6	13	91.6±26
		9.00	0.09	78.9~115	96.0	9.6	96.0±19
27	正戊烷	2.00	0.29	72.5~118	92.1	13	92.1±26
		9.00	0.29	80.3~123	97.7	12	97.7±24
28	2-甲基-1,3-丁二烯	2.00	0.09	77.5~99.0	88.8	8.6	88.8±17
		9.00	0.14	84.2~128	97.8	12	97.8±24
29	反式-2-戊烯	2.00	0.05	74.0~106	91.7	11	91.7±22
		9.00	0.10	84.4~128	96.3	13	96.3±26
30	1,1-二氯乙烯	2.00	0.03	84.0~105	94.5	7.2	94.5±14
		9.00	0.06	91.7~131	98.2	13	98.2±26

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	本底浓度均值 (nmol/mol)	加标回收率范围 (%)	$\bar{P}(\%)$	$S_p(\%)$	$\bar{P} \pm 2S_p(\%)$
31	顺式-2-戊烯	2.00	0.05	73.0~105	89.8	11	89.8±22
		9.00	0.11	84.2~127	95.0	13	95.0±26
32	二氯甲烷	2.00	0.71	75.0~104	94.1	8.6	94.1±17
		9.00	0.72	82.4~124	100	15	100±30
33	二硫化碳	2.00	0.43	88.5~112	97.4	6.7	97.4±13
		9.00	0.45	91.0~124	99.2	10	99.2±20
34	1,2,2-三氟-1,1,2-三氯乙烷	2.00	0.05	92.0~106	97.4	4.4	97.4±8.8
		9.00	0.05	87.0~104	94.9	5.3	94.9±11
35	2,2-二甲基丁烷	2.00	0.03	76.0~106	91.1	10	91.1±20
		9.00	0.09	76.0~124	96.3	13	96.3±26
36	甲基丙烯醛	2.00	0.07	72.0~108	88.3	14	88.3±28
		9.00	0.08	80.8~126	98.0	13	98.0±26
37	反式-1,2-二氯乙烯	2.00	0.02	86.0~106	94.9	6.8	94.9±14
		9.00	0.03	91.0~120	98.1	8.8	98.1±18
38	1,1-二氯乙烷	2.00	0.04	77.0~112	96.3	9.9	96.3±20
		9.00	0.04	91.8~113	97.7	6.5	97.7±13
39	甲基叔丁基醚	2.00	0.07	80.0~106	91.7	9.0	91.7±18
		9.00	0.15	81.7~124	97.0	12	97.0±24
40	环戊烷	2.00	0.08	78.5~114	93.9	13	93.9±26
		9.00	0.08	88.7~120	97.0	9.5	97.0±19
41	2,3-二甲基丁烷	2.00	0.12	78.5~112	94.4	12	94.4±24
		9.00	0.10	87.6~101	95.0	4.2	95.0±8.4
42	乙酸乙烯酯	2.00	0.07	71.5~118	92.5	15	92.5±30
		9.00	0.13	71.7~131	97.2	17	97.2±34
43	2-甲基戊烷	2.00	0.13	80.0~114	93.0	11	93.0±22
		9.00	0.12	85.8~131	97.7	14	97.7±28
44	正丁醛	2.00	0.43	72.0~101	88.2	10	88.2±20
		9.00	0.56	79.8~114	95.4	12	95.4±24
45	2-丁酮	2.00	0.38	73.5~114	94.3	11	94.3±22
		9.00	0.39	80.7~112	95.7	10	95.7±20
46	3-甲基戊烷	2.00	0.08	75.0~104	92.2	9.8	92.2±20
		9.00	0.13	80.9~122	96.7	11	96.7±22
47	1-己烯	2.00	0.01	79.0~107	93.9	9.3	93.9±19
		9.00	0.11	87.9~126	98.0	11	98.0±22
48	顺式-1,2-二氯乙烯	2.00	0.08	77.0~106	92.7	9.0	92.7±18
		9.00	0.08	91.2~114	96.7	7.0	96.7±14
49	乙酸乙酯	2.00	0.67	78.0~103	88.7	8.8	88.7±18
		9.00	0.61	83.3~118	97.4	11	97.4±22
50	正己烷	2.00	0.12	81.5~102	93.4	6.9	93.4±14
		9.00	0.18	88.9~115	97.1	7.9	97.1±16
51	三氯甲烷	2.00	0.16	76.5~112	97.2	11	97.2±22

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	本底浓度均值 (nmol/mol)	加标回收率范围 (%)	$\bar{P}(\%)$	$S_p(\%)$	$\bar{P} \pm 2S_p(\%)$
		9.00	0.17	88.1~108	96.8	6.5	96.8±13
52	四氢呋喃	2.00	0.06	72.5~110	93.8	12	93.8±24
		9.00	0.06	84.7~129	97.9	13	97.9±26
53	丁烯醛	2.00	0.08	73.0~110	88.2	10	88.2±20
		9.00	0.13	75.2~125	96.2	15	96.2±30
54	1,2-二氯乙烷	2.00	0.53	85.5~122	98.5	11	98.5±22
		9.00	0.35	85.3~111	97.0	7.7	97.0±15
55	甲基环戊烷	2.00	0.09	72.0~114	97.4	14	97.4±28
		9.00	0.09	90.6~110	100	6.6	100±13
56	2,4-二甲基戊烷	2.00	0.02	89.0~117	98.3	9.2	98.3±18
		9.00	0.06	88.8~110	97.2	6.5	97.2±13
57	1,1,1-三氯乙烷	2.00	0.02	87.5~113	100	8.5	100±17
		9.00	0.02	90.7~105	97.7	4.2	97.7±8.4
58	苯	2.00	0.32	86.0~108	96.6	7.6	96.6±15
		9.00	0.35	84.7~106	96.9	8.3	96.9±17
59	四氯化碳	2.00	0.06	91.0~116	102	9.4	102±19
		9.00	0.08	88.9~110	99.2	6.3	99.2±13
60	环己烷	2.00	0.07	81.5~106	93.2	6.9	93.2±14
		9.00	0.11	86.6~102	95.3	5.3	95.3±11
61	2-甲基己烷	2.00	0.09	81.0~110	98.2	9.4	98.2±19
		9.00	0.08	87.1~108	98.9	7.1	98.9±14
62	2,3-二甲基戊烷	2.00	0.01	84.0~118	101	11	101±22
		9.00	0.06	85.1~113	97.5	7.6	97.5±15
63	戊醛	2.00	0.16	75.0~114	96.8	13	96.8±26
		9.00	0.17	75.9~126	99.8	15	99.8±30
64	3-甲基己烷	2.00	0.08	82.0~112	97.9	11	97.9±22
		9.00	0.07	82.0~107	96.6	7.5	96.6±15
65	1,2-二氯丙烷	2.00	0.16	87.5~112	96.6	8.9	96.6±18
		9.00	0.12	84.2~107	97.1	6.7	97.1±13
66	一溴二氯甲烷	2.00	0.01	86.5~120	103	12	103±24
		9.00	0.01	93.7~112	102	6.4	102±13
67	1,4-二氧六环	2.00	0.07	74.0~118	101	17	101±34
		9.00	0.11	82.3~118	99.4	13	99.4±26
68	三氯乙烯	2.00	0.02	86.5~113	101	10	101±20
		9.00	0.01	84.0~110	98.7	8.2	98.7±16
69	2,2,4-三甲基戊烷	2.00	0.09	78.5~117	98.5	13	98.5±26
		9.00	0.09	93.1~111	99.1	5.7	99.1±11
70	甲基丙烯酸甲酯	2.00	0.12	70.5~116	90.6	15	90.6±30
		9.00	0.05	86.6~119	101	11	101±22
71	正庚烷	2.00	0.04	89.0~110	99.7	7.7	99.7±15
		9.00	0.09	90.0~115	99.4	7.5	99.4±15

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	本底浓度均值 (nmol/mol)	加标回收率范围 (%)	$\bar{P}(\%)$	$S_p(\%)$	$\bar{P} \pm 2S_p(\%)$
72	反式-1,3-二氯-1-丙烯	2.00	0.03	82.5~122	96.9	12	96.9±24
		9.00	0.03	93.7~122	105	9.2	105±18
73	4-甲基-2-戊酮	2.00	0.07	72.5~120	93.9	16	93.9±32
		9.00	0.11	71.4~113	96.2	12	96.2±24
74	甲基环己烷	2.00	0.04	86.0~116	97.6	10	97.6±20
		9.00	0.11	87.8~110	98.3	7.9	98.3±16
75	顺式-1,3-二氯-1-丙烯	2.00	0.01	84.5~128	98.2	12	98.2±24
		9.00	0.01	94.1~129	106	11	106±22
76	1,1,2-三氯乙烷	2.00	0.03	89.0~111	102	8.3	102±17
		9.00	0.03	87.7~111	97.5	7.8	97.5±16
77	2,3,4-三甲基戊烷	2.00	0.07	70.0~112	96.1	13	96.1±26
		9.00	0.09	89.6~109	98.8	6.9	98.8±14
78	甲苯	2.00	0.73	81.0~130	97.3	14	97.3±28
		9.00	0.69	75.2~115	93.8	14	93.8±28
79	2-甲基庚烷	2.00	0.03	85.5~112	97.0	10	97.0±20
		9.00	0.03	91.8~124	99.9	10	99.9±20
80	2-己酮	2.00	0.09	71.0~124	95.3	16	95.3±32
		9.00	0.09	76.2~113	97.1	12	97.1±24
81	3-甲基庚烷	2.00	0.07	71.5~114	95.5	13	95.5±26
		9.00	0.07	82.6~107	96.0	8.3	96.0±17
82	二溴一氯甲烷	2.00	0.03	78.5~106	98.2	8.5	98.2±17
		9.00	0.03	85.0~110	99.6	8.7	99.6±17
83	己醛	2.00	0.12	78.5~120	92.2	16	92.2±32
		9.00	0.23	79.1~117	96.9	11	96.9±22
84	1,2-二溴乙烷	2.00	0.03	81.5~115	98.4	11	98.4±22
		9.00	0.04	86.6~108	98.5	8.2	98.5±16
85	正辛烷	2.00	0.08	73.0~112	94.7	12	94.7±24
		9.00	0.08	87.9~106	97.0	7.2	97.0±14
86	四氯乙烯	2.00	0.07	85.5~105	95.1	7.4	95.1±15
		9.00	0.06	81.4~109	96.3	8.1	96.3±16
87	氯苯	2.00	0.11	70.5~111	94.2	14	94.2±28
		9.00	0.11	73.3~103	94.1	9.6	94.1±19
88	乙苯	2.00	0.15	73.5~113	93.1	12	93.1±24
		9.00	0.23	74.0~113	95.3	11	95.3±22
89/90	间/对-二甲苯	4.00	0.26	78.8~116	101	12	101±24
		18.0	0.31	76.3~116	97.2	11	97.2±22
91	三溴甲烷	2.00	0.04	81.0~118	98.7	10	98.7±20
		9.00	0.05	91.4~127	106	12	106±24
92	苯乙烯	2.00	0.03	71.5~114	92.8	14	92.8±28
		9.00	0.10	82.1~113	96.8	9.5	96.8±19
93	四氯乙烷	2.00	0.02	80.0~130	103	15	103±30

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	本底浓度均值 (nmol/mol)	加标回收率范围 (%)	$\bar{P}(\%)$	$S_p(\%)$	$\bar{P} \pm 2S_p(\%)$
		9.00	0.02	89.1~117	98.7	9.7	98.7±19
94	邻二甲苯	2.00	0.19	70.5~110	95.9	14	95.9±28
		9.00	0.16	85.9~109	96.3	8.5	96.3±17
95	正壬烷	2.00	0.03	81.5~113	99.6	12	99.6±24
		9.00	0.09	88.3~110	97.6	8.0	97.6±16
96	异丙苯	2.00	0.09	70.5~110	92.1	16	92.1±32
		9.00	0.09	81.0~108	95.4	8.8	95.4±18
97	苯甲醛	2.00	0.25	69.5~109	81.3	13	81.3±26
		9.00	0.27	71.1~126	99.0	17	99.0±34
98	正丙苯	2.00	0.10	70.0~118	94.2	18	94.2±36
		9.00	0.10	70.8~111	96.8	12	96.8±24
99	间乙基甲苯	2.00	0.10	74.0~118	96.9	15	96.9±30
		9.00	0.10	75.3~111	94.8	12	94.8±24
100	对乙基甲苯	2.00	0.05	79.5~120	101	15	101±30
		9.00	0.09	71.3~107	94.8	10	94.8±20
101	1,3,5-三甲苯	2.00	0.09	79.5~115	96.1	13	96.1±26
		9.00	0.09	71.1~112	93.7	13	93.7±26
102	邻乙基甲苯	2.00	0.11	80.0~118	97.1	14	97.1±28
		9.00	0.11	71.4~105	95.4	10	95.4±20
103	1,2,4-三甲苯	2.00	0.10	79.0~119	99.1	14	99.1±28
		9.00	0.10	71.3~108	96.1	11	96.1±22
104	癸烷	2.00	0.10	72.5~126	96.1	20	96.1±40
		9.00	0.10	85.4~110	99.9	8.3	99.9±17
105	氯代甲苯	2.00	0.13	74.5~116	87.7	16	87.7±32
		9.00	0.05	80.8~130	103	14	103±28
106	对二氯苯	2.00	0.08	84.0~124	101	13	101±26
		9.00	0.08	72.9~119	98.0	15	98.0±30
107	间二氯苯	2.00	0.08	65.5~127	95.5	17	95.5±34
		9.00	0.03	74.4~121	101	14	101±28
108	1,2,3-三甲苯	2.00	0.08	72.5~120	94.3	17	94.3±34
		9.00	0.12	71.3~108	96.5	11	96.5±22
109	邻二氯苯	2.00	0.09	86.5~121	99.3	12	99.3±24
		9.00	0.09	70.9~111	97.8	13	97.8±26
110	间二乙基苯	2.00	0.01	81.5~126	99.2	14	99.2±28
		9.00	0.06	79.4~115	99.8	11	99.8±22
111	对二乙基苯	2.00	0.08	72.0~128	98.2	18	98.2±36
		9.00	0.12	80.7~127	103	15	103±30
112	间甲基苯甲醛	2.00	0.14	71.0~110	88.4	15	88.4±30
		9.00	0.20	80.7~126	103	17	103±34
113	十一烷	2.00	0.07	74.5~124	98.6	21	98.6±42
		9.00	0.11	90.2~121	104	11	104±22

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	本底浓度均值 (nmol/mol)	加标回收率范围 (%)	$\bar{P}(\%)$	$S_p(\%)$	$\bar{P} \pm 2S_p(\%)$
114	1,2,4-三氯苯	2.00	0.13	73.0~114	87.8	13	87.8±26
		9.00	0.19	82.6~118	101	12	101±24
115	萘	2.00	0.14	76.5~104	90.0	12	90.0±24
		9.00	0.14	73.2~116	102	14	102±28
116	十二烷	2.00	0.07	74.5~132	96.3	22	96.3±44
		9.00	0.15	90.8~132	105	15	105±30
117	1,1,2,3,4,4-六氯-1,3-丁二烯	2.00	0.03	88.5~128	102	13	102±26
		9.00	0.02	71.8~107	97.3	12	97.3±24

表 E.7 FID/MS (SIM) 模式方法正确度 (空白样品加标)

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	加标回收率范围 (%)	$\bar{P}(\%)$	$S_p(\%)$	$\bar{P} \pm 2S_p(\%)$
1	乙烯	0.20	80.0~110	102	9.7	102±19
		1.00	92.0~112	103	5.9	103±12
		9.00	92.6~112	100	5.5	100±11
2	乙烷	0.20	75.0~120	102	13	102±26
		1.00	91.0~114	101	7.3	101±15
		9.00	95.3~101	99.2	1.6	99.2±3.2
3	乙炔	0.20	75.0~115	97.8	13	97.8±26
		1.00	93.0~111	102	6.1	102±12
		9.00	95.8~106	99.7	2.7	99.7±5.4
4	甲醛	1.00	74.0~123	97.4	14	97.4±28
		5.00	86.0~116	101	8.9	101±18
		45.0	85.8~119	104	9.1	104±18
5	丙烯	0.20	90.0~110	103	6.6	103±13
		1.00	91.0~111	105	6.3	105±13
		9.00	96.4~107	101	3.7	101±7.4
6	丙烷	0.20	75.0~110	101	11	101±22
		1.00	99.0~114	106	5.8	106±12
		9.00	97.2~117	102	6.0	102±12
7	二氟二氯甲烷	0.20	70.0~125	105	17	105±34
		1.00	85.0~112	102	8.3	102±17
		9.00	87.7~113	101	9.2	101±18
8	一氯甲烷	0.20	80.0~120	101	13	101±26
		1.00	92.0~125	105	9.6	105±19
		9.00	87.3~109	98.4	8.0	98.4±16
9	异丁烷	0.20	90.0~130	102	12	102±24
		1.00	83.0~120	102	12	102±24
		9.00	88.3~117	98.5	9.7	98.5±19

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	加标回收率范围 (%)	$\bar{P}(\%)$	$S_P(\%)$	$\bar{P} \pm 2S_P(\%)$
10	乙醛	0.20	90.0~130	107	11	107±22
		1.00	84.0~122	102	15	102±30
		9.00	77.3~122	97.8	13	97.8±26
11	1,1,2,2-四氟-1,2-二氯乙烷	0.20	80.0~120	101	13	101±26
		1.00	91.0~122	104	9.4	104±19
		9.00	87.8~109	100	7.0	100±14
12	氯乙烯	0.20	80.0~115	100	9.7	100±19
		1.00	91.0~117	103	9.2	103±18
		9.00	89.7~120	102	9.1	102±18
13	正丁烯	0.20	75.0~115	101	11	101±22
		1.00	71.0~118	99.6	14	99.6±28
		9.00	88.3~119	100	9.9	100±20
14	丁二烯	0.20	75.0~115	98.3	13	98.3±26
		1.00	80.0~113	100	11	100±22
		9.00	94.8~119	103	8.0	103±16
15	正丁烷	0.20	75.0~115	102	11	102±22
		1.00	91.0~121	103	9.4	103±19
		9.00	86.3~118	99.9	10	99.9±20
16	反式-2-丁烯	0.20	90.0~110	102	6.6	102±13
		1.00	86.0~114	102	8.2	102±16
		9.00	91.2~120	102	9.5	102±19
17	一溴甲烷	0.20	75.0~125	102	13	102±26
		1.00	92.0~124	105	9.0	105±18
		9.00	88.6~113	102	8.4	102±17
18	顺式-2-丁烯	0.20	75.0~110	97.8	11	97.8±22
		1.00	88.0~112	101	7.9	101±16
		9.00	86.0~118	100	9.6	100±19
19	氯乙烷	0.20	75.0~125	102	13	102±26
		1.00	92.0~124	105	9.0	105±18
		9.00	88.4~112	100	7.4	100±15
20	丙烯醛	0.20	85.0~115	103	8.7	103±17
		1.00	88.0~116	99.8	11	99.8±22
		9.00	88.3~119	99.8	9.4	99.8±19
21	丙酮	0.20	80.0~115	105	11	105±22
		1.00	80.0~123	105	15	105±30
		9.00	74.0~104	93.3	11	93.3±22
22	异戊烷	0.20	90.0~115	106	8.1	106±16
		1.00	95.0~123	108	9.2	108±18
		9.00	88.8~120	98.5	9.5	98.5±19
23	丙醛	0.20	85.0~120	97.2	11	97.2±22
		1.00	93.0~125	105	12	105±24

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	加标回收率范围 (%)	$\bar{P}(\%)$	$S_P(\%)$	$\bar{P} \pm 2S_P(\%)$
		9.00	83.4~109	97.3	8.1	97.3±16
24	一氟三氯甲烷	0.20	75.0~125	103	14	103±28
		1.00	95.0~116	105	7.7	105±15
		9.00	88.1~120	101	9.0	101±18
25	异丙醇	0.20	90.0~125	108	11	108±22
		1.00	80.0~114	97.1	10	97.1±20
		9.00	72.7~119	95.0	16	95.0±32
26	1-戊烯	0.20	75.0~125	98.9	15	98.9±30
		1.00	90.0~111	101	7.4	101±15
		9.00	86.3~120	99.7	10	99.7±20
27	正戊烷	0.20	75.0~110	95.6	11	95.6±22
		1.00	94.0~109	101	4.3	101±8.6
		9.00	89.9~124	101	11	101±22
28	2-甲基-1,3-丁二烯	0.20	80.0~100	92.8	7.9	92.8±16
		1.00	91.0~108	98.4	5.1	98.4±10
		9.00	92.2~119	102	8.3	102±17
29	反式-2-戊烯	0.20	75.0~100	92.2	9.1	92.2±18
		1.00	92.0~109	102	5.2	102±10
		9.00	91.6~121	102	9.1	102±18
30	1,1-二氯乙烯	0.20	75.0~100	95.0	9.0	95.0±18
		1.00	93.0~108	103	4.9	103±9.8
		9.00	89.8~122	101	9.5	101±19
31	顺式-2-戊烯	0.20	75.0~105	93.9	9.3	93.9±19
		1.00	93.0~115	102	6.7	102±13
		9.00	91.3~121	100	8.5	100±17
32	二氯甲烷	0.20	80.0~115	104	11	104±22
		1.00	93.0~124	105	9.2	105±18
		9.00	88.9~106	99.0	5.9	99.0±12
33	二硫化碳	0.20	70.0~115	97.2	12	97.2±24
		1.00	92.0~105	100	3.9	100±7.8
		9.00	91.9~120	103	9.2	103±18
34	1,2,2-三氟-1,1,2-三氯乙烷	0.20	80.0~120	104	12	104±24
		1.00	93.0~124	106	9.8	106±20
		9.00	89.1~110	100	6.8	100±14
35	2,2-二甲基丁烷	0.20	75.0~110	94.4	12	94.4±24
		1.00	94.0~109	101	4.2	101±8.4
		9.00	92.0~127	102	11	102±22
36	甲基丙烯醛	0.20	75.0~105	93.3	11	93.3±22
		1.00	86.0~111	95.8	7.5	95.8±15
		9.00	81.0~120	101	13	101±26
37	反式-1,2-二氯乙烯	0.20	85.0~105	97.8	6.7	97.8±13

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	加标回收率范围 (%)	$\bar{P}(\%)$	$S_{\bar{P}}(\%)$	$\bar{P} \pm 2S_{\bar{P}}(\%)$
		1.00	94.0~107	102	4.4	102±8.8
		9.00	91.6~119	101	8.3	101±17
38	1,1-二氯乙烷	0.20	75.0~110	101	11	101±22
		1.00	94.0~124	105	8.7	105±17
		9.00	91.0~112	100	6.2	100±12
39	甲基叔丁基醚	0.20	75.0~100	95.0	9.0	95.0±18
		1.00	94.0~111	101	5.9	101±12
		9.00	89.8~121	101	11	101±22
40	环戊烷	0.20	80.0~100	95.0	7.9	95.0±16
		1.00	96.0~125	106	9.4	106±19
		9.00	90.9~114	102	8.4	102±17
41	2,3-二甲基丁烷	0.20	75.0~110	93.9	11	93.9±22
		1.00	90.0~114	100	7.0	100±14
		9.00	92.2~118	102	8.7	102±17
42	乙酸乙烯酯	0.20	80.0~120	99.4	14	99.4±28
		1.00	92.0~123	103	9.5	103±19
		9.00	88.7~126	106	12	106±24
43	2-甲基戊烷	0.20	70.0~105	92.8	13	92.8±26
		1.00	93.0~108	103	5.5	103±11
		9.00	92.3~116	100	7.4	100±15
44	正丁醛	0.20	75.0~115	101	13	101±26
		1.00	88.0~108	97.1	8.0	97.1±16
		9.00	86.4~118	102	11	102±22
45	2-丁酮	0.20	90.0~110	101	8.2	101±16
		1.00	85.0~114	100	9.7	100±19
		9.00	82.6~116	100	11	100±22
46	3-甲基戊烷	0.20	70.0~100	93.3	10	93.3±20
		1.00	94.0~108	99.9	3.9	99.9±7.8
		9.00	92.6~124	102	9.9	102±20
47	1-己烯	0.20	70.0~115	91.1	14	91.1±28
		1.00	90.0~107	98.1	4.6	98.1±9.2
		9.00	85.6~121	101	10	101±20
48	顺式-1,2-二氯乙烯	0.20	80.0~100	95.0	7.9	95.0±16
		1.00	93.0~107	102	4.4	102±8.8
		9.00	91.8~118	101	7.9	101±16
49	乙酸乙酯	0.20	90.0~105	97.8	5.1	97.8±10
		1.00	87.0~119	102	9.9	102±20
		9.00	93.6~126	103	11	103±22
50	正己烷	0.20	85.0~100	93.9	6.0	93.9±12
		1.00	86.0~112	101	7.0	101±14
		9.00	92.7~121	101	9.0	101±18

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	加标回收率范围 (%)	$\bar{P}(\%)$	$S_P(\%)$	$\bar{P} \pm 2S_P(\%)$
51	三氯甲烷	0.20	75.0~120	103	13	103±26
		1.00	92.0~112	103	6.2	103±12
		9.00	91.0~109	100	5.8	100±12
52	四氢呋喃	0.20	75.0~105	95.6	11	95.6±22
		1.00	82.0~110	95.1	8.6	95.1±17
		9.00	82.7~118	99.1	12	99.1±24
53	丁烯醛	0.20	75.0~115	96.7	13	96.7±26
		1.00	85.0~108	95.0	7.2	95.0±14
		9.00	80.7~118	98.8	11	98.8±22
54	1,2-二氯乙烷	0.20	95.0~120	106	8.5	106±17
		1.00	91.0~112	104	7.2	104±14
		9.00	89.0~111	98.9	7.5	98.9±15
55	甲基环戊烷	0.20	75.0~110	101	10	101±20
		1.00	92.0~112	103	6.1	103±12
		9.00	84.2~104	96.3	5.8	96.3±12
56	2,4-二甲基戊烷	0.20	75.0~120	100	13	100±26
		1.00	98.0~112	104	5.1	104±10
		9.00	81.4~108	96.2	7.5	96.2±15
57	1,1,1-三氯乙烷	0.20	95.0~130	107	13	107±26
		1.00	92.0~126	106	10	106±20
		9.00	95.0~112	99.9	5.2	99.9±10
58	苯	0.20	95.0~115	102	6.2	102±12
		1.00	91.0~112	103	6.9	103±14
		9.00	91.1~105	98.6	4.9	98.6±9.8
59	四氯化碳	0.20	95.0~130	107	13	107±26
		1.00	92.0~122	106	9.2	106±18
		9.00	97.3~117	102	6.2	102±12
60	环己烷	0.20	95.0~120	104	9.2	104±18
		1.00	92.0~105	100	4.4	100±8.8
		9.00	91.8~107	98.4	4.9	98.4±9.8
61	2-甲基己烷	0.20	95.0~110	101	4.2	101±8.4
		1.00	92.0~122	103	8.7	103±17
		9.00	85.0~110	98.0	6.9	98.0±14
62	2,3-二甲基戊烷	0.20	100~110	102	3.6	102±7.2
		1.00	92.0~111	101	6.1	101±12
		9.00	86.2~108	97.5	6.5	97.5±13
63	戊醛	0.20	75.0~110	97.2	12	97.2±24
		1.00	88.0~110	97.3	7.3	97.3±15
		9.00	85.9~121	101	13	101±26
64	3-甲基己烷	0.20	90.0~110	98.3	6.1	98.3±12
		1.00	92.0~122	104	9.6	104±19

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	加标回收率范围 (%)	$\bar{P}(\%)$	$S_P(\%)$	$\bar{P} \pm 2S_P(\%)$
		9.00	88.6~106	97.5	5.3	97.5±11
65	1,2-二氯丙烷	0.20	95.0~125	107	10	107±20
		1.00	92.0~126	105	10	105±20
		9.00	92.1~106	98.2	4.0	98.2±8.0
66	一溴二氯甲烷	0.20	95.0~115	104	7.4	104±15
		1.00	91.0~115	104	7.7	104±15
		9.00	97.3~120	102	7.2	102±14
67	1,4-二氧六环	0.20	85.0~110	98.3	8.7	98.3±17
		1.00	91.0~115	97.8	7.5	97.8±15
		9.00	81.3~117	97.5	11	97.5±22
68	三氯乙烯	0.20	90.0~115	103	8.7	103±17
		1.00	82.0~115	103	9.8	103±20
		9.00	92.2~107	99.6	5.2	99.6±10
69	2,2,4-三甲基戊烷	0.20	85.0~105	98.3	5.6	98.3±11
		1.00	90.0~125	104	9.6	104±19
		9.00	92.9~107	98.4	4.8	98.4±9.6
70	甲基丙烯酸甲酯	0.20	70.0~105	96.1	10	96.1±20
		1.00	92.0~110	100	5.8	100±12
		9.00	94.7~122	103	9.7	103±19
71	正庚烷	0.20	80.0~115	97.2	11	97.2±22
		1.00	92.0~122	103	9.7	103±19
		9.00	85.0~108	98.5	6.8	98.5±14
72	反式-1,3-二氯-1-丙烯	0.20	70.0~110	95.0	13	95.0±26
		1.00	90.0~111	100	7.1	100±14
		9.00	91.0~126	105	11	105±22
73	4-甲基-2-戊酮	0.20	75.0~120	95.6	14	95.6±28
		1.00	88.0~114	99.8	8.3	99.8±17
		9.00	87.6~118	99.2	9.1	99.2±18
74	甲基环己烷	0.20	75.0~115	97.2	11	97.2±22
		1.00	92.0~120	103	8.4	103±17
		9.00	91.9~107	98.9	5.4	98.9±11
75	顺式-1,3-二氯-1-丙烯	0.20	75.0~110	94.4	12	94.4±24
		1.00	79.0~115	97.9	10	97.9±20
		9.00	95.2~129	108	12	108±24
76	1,1,2-三氯乙烷	0.20	70.0~125	104	15	104±30
		1.00	93.0~114	104	6.9	104±14
		9.00	90.3~106	99.0	5.3	99.0±11
77	2,3,4-三甲基戊烷	0.20	75.0~110	93.3	14	93.3±28
		1.00	90.0~120	102	9.7	102±19
		9.00	83.4~116	99.4	9.4	99.4±19
78	甲苯	0.20	70.0~105	95.0	11	95.0±22

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	加标回收率范围 (%)	$\bar{P}(\%)$	$S_P(\%)$	$\bar{P} \pm 2S_P(\%)$
		1.00	89.0~122	102	9.1	102±18
		9.00	87.4~112	99.5	7.7	99.5±15
79	2-甲基庚烷	0.20	70.0~110	93.3	13	93.3±26
		1.00	89.0~127	102	11	102±22
		9.00	91.8~113	101	7.1	101±14
80	2-己酮	0.20	80.0~110	98.3	11	98.3±22
		1.00	83.0~117	101	11	101±22
		9.00	91.6~110	100	5.1	100±10
81	3-甲基庚烷	0.20	70.0~110	93.3	16	93.3±32
		1.00	90.0~119	102	8.8	102±18
		9.00	87.7~114	99.8	7.8	99.8±16
82	二溴一氯甲烷	0.20	75.0~110	96.1	12	96.1±24
		1.00	76.0~112	102	11	102±22
		9.00	96.7~118	103	6.3	103±13
83	己醛	0.20	70.0~125	97.8	16	97.8±32
		1.00	91.0~113	101	8.8	101±18
		9.00	77.8~128	100	16	100±32
84	1,2-二溴乙烷	0.20	85.0~110	100	7.5	100±15
		1.00	92.0~119	104	8.2	104±16
		9.00	93.7~113	101	6.9	101±14
85	正辛烷	0.20	70.0~115	92.2	15	92.2±30
		1.00	84.0~109	97.4	8.6	97.4±17
		9.00	81.2~113	99.3	9.7	99.3±19
86	四氯乙烯	0.20	85.0~115	102	9.7	102±19
		1.00	94.0~123	105	8.9	105±18
		9.00	88.8~109	99.4	6.6	99.4±13
87	氯苯	0.20	85.0~115	103	8.3	103±17
		1.00	91.0~125	104	11	104±22
		9.00	84.6~108	99.0	8.4	99.0±17
88	乙苯	0.20	75.0~110	93.9	11	93.9±22
		1.00	88.0~115	99.1	9.0	99.1±18
		9.00	84.2~122	101	12	101±24
89/90	间/对-二甲苯	0.40	87.5~108	99.4	6.1	99.4±12
		2.00	82.0~107	98.7	8.2	98.7±16
		18.0	85.6~116	102	9.0	102±18
91	三溴甲烷	0.20	75.0~105	88.9	12	88.9±24
		1.00	86.0~112	101	8.3	101±17
		9.00	99.6~120	107	7.8	107±16
92	苯乙烯	0.20	70.0~110	92.8	13	92.8±26
		1.00	80.0~105	93.7	7.1	93.7±14
		9.00	87.9~118	101	9.9	101±20

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	加标回收率范围 (%)	$\bar{P}(\%)$	$S_P(\%)$	$\bar{P} \pm 2S_P(\%)$
93	四氯乙烷	0.20	80.0~120	103	13	103±26
		1.00	87.0~126	105	12	105±24
		9.00	93.9~116	100	6.9	100±14
94	邻二甲苯	0.20	80.0~100	95.0	7.9	95.0±16
		1.00	79.0~126	101	13	101±26
		9.00	82.3~108	97.1	8.5	97.1±17
95	正壬烷	0.20	80.0~110	93.3	9.4	93.3±19
		1.00	79.0~125	101	13	101±26
		9.00	89.3~106	99.4	5.9	99.4±12
96	异丙苯	0.20	75.0~105	96.7	9.4	96.7±19
		1.00	86.0~127	102	12	102±24
		9.00	80.3~111	96.4	9.3	96.4±19
97	苯甲醛	0.20	90.0~120	108	11	108±22
		1.00	82.0~104	91.6	7.8	91.6±16
		9.00	87.4~109	99.3	7.1	99.3±14
98	正丙苯	0.20	70.0~110	90.6	15	90.6±30
		1.00	83.0~127	99.9	13	99.9±26
		9.00	83.6~120	99.7	11	99.7±22
99	间乙基甲苯	0.20	70.0~110	92.2	13	92.2±26
		1.00	79.0~122	101	13	101±26
		9.00	86.0~120	100	10	100±20
100	对乙基甲苯	0.20	70.0~120	93.3	15	93.3±30
		1.00	82.0~121	101	13	101±26
		9.00	85.4~117	100	10	100±20
101	1,3,5-三甲苯	0.20	75.0~115	93.3	13	93.3±26
		1.00	84.0~128	99.8	14	99.8±28
		9.00	82.9~111	98.2	9.0	98.2±18
102	邻乙基甲苯	0.20	70.0~120	94.4	15	94.4±30
		1.00	88.0~125	103	11	103±22
		9.00	85.0~118	100	10	100±20
103	1,2,4-三甲苯	0.20	75.0~110	94.4	11	94.4±22
		1.00	82.0~118	98.0	11	98.0±22
		9.00	86.2~111	99.8	8.3	99.8±17
104	癸烷	0.20	85.0~110	93.9	9.3	93.9±19
		1.00	90.0~122	105	11	105±22
		9.00	90.9~111	99.9	6.2	99.9±12
105	氯代甲苯	0.20	75.0~110	96.7	13	96.7±26
		1.00	79.0~107	92.6	9.3	92.6±19
		9.00	87.0~121	99.7	9.3	99.7±19
106	对二氯苯	0.20	80.0~110	95.0	10	95.0±20
		1.00	85.0~118	101	11	101±22

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	加标回收率范围 (%)	$\bar{P}(\%)$	$S_{\bar{P}}(\%)$	$\bar{P} \pm 2S_{\bar{P}}(\%)$
		9.00	89.4~121	103	11	103±22
107	间二氯苯	0.20	75.0~110	95.0	12	95.0±24
		1.00	85.0~118	99.1	11	99.1±22
		9.00	94.0~128	104	10	104±20
108	1,2,3-三甲苯	0.20	75.0~115	93.9	11	93.9±22
		1.00	86.0~118	98.9	11	98.9±22
		9.00	87.9~122	101	10	101±20
109	邻二氯苯	0.20	80.0~105	93.9	8.9	93.9±18
		1.00	83.0~115	102	12	102±24
		9.00	87.4~122	103	10	103±20
110	间二乙基苯	0.20	80.0~110	92.2	11	92.2±22
		1.00	88.0~115	98.1	9.7	98.1±19
		9.00	93.2~120	103	7.8	103±16
111	对二乙基苯	0.20	75.0~120	97.2	14	97.2±28
		1.00	77.0~117	97.2	12	97.2±24
		9.00	91.9~119	102	7.6	102±15
112	间甲基苯甲醛	0.20	70.0~115	91.7	17	91.7±34
		1.00	82.0~132	99.7	15	99.7±30
		9.00	90.6~120	103	8.0	103±16
113	十一烷	0.20	75.0~115	92.8	14	92.8±28
		1.00	76.0~110	98.0	11	98.0±22
		9.00	86.3~124	104	10	104±20
114	1,2,4-三氯苯	0.20	80.0~125	104	15	104±30
		1.00	81.0~119	93.0	13	93.0±26
		9.00	100~118	106	6.0	106±12
115	萘	0.20	80.0~125	100	12	100±24
		1.00	77.0~119	95.0	14	95.0±28
		9.00	100~126	109	9.0	109±18
116	十二烷	0.20	80.0~115	99.4	15	99.4±30
		1.00	77.0~112	96.1	11	96.1±22
		9.00	82.6~120	105	11	105±22
117	1,1,2,3,4,4-六氯-1,3-丁二烯	0.20	75.0~125	96.7	13	96.7±26
		1.00	90.0~125	106	14	106±28
		9.00	87.9~114	102	8.4	102±17

表 E.8 FID/MS (SIM) 模式方法正确度 (实际样品加标)

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	本底浓度均值 (nmol/mol)	加标回收率范围 (%)	$\bar{P}(\%)$	$S_{\bar{P}}(\%)$	$\bar{P} \pm 2S_{\bar{P}}(\%)$
1	乙烯	2.00	1.78	68.0~126	91.0	19	91.0±38
		9.00	1.61	69.1~119	94.1	15	94.1±30

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	本底浓度均值 (nmol/mol)	加标回收率范围 (%)	$\bar{P}(\%)$	$S_P(\%)$	$\bar{P} \pm 2S_P(\%)$
2	乙烷	2.00	2.88	76.0~118	94.2	15	94.2±30
		9.00	2.77	84.9~107	91.3	8.0	91.3±16
3	乙炔	2.00	2.86	74.0~121	94.7	14	94.7±28
		9.00	2.42	76.2~110	94.1	11	94.1±22
4	甲醛	10.0	5.76	72.0~116	94.7	15	94.7±30
		45.0	5.99	71.8~118	91.7	14	91.7±28
5	丙烯	2.00	0.57	81.0~126	96.3	13	96.3±26
		9.00	0.59	76.6~111	94.8	10	94.8±20
6	丙烷	2.00	3.13	76.0~128	93.2	16	93.2±32
		9.00	2.83	83.8~111	96.8	9.8	96.8±20
7	二氟二氯甲烷	2.00	0.40	77.5~112	96.8	12	96.8±24
		9.00	0.38	87.7~110	95.9	8.7	95.9±17
8	一氯甲烷	2.00	0.77	77.0~129	94.9	17	94.9±34
		9.00	0.77	88.1~113	97.6	9.3	97.6±19
9	异丁烷	2.00	0.89	70.0~132	92.3	19	92.3±38
		9.00	0.80	70.8~111	93.1	13	93.1±26
10	乙醛	2.00	1.50	70.0~135	102	22	102±44
		9.00	1.44	72.6~117	96.6	16	96.6±32
11	1,1,2,2-四氟-1,2-二氯乙烷	2.00	0.02	81.0~130	101	15	101±30
		9.00	0.02	85.6~129	100	15	100±30
12	氯乙烯	2.00	0.09	74.0~107	92.7	9.9	92.7±20
		9.00	0.08	88.2~120	101	11	101±22
13	正丁烯	2.00	0.10	71.5~110	87.4	13	87.4±26
		9.00	0.14	79.1~115	95.8	12	95.8±24
14	丁二烯	2.00	0.10	75.0~105	88.8	9.3	88.8±19
		9.00	0.16	72.1~118	95.3	12	95.3±24
15	正丁烷	2.00	0.88	68.0~126	89.4	18	89.4±36
		9.00	0.90	73.7~112	93.9	12	93.9±24
16	反式-2-丁烯	2.00	0.09	71.0~106	90.5	11	90.5±22
		9.00	0.14	76.0~118	98.8	13	98.8±26
17	一溴甲烷	2.00	0.01	74.5~112	94.1	10	94.1±20
		9.00	0.01	84.1~120	97.5	13	97.5±26
18	顺式-2-丁烯	2.00	0.03	73.0~111	93.5	12	93.5±24
		9.00	0.09	78.9~124	98.0	14	98.0±28
19	氯乙烷	2.00	0.58	73.5~125	97.3	15	97.3±30
		9.00	0.57	83.4~116	96.1	12	96.1±24
20	丙烯醛	2.00	0.34	71.0~132	89.6	19	89.6±38
		9.00	0.33	68.6~130	95.4	20	95.4±40
21	丙酮	2.00	2.01	71.5~121	94.8	18	94.8±36
		9.00	2.12	69.7~103	88.6	13	88.6±26
22	异戊烷	2.00	0.71	78.5~124	93.3	15	93.3±30

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	本底浓度均值 (nmol/mol)	加标回收率范围 (%)	$\bar{P}(\%)$	$S_p(\%)$	$\bar{P} \pm 2S_p(\%)$
		9.00	0.54	71.4~126	94.5	16	94.5 ± 32
23	丙醛	2.00	0.82	73.0~116	88.4	14	88.4 ± 28
		9.00	1.10	73.7~116	90.0	15	90.0 ± 30
24	一氟三氯甲烷	2.00	0.18	86.5~128	102	14	102 ± 28
		9.00	0.17	86.8~125	98.9	11	98.9 ± 22
25	异丙醇	2.00	0.47	73.5~120	93.7	19	93.7 ± 38
		9.00	0.44	73.2~122	97.5	16	97.5 ± 32
26	1-戊烯	2.00	0.23	72.0~125	93.1	16	93.1 ± 32
		9.00	0.22	88.0~129	99.4	14	99.4 ± 28
27	正戊烷	2.00	0.69	81.0~126	93.5	15	93.5 ± 30
		9.00	0.55	70.3~130	96.9	16	96.9 ± 32
28	2-甲基-1,3-丁二烯	2.00	0.08	70.0~118	89.8	14	89.8 ± 28
		9.00	0.13	78.2~125	98.2	13	98.2 ± 26
29	反式-2-戊烯	2.00	0.05	74.5~120	92.3	15	92.3 ± 30
		9.00	0.10	79.7~131	98.3	15	98.3 ± 30
30	1,1-二氯乙烯	2.00	0.03	82.0~123	95.3	12	95.3 ± 24
		9.00	0.06	87.2~129	99.9	13	99.9 ± 26
31	顺式-2-戊烯	2.00	0.05	72.0~116	90.1	14	90.1 ± 28
		9.00	0.10	78.0~131	97.1	15	97.1 ± 30
32	二氯甲烷	2.00	1.30	77.5~122	97.2	15	97.2 ± 30
		9.00	1.27	75.8~127	97.3	15	97.3 ± 30
33	二硫化碳	2.00	0.49	73.0~112	94.0	12	94.0 ± 24
		9.00	0.53	90.7~123	101	11	101 ± 22
34	1,2,2-三氟-1,1,2-三氯乙烷	2.00	0.05	84.0~112	98.3	10	98.3 ± 20
		9.00	0.05	87.6~109	97.4	7.1	97.4 ± 14
35	2,2-二甲基丁烷	2.00	0.05	77.5~116	93.2	12	93.2 ± 24
		9.00	0.10	84.0~122	98.7	11	98.7 ± 22
36	甲基丙烯醛	2.00	0.05	76.0~115	88.9	13	88.9 ± 26
		9.00	0.09	80.3~131	99.1	17	99.1 ± 34
37	反式-1,2-二氯乙烯	2.00	0.03	85.0~112	94.7	8.8	94.7 ± 18
		9.00	0.03	86.7~120	99.5	10	99.5 ± 20
38	1,1-二氯乙烷	2.00	0.05	85.5~114	97.3	9.5	97.3 ± 19
		9.00	0.03	88.9~110	98.1	7.2	98.1 ± 14
39	甲基叔丁基醚	2.00	0.13	79.0~116	91.4	14	91.4 ± 28
		9.00	0.20	77.0~122	96.6	15	96.6 ± 30
40	环戊烷	2.00	0.11	70.5~114	93.3	13	93.3 ± 26
		9.00	0.11	80.7~113	96.9	10	96.9 ± 20
41	2,3-二甲基丁烷	2.00	0.28	73.5~112	91.2	13	91.2 ± 26
		9.00	0.27	72.0~121	95.1	14	95.1 ± 28
42	乙酸乙烯酯	2.00	0.12	71.5~125	90.6	16	90.6 ± 32
		9.00	0.19	70.8~130	101	18	101 ± 36

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	本底浓度均值 (nmol/mol)	加标回收率范围 (%)	$\bar{P}(\%)$	$S_P(\%)$	$\bar{P} \pm 2S_P(\%)$
43	2-甲基戊烷	2.00	0.18	76.5~118	93.3	12	93.3±24
		9.00	0.16	89.4~114	98.6	8.6	98.6±17
44	正丁醛	2.00	0.34	77.5~103	89.0	11	89.0±22
		9.00	0.38	79.6~115	94.9	13	94.9±26
45	2-丁酮	2.00	0.55	71.0~110	92.0	14	92.0±28
		9.00	0.51	79.4~110	95.8	12	95.8±24
46	3-甲基戊烷	2.00	0.12	80.0~120	92.2	13	92.2±26
		9.00	0.16	74.7~124	97.6	13	97.6±26
47	1-己烯	2.00	0.05	76.0~113	91.4	12	91.4±24
		9.00	0.13	82.0~126	99.3	12	99.3±24
48	顺式-1,2-二氯乙烯	2.00	0.12	75.5~102	90.9	8.4	90.9±17
		9.00	0.10	87.2~114	98.9	8.8	98.9±18
49	乙酸乙酯	2.00	1.03	76.0~122	91.2	16	91.2±32
		9.00	0.84	87.7~116	97.0	11	97.0±22
50	正己烷	2.00	0.18	75.0~116	93.4	13	93.4±26
		9.00	0.26	83.1~118	97.0	10	97.0±20
51	三氯甲烷	2.00	0.24	81.5~118	97.8	14	97.8±28
		9.00	0.25	88.9~108	99.1	8.1	99.1±16
52	四氢呋喃	2.00	0.07	70.0~102	86.8	12	86.8±24
		9.00	0.06	74.1~113	96.5	13	96.5±26
53	丁烯醛	2.00	0.11	73.0~111	84.0	14	84.0±28
		9.00	0.19	72.3~124	96.3	19	96.3±38
54	1,2-二氯乙烷	2.00	0.59	83.0~124	99.3	17	99.3±34
		9.00	0.58	84.7~109	97.6	8.9	97.6±18
55	甲基环戊烷	2.00	0.16	71.0~106	88.2	12	88.2±24
		9.00	0.15	84.2~109	93.0	7.9	93.0±16
56	2,4-二甲基戊烷	2.00	0.05	79.5~106	96.1	8.6	96.1±17
		9.00	0.10	76.2~110	96.1	9.1	96.1±18
57	1,1,1-三氯乙烷	2.00	0.02	80.0~115	99.4	11	99.4±22
		9.00	0.02	91.1~108	99.4	5.2	99.4±10
58	苯	2.00	0.64	79.0~106	92.9	11	92.9±22
		9.00	0.57	86.2~109	95.7	7.7	95.7±15
59	四氯化碳	2.00	0.08	84.0~114	102	11	102±22
		9.00	0.08	95.1~108	102	4.8	102±9.6
60	环己烷	2.00	0.08	80.0~102	93.4	7.0	93.4±14
		9.00	0.14	85.1~109	96.2	6.7	96.2±13
61	2-甲基己烷	2.00	0.10	73.0~115	96.3	12	96.3±24
		9.00	0.10	87.6~106	97.1	6.5	97.1±13
62	2,3-二甲基戊烷	2.00	0.03	77.5~126	98.6	15	98.6±30
		9.00	0.07	83.1~105	95.9	6.6	95.9±13
63	戊醛	2.00	0.22	78.5~111	91.6	11	91.6±22

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	本底浓度均值 (nmol/mol)	加标回收率范围 (%)	$\bar{P}(\%)$	$S_P(\%)$	$\bar{P} \pm 2S_P(\%)$
		9.00	0.24	80.2~118	95.9	14	95.9±28
64	3-甲基己烷	2.00	0.10	80.0~122	97.1	13	97.1±26
		9.00	0.09	87.7~105	95.7	6.2	95.7±12
65	1,2-二氯丙烷	2.00	0.32	82.0~119	94.5	13	94.5±26
		9.00	0.22	88.4~105	96.8	6.0	96.8±12
66	一溴二氯甲烷	2.00	0.01	83.0~124	102	13	102±26
		9.00	0.01	91.6~113	103	6.5	103±13
67	1,4-二氧六环	2.00	0.10	69.0~112	91.8	19	91.8±38
		9.00	0.19	67.9~104	92.2	14	92.2±28
68	三氯乙烯	2.00	0.03	73.0~118	99.7	15	99.7±30
		9.00	0.03	90.7~110	99.2	6.6	99.2±13
69	2,2,4-三甲基戊烷	2.00	0.09	78.0~126	98.1	15	98.1±30
		9.00	0.08	88.4~105	97.4	5.7	97.4±11
70	甲基丙烯酸甲酯	2.00	0.13	80.0~113	93.9	11	93.9±22
		9.00	0.06	91.9~117	102	8.7	102±17
71	正庚烷	2.00	0.06	83.0~116	97.8	11	97.8±22
		9.00	0.11	87.3~107	97.3	7.1	97.3±14
72	反式-1,3-二氯-1-丙烯	2.00	0.02	80.5~117	97.6	12	97.6±24
		9.00	0.02	96.7~118	106	7.4	106±15
73	4-甲基-2-戊酮	2.00	0.08	72.0~112	86.3	15	86.3±30
		9.00	0.13	72.9~106	91.7	12	91.7±24
74	甲基环己烷	2.00	0.07	77.5~114	94.2	11	94.2±22
		9.00	0.13	86.8~110	97.8	7.7	97.8±15
75	顺式-1,3-二氯-1-丙烯	2.00	0.02	79.0~122	98.2	12	98.2±24
		9.00	0.02	95.8~129	108	11	108±22
76	1,1,2-三氯乙烷	2.00	0.04	82.0~120	100	12	100±24
		9.00	0.05	90.6~113	99.8	8.0	99.8±16
77	2,3,4-三甲基戊烷	2.00	0.09	85.5~116	99.3	9.7	99.3±19
		9.00	0.09	83.9~113	98.5	8.7	98.5±17
78	甲苯	2.00	1.12	74.5~123	93.8	17	93.8±34
		9.00	0.88	81.1~115	94.4	12	94.4±24
79	2-甲基庚烷	2.00	0.03	82.5~121	96.2	12	96.2±24
		9.00	0.03	92.8~108	99.1	6.4	99.1±13
80	2-己酮	2.00	0.10	68.0~124	88.5	19	88.5±38
		9.00	0.13	67.9~122	90.7	19	90.7±38
81	3-甲基庚烷	2.00	0.08	83.5~124	102	13	102±26
		9.00	0.08	88.4~122	101	12	101±24
82	二溴一氯甲烷	2.00	0.03	73.0~110	95.8	11	95.8±22
		9.00	0.03	82.8~122	102	11	102±22
83	己醛	2.00	0.43	71.5~118	89.3	16	89.3±32
		9.00	0.61	69.6~117	93.9	16	93.9±32

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	本底浓度均值 (nmol/mol)	加标回收率范围 (%)	$\bar{P}(\%)$	$S_P(\%)$	$\bar{P} \pm 2S_P(\%)$
84	1,2-二溴乙烷	2.00	0.04	81.5~115	98.6	11	98.6±22
		9.00	0.04	93.1~116	102	8.3	102±17
85	正辛烷	2.00	0.08	76.5~112	97.9	12	97.9±24
		9.00	0.08	87.9~118	98.7	10	98.7±20
86	四氯乙烯	2.00	0.08	76.5~111	94.2	12	94.2±24
		9.00	0.08	89.8~112	99.8	8.3	99.8±17
87	氯苯	2.00	0.12	70.0~114	92.1	16	92.1±32
		9.00	0.12	76.4~110	95.8	12	95.8±24
88	乙苯	2.00	0.18	74.0~120	93.6	18	93.6±36
		9.00	0.27	73.8~123	96.3	15	96.3±30
89/90	间/对-二甲苯	4.00	0.38	71.8~124	100	18	100±36
		18.0	0.44	74.7~112	97.4	12	97.4±24
91	三溴甲烷	2.00	0.03	78.0~115	96.5	10	96.5±20
		9.00	0.07	90.2~130	109	13	109±26
92	苯乙烯	2.00	0.04	70.5~112	90.2	14	90.2±28
		9.00	0.11	73.0~128	97.7	17	97.7±34
93	四氯乙烷	2.00	0.02	81.5~128	102	15	102±30
		9.00	0.02	82.8~120	99.3	11	99.3±22
94	邻二甲苯	2.00	0.22	72.5~122	92.8	18	92.8±36
		9.00	0.19	70.1~108	93.1	14	93.1±28
95	正壬烷	2.00	0.04	77.5~120	96.6	13	96.6±26
		9.00	0.11	84.3~109	97.5	8.8	97.5±18
96	异丙苯	2.00	0.10	73.5~116	90.6	15	90.6±30
		9.00	0.10	71.6~111	92.9	13	92.9±26
97	苯甲醛	2.00	0.23	70.5~88.0	76.2	5.8	76.2±12
		9.00	0.27	69.1~124	96.2	20	96.2±40
98	正丙苯	2.00	0.10	71.5~118	90.5	19	90.5±38
		9.00	0.09	72.7~118	95.1	14	95.1±28
99	间乙基甲苯	2.00	0.11	71.0~114	90.9	18	90.9±36
		9.00	0.11	74.2~118	93.9	15	93.9±30
100	对乙基甲苯	2.00	0.07	70.5~115	93.5	19	93.5±38
		9.00	0.10	73.8~114	94.5	13	94.5±26
101	1,3,5-三甲苯	2.00	0.08	72.5~116	89.0	17	89.0±34
		9.00	0.08	71.7~111	93.0	14	93.0±28
102	邻乙基甲苯	2.00	0.11	72.5~114	94.1	15	94.1±30
		9.00	0.11	72.2~115	94.9	14	94.9±28
103	1,2,4-三甲苯	2.00	0.12	71.0~116	93.3	18	93.3±36
		9.00	0.11	72.6~116	95.7	14	95.7±28
104	癸烷	2.00	0.10	75.0~124	97.2	17	97.2±34
		9.00	0.10	85.2~114	99.3	9.0	99.3±18
105	氯代甲苯	2.00	0.12	73.5~94.0	82.3	5.9	82.3±12

序号	化合物名称	加标浓度 (nmol/mol)	本底浓度均值 (nmol/mol)	加标回收率范围 (%)	$\bar{P}(\%)$	$S_p(\%)$	$\bar{P} \pm 2S_p(\%)$
		9.00	0.06	76.7~121	98.4	17	98.4 ± 34
106	对二氯苯	2.00	0.07	71.0~123	96.2	19	96.2 ± 38
		9.00	0.07	76.6~131	99.6	18	99.6 ± 36
107	间二氯苯	2.00	0.08	70.0~114	93.2	15	93.2 ± 30
		9.00	0.02	79.0~123	102	16	102 ± 32
108	1,2,3-三甲苯	2.00	0.09	70.0~116	89.6	19	89.6 ± 38
		9.00	0.12	74.0~122	96.7	15	96.7 ± 30
109	邻二氯苯	2.00	0.07	68.5~112	94.3	16	94.3 ± 32
		9.00	0.07	73.2~118	98.6	15	98.6 ± 30
110	间二乙基苯	2.00	0.04	73.0~114	90.7	17	90.7 ± 34
		9.00	0.06	83.4~112	98.6	9.7	98.6 ± 19
111	对二乙基苯	2.00	0.12	74.0~120	90.7	18	90.7 ± 36
		9.00	0.13	85.7~128	98.6	13	98.6 ± 26
112	间甲基苯甲醛	2.00	0.14	70.5~114	87.6	16	87.6 ± 32
		9.00	0.24	69.7~124	96.1	18	96.1 ± 36
113	十一烷	2.00	0.11	71.5~129	96.5	22	96.5 ± 44
		9.00	0.11	84.1~123	102	13	102 ± 26
114	1,2,4-三氯苯	2.00	0.14	66.5~118	83.4	18	83.4 ± 36
		9.00	0.11	90.0~117	106	9.0	106 ± 18
115	萘	2.00	0.16	66.5~100	81.9	13	81.9 ± 26
		9.00	0.16	75.9~117	100	13	100 ± 26
116	十二烷	2.00	0.15	70.5~120	92.4	17	92.4 ± 34
		9.00	0.19	82.3~120	101	15	101 ± 30
117	1,1,2,3,4,4-六氯-1,3-丁二烯	2.00	0.02	68.0~124	98.9	20	98.9 ± 40
		9.00	0.01	80.3~117	101	12	101 ± 24