

团 体 标 准

T/ZJEEMA 0006—2023

化工园区 无组织废气挥发性有机物的测定

Determination of volatile organic compounds fugitive emissions
in chemical industry park

(征求意见稿)

XXXX-XX-XX 发布

XXXX-XX-XX 实施

浙江省生态环境监测协会 发布

目 录

前言	III
1 适用范围	1
2 规范性引用文件	1
3 术语和定义	1
4 方法原理	2
5 干扰和消除	3
6 试剂和材料	3
7 仪器和设备	3
8 样品	4
9 分析步骤	4
10 结果计算与表示	6
11 精密度和正确度	6
12 质量保证和质量控制	7
13 废物处理	6
14 注意事项	7
附录 A（规范性） 目标化合物检出限及测定下限	9
附录 B（资料性） 质谱图	13
附录 C（资料性） 方法的精密度和正确度	15
附录 D（资料性） 目标外化合物定性参照表	30

前 言

本文件按照GB/T 1.1-2020《标准化工作导则 第1部分：标准化文件的结构和起草规则》的规定起草。

请注意本文件的某些内容可能涉及专利。本文件的发布机构不承担识别专利的责任。

本文件由广州禾信仪器股份有限公司提出。

本文件由浙江省生态环境监测协会归口。

本文件起草单位：广州禾信仪器股份有限公司、浙江省生态环境监测中心、浙江省生态环境科学设计研究院、浙江省环境科技有限公司、台州市污染防治工程技术中心、浙江环茂自控科技有限公司、浙江省环保集团有限公司、银川市生态环境监测站、江阴临港化工园区、新疆生产建设兵团生态环境第一监测站、新疆维吾尔自治区生态环境监测总站、新疆维吾尔自治区伊犁生态环境监测站、新疆维吾尔自治区吐鲁番生态环境监测站。

本文件验证单位：河北省生态环境监测中心、广东省广州市生态环境监测中心站、石家庄市环境监控中心、唐山市环境监控中心、新疆维吾尔自治区阿克苏生态环境监测站、广州市生态环境局黄埔环境监测站。

本文件主要起草人：

本文件参与起草人：

化工园区 无组织废气挥发性有机物的测定

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

1 范围

本文件规定了测定化工园区无组织废气挥发性有机物（VOCs）的分布式多通道在线质谱分析法。

本文件适用于化工园区无组织废气中甲苯等80种挥发性有机物的测定，其他挥发性有机物如果通过方法适用性验证，也可采用本方法测定。

当采集时间为5秒时，本方法的最低检出限为2 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ，测定下限为8 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 。

2 规范性引用文件

下列文件中的内容通过文中的规范性引用而构成本文件必不可少的条款。凡是不注日期的引用文件，其最新版本（包含所有的修改单）适用于本文件。

GB/T 13966-2013 分析仪器术语

HJ 194 环境空气质量手工监测技术规范

HJ 589 突发环境事件应急监测技术规范

HJ/T 55 大气污染物无组织排放监测技术导则

3 术语和定义

GB/T 13966-2013 界定的以及下列定义和术语适用于本文件。

3.1

挥发性有机物 volatile organic compounds (VOCs)

是指在常压下沸点低于260℃或常温下饱和蒸气压大于70.91 Pa的有机化合物。

3.2

多路进样仪 multiple gas sampling device

用于多路气体远距离采样，多通道切换进样的装置，拥有自动判断管路堵塞和漏气的功能，并禁用故障管路的功能。

3.3

分布式多通道采样系统 distributed multichannel sampling system

将带有过滤器的采样探头布设在一定区域范围内，通过惰性进样管路汇集至设备端，利用采样泵的负压将采样探头处的气体经管路抽取至进样系统，再通过控制电磁阀组将气体输送至检测器的系统。

3.4

质谱仪 mass spectrometer

采用膜进样或毛细管进样方式，经真空紫外光单光子离子源电离后，形成的分子离子由飞行时间质量分析器检测的质谱。

3.5

数据采集系统 data acquisition system

该系统由工控机和控制采集软件构成，该系统由工控机数采单元下发指令，经分布式多通道系统按照一定顺序采样并分配给对应的分析仪分析检测，并能够自动校准质谱仪保证数据的准确性。数据采集系统接受各设备反馈的数据并根据衰减结果自动处理获得最终数据，将最终数据上传给平台，并根据数据大小判断上传前期预警、限值警报信息给平台。该系统能够实现远程化、无人化管理，并根据需要增加或删除各种设备。

4 方法原理

由数据采集系统控制的分布式多通道采样系统与快速监测质谱仪，经一定的进样顺序采样，样品气体利用连接多路进样仪的真空泵抽取的负压从带有过滤器的采样杆流经惰性材料制成的采样管路到达多路进样仪，由多路进样仪控制不同阀组的开关，使不同管路中的气体达到送检的目的。送检气体中的挥发性有机物送至质谱，通过聚二甲基硅氧烷（Polydimethylsiloxane, PDMS）膜（或毛细管）进入质谱电离室，被真空紫外灯单光子离子源软电离后，产生各自特征的分子离子，经飞行时间质量分析器分离，最终被检测器接收，并由高速数据采集卡记录飞行时间以及响应信号。质谱仪根据飞行时间定性，外标法定量并将信号转换成浓度数值上传至数据采集系统，由数据采集系统根据衰减系数反演样品气体最终浓度数据。

5 干扰和消除

质荷比相同的不同挥发性有机物之间的测定会相互干扰。一般通过分析样品来源以及结合物质的同位素峰来进行辅助定性分析。

6 试剂和材料

6.1 臭氧前体物标准气体57组分（PAMS）标准气体：浓度不低于1000 nmol/mol，压力不低于1.0 MPa，平衡气为氮气。可根据实际工作需要，购买有证标准气体或在有资质单位定制合适的标准气体。

6.2 环境空气65种挥发性有机物（T015）标准气体：浓度不低于1000 nmol/mol，压力不低于1.0 MPa，平衡气为氮气。可根据实际工作需要，购买有证标准气体或在有资质单位定制合适的标准气体。

6.3 有机硫标准气体：浓度不低于1000 nmol/mol，压力不低于1.0 MPa，平衡气为氮气。可根据实际工作需要，购买有证标准气体或在有资质单位定制合适的标准气体。

6.4 高纯度氮气：纯度 $\geq 99.999\%$ 。

6.5 惰性管道：管路采用惰性较好的聚氟材料，不析出和吸附化合物，管道整体内径一致，使用前要进行清洁处理，管路材料要前后一致，针对同一管路材料需出具一份衰减率数据报告，以供工控机数采单元处理数据时使用。

7 仪器和设备

7.1 质谱仪：包括进样系统、真空系统、真空紫外单光子电离源、飞行时间质量分析器、离子检测器。

7.2 气象参数系统：测量参数包括风向、风速、温度、湿度以及大气压力，并配置电子罗盘和GPS/北斗定位系统。

7.3 多路进样仪：每台有多路进样通道，能够远距离采集多个点位的气体，不同通道间可来回切换单独送检，相互间不干扰。设有通讯接口可多台设备联用。拥有自动监测管路堵漏情况和自动禁用堵塞管路的功能。

7.4 采样杆：可安装各种辅助设备，包括气象参数系统、摄像头、避雷针等。附带有可更换的颗粒物过滤器，可过滤10 μm 以上的颗粒物。采样杆材质耐腐蚀。

7.5 动态气体稀释仪：标气可持续输出，最大稀释倍数不小于1000倍，能与质谱仪进行通讯。

7.6 机械泵：最大真空不低于250 mbar。

7.7 工控机数采单元：包含工控机和软件，能够联网。

8 样品

8.1 样品采集

将设备搭建好后，启动设备。利用工控机数采单元控制系统，设置好方法后开启机械泵，利用负压抽取气体，数据采集系统控制多路进样仪的阀组切换将气体经由管路送至质谱直接进行分析。

8.2 空白试样

将高纯度氮气（见6.4）接入管路进气端，运行系统，使气体通过管路进入质谱仪进行检测，测试系统空白。

9 分析步骤

9.1 环境参考条件

环境温度：5~35℃，湿度：20%~80%，气压：86 kPa~106 kPa。

9.2 仪器参考条件

根据使用的仪器及说明书，参考下述条件。

9.2.1 多路进样仪流量及管路条件

采样流量在3-5 L/min，实验前应进行堵塞和漏气校准，采样管路长度可根据现场情况进行调整。附带的管路宜在1500米内，管路外加PVC管保护，整条管路中间不能有堵塞、折扁、断裂和破损，弯曲半径不低于80毫米，并根据需要增加保温功能。

9.2.2 质谱仪分析参考条件

仪器真空度：真空度优于 5×10^{-3} Pa；离子源：真空紫外单光子，离子化能量10.6 eV；质量范围：全谱分析，质量范围40 amu~300 amu；谱图采集频率：5秒/谱；质谱仪采样泵流量：通常为0.85 L/min；分辨率：优于800 FWHM（甲苯）。

9.2.3 工控机数采单元条件

至少包含有一台质谱仪、一台多路进样仪、抽气泵、工控机、显示器及控制软件。在控制软件上设置进样顺序，抽气时间、分析时间、分析数据本地保存进行备份。

9.3 校准

9.3.1 仪器性能检查

开机启动后，根据仪器说明书，首先对质谱仪进行性能检查。为保证检测结果的准确性，开机启动后或连续运行24h后，应进行质谱仪的响应值校正，根据仪器说明书选择校正标准物质，其响应值变化不应超过初始响应值的10%，或满足说明书要求，否则须对质谱仪的性能进行优化，直至满足要求后才能进行样品分析。

9.3.2 校准曲线绘制

通过动态气体稀释仪（7.5）用高纯气（6.4）分别稀释标准气（6.1、6.2、6.3），配制浓度系列为0.0 nmol/mol、10.0 nmol/mol、20.0 nmol/mol、40.0 nmol/mol、80.0 nmol/mol、120nmol/mol。按照仪器参考条件（9.2.2）依次从低浓度到高浓度进行测定，计算目标物峰高的平均值。以目标物浓度为横坐标，目标物峰高的平均值为纵坐标，采用最小二乘法绘制校准曲线。

9.4 试样测定

整个试样测定系统由工控机数采单元控制，由分布式多通道采样系统、真空泵、多路进样仪、质谱仪等构成，实验前搭建好测试系统，将至少7条各不同长度的采样管路接到多路进样仪，每路管路流量调整至 3 ± 0.1 L/min之间，开启数据采集系统，记录每路送检的浓度数值。质谱仪条件参考9.2的条件，数据采集系统的条件参考9.3的条件进行测定。

9.5 空白试验

按照与试样相同的条件和步骤，通入氮气的进行测定。

10 结果计算与表示

10.1 目标化合物

10.1.1 定性分析

对于目标化合物，根据其产生主要分子离子的质荷比 (m/z) 定性，部分化合物可根据其同位素的分子离子的质荷比来辅助定性。

10.1.2 定量分析

根据校准曲线计算目标化合物的质量浓度，再根据数据采集系统的结果获得最终数据。

10.2 目标外化合物

10.2.1 定性分析

对于目标化合物以外的物质，根据质谱图中质谱峰对应的质荷比 (m/z) 定性。目标外化合物的质荷比与物质名称对应关系详见附录D。

10.2.2 定量分析

对于目标外化合物，采用苯 ($m/z=78$) 的标准曲线来进行半定量。

注：由于缺少目标外化合物标气建立标准曲线，定量结果仅供参考。

10.3 结果表示

测定结果保留一位小数，最多保留三位有效数字。

11 精密度和正确度

11.1 精密度

六家实验室分别对浓度为15.0 nmol/mol、60.0 nmol/mol和100 nmol/mol的标准样品进行了6次重复测定，实验室内相对标准偏差在0.0%-17.0%之间，实验室间相对标准偏差分布在0.0%-240%范围内。

11.2 正确度

六家实验室对浓度为15.0 nmol/mol、60.0 nmol/mol和100 nmol/mol的有证标准物质进行了6次重复测定，实验室内的最终回收率在69.6%-125%范围内。

12 质量保证和质量控制

12.1 空白

做校准曲线前应先做空白试样（8.2），空白试样中目标化合物浓度应低于方法检出限，否则应采取排除污染后再进行测试。

12.2 校准

标准曲线至少需要4个浓度点（不含零点），曲线的相关系数应 ≥ 0.99 。否则，应查找原因，重新绘制校准曲线。

仪器运行期间，通过自动校准实现每24h分析1次仪器性能检查，检查合格后数据为有效，若不合格需人员介入处理，必要时对质谱仪的性能进行优化，直至满足要求后数据才真实有效。

定期要进行反演验证，在采样探头处通入标气验证衰减率数据，若衰减结果超过30%，应查找原因或更换管路。

13 废物处理

过期的标准气体，应委托供应商或有资质的单位回收处理。

14 注意事项

14.1 系统的衰减一般由管路和质谱造成，需定期反吹清洁管路排除管路堵塞或污染的影响，并定时校准质谱仪。

14.2 定期对仪器防尘棉进行清洁，防止影响仪器散热。

附录 A
(规范性)
无组织废气 VOCs 的检出限及测定下限

当质谱分析时间为 5 秒/谱时，无组织废气 VOCs 的检出限及测定下限统计结果见表 A.1。

表 A.1 无组织废气 VOCs 的检出限及测定下限

序号	化合物名称	CAS 号	摩尔质量 (g/mol)	检出限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	测定下限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
1	甲硫醇	74-93-1	48	18	72
2	1,3-丁二烯	106-99-0	54	4	16
3	1-丁烯	106-98-9	56	4	16
4	顺式-2-丁烯	590-18-1			
5	反式-2-丁烯	624-64-6			
6	丙酮	67-64-1	58	2	8
7	二甲基硫醚（甲硫醚）	75-18-3	62	4	16
8	乙硫醇	75-08-1			
9	异戊二烯	78-75-9	68	3	12
10	1-戊烯	109-67-1	70	6	24
11	环戊烷	287-92-3			
12	c-2-戊烯	627-20-3			
13	t-2-戊烯	646-04-8			
14	甲基乙基酮（丁酮）	78-93-3	72	4	16
15	四氢呋喃	109-99-9			
16	二硫化碳	75-15-0	76	4	16
17	丙硫醇	107-03-9			
18	苯	71-43-2	78	3	12
19	环己烷	110-82-7	84	5	20
20	1-己烯	592-41-6			
21	甲基环戊烷	96-37-7			

表 A.1 无组织废气 VOCs 的检出限及测定下限 (续)

序号	化合物名称	CAS 号	摩尔质量 (g/mol)	检出限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	测定下限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
22	2,2-二甲基丁烷	75-83-2	86	12	48
23	2,3-二甲基丁烷	79-29-8			
24	2-甲基戊烷	107-83-5			
25	3-甲基戊烷	96-14-0			
26	正己烷	110-54-3			
27	甲基叔丁基醚	1634-04-4	88	7	28
28	1,4-二氧杂环己烷	123-91-1			
29	乙酸乙酯	141-78-6			
30	二乙基硫(乙硫醚)	352-93-2	90	5	20
31	丁硫醇	109-79-5			
32	甲苯	108-88-3	92	4	16
33	顺-1,2-二氯乙烯	156-59-2	96	6	24
34	1,1-二氯乙烯	75-35-4			
35	反式-1,2-二氯乙烯	156-60-5			
36	甲基环己烷	108-87-2	98	4	16
37	甲基丙烯酸甲酯	80-62-6	100	14	56
38	4-甲基-2-戊酮	108-10-1			
39	2-己酮	591-78-6			
40	n-庚烷	142-82-5			
41	苯乙烯	100-42-5	104	5	20
42	乙苯	100-41-4	106	8	32
43	对-二甲苯	106-42-3			
44	间-二甲苯	108-38-3			
45	邻二甲苯	95-47-6			
46	顺-1,3-二氯丙烯	10061-01-5	110	4	16
47	反-1,3-二氯丙烯	542-75-6			
48	氯苯	108-90-7	112	5	20
49	1,2-二氯丙烷	78-87-5			

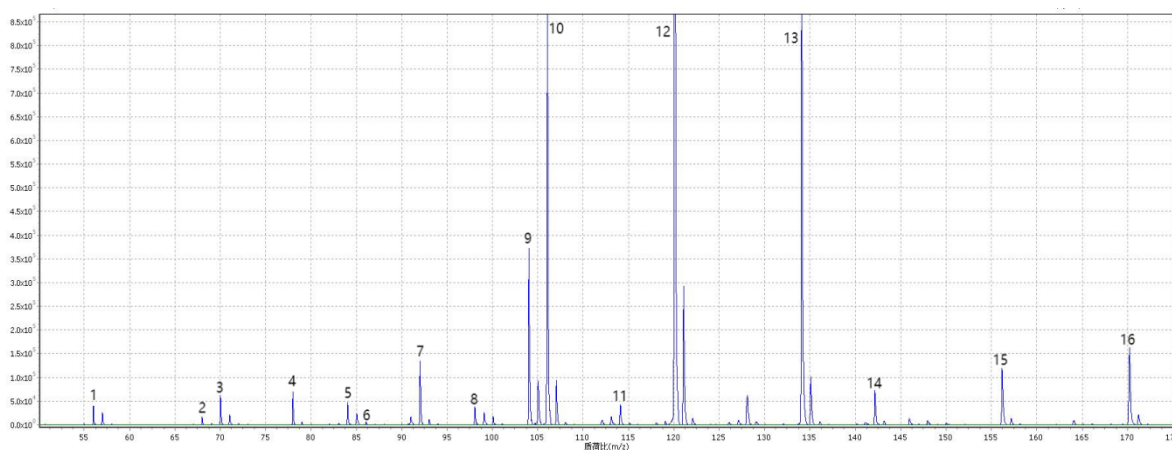
表 A.1 无组织废气 VOCs 的检出限及测定下限 (续)

序号	化合物名称	CAS 号	摩尔质量 (g/mol)	检出限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	测定下限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
50	2, 2, 4-三甲基戊烷	540-84-1	114	12	48
51	正辛烷	111-65-9			
52	2, 3, 4-三甲基戊烷	565-75-3			
53	3-甲基庚烷	589-81-1			
54	2-甲基庚烷	592-27-8			
55	1, 3, 5-三甲苯	108-67-8	120	21	84
56	1, 2, 4-三甲苯	95-63-6			
57	4-乙基甲苯	622-96-8			
58	正丙基苯	103-65-1			
59	1, 2, 3-三甲苯	526-73-8			
60	2-乙基甲苯	611-14-3			
61	3-乙基甲苯	620-14-4			
62	异丙基苯	98-82-8			
63	氟利昂-12	75-71-8	122	6	24
64	苜基氯	100-44-7	126	16	64
65	三氯乙烯	1979/1/6	130	7	28
66	p-二乙苯	105-05-5	134	13	52
67	m-二乙苯	141-93-5			
68	正癸烷	124-18-5	142	4	16
69	1, 4-二氯苯	106-46-7	146	8	32
70	1, 3-二氯苯	541-73-1			
71	1, 2-二氯苯	95-50-1			
72	正十一烷	1120-21-4	156	8	32
73	一溴二氯甲烷	75-27-4	164	5	20
74	四氯乙烯	127-18-4	166	8	32
75	1, 1, 2, 2-四氯乙烷	79-34-5	168	6	24
76	正十二烷	112-40-3	170	12	48
77	1, 2, 4-三氯苯	120-82-1	180	8	32
78	1, 2-二溴乙烷	106-93-4	188	11	44
79	三溴甲烷	75-25-2	252	12	48

表 A.1 无组织废气 VOCs 的检出限及测定下限 (续)

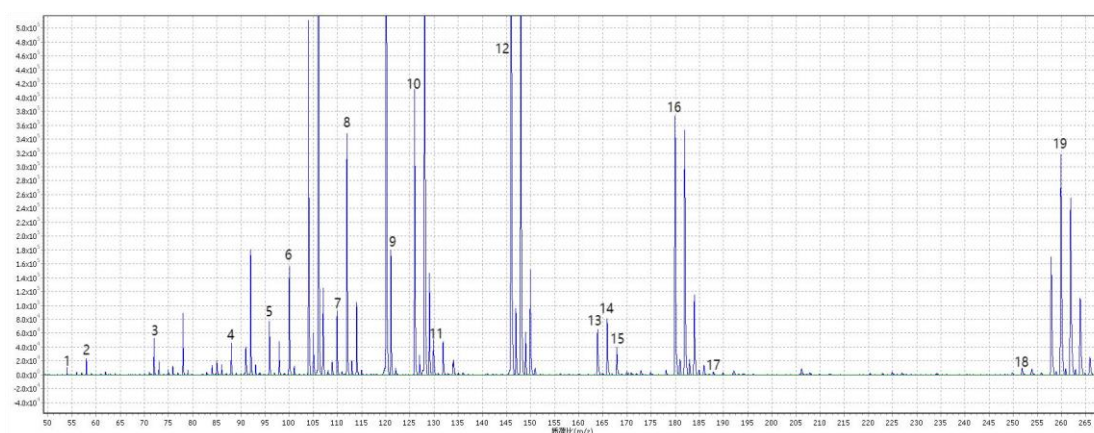
序号	化合物名称	CAS 号	摩尔质量 (g/mol)	检出限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	测定下限 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
80	六氯-1,3-丁二烯	87-68-3	260	8	32

附录 B
(资料性)
质谱图



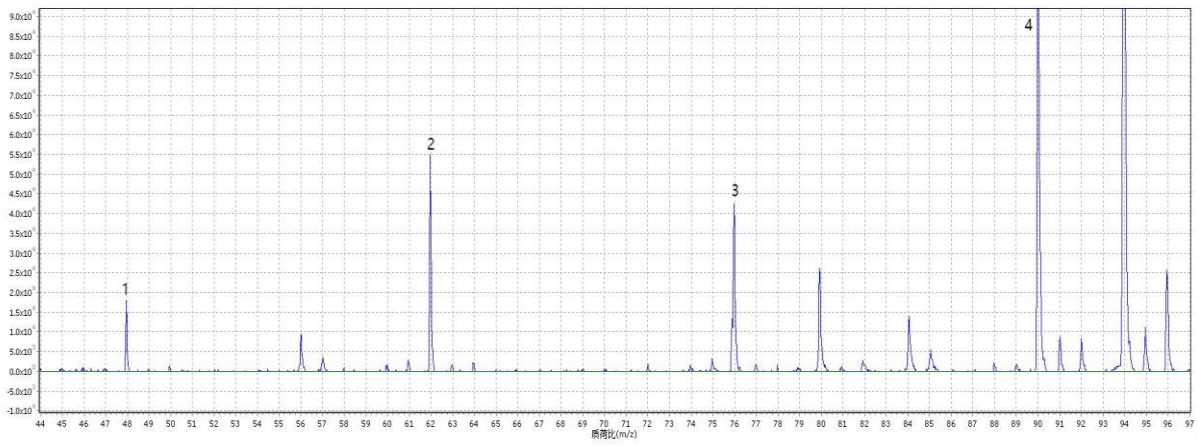
1—1-丁烯、顺式-2-丁烯、反式-2-丁烯；2—异戊二烯；3—1-戊烯、环戊烷、c-2-戊烯、t-2-戊烯；4—苯；5—环己烷、1-己烯、甲基环戊烷；6—2,2-二甲基丁烷、2,3-二甲基丁烷、2-甲基戊烷、3-甲基戊烷、正己烷；7—甲苯；8—甲基环己烷；9—苯乙烯；10—乙苯、间二甲苯、对二甲苯、邻二甲苯；11—2-甲基庚烷、3-甲基庚烷、2,2,4-三甲基戊烷、2,3,4-三甲基戊烷、辛烷；12—异丙基苯、丙苯、间乙基甲苯、对乙基甲苯、1,3,5-三甲基苯、1,2,4-三甲基苯、1,2,3-三甲基苯、邻乙基甲苯；13—间二乙基苯、对二乙基苯；14—正癸烷；15—十一烷；16—正十二烷

图 B.1 PAMS 标准气体质谱图



1—1,3-丁二烯；2—丙酮；3—甲乙酮、四氢呋喃；4—乙酸乙酯、1,4-二恶烷、甲基叔丁基醚；5—1,1-二氯乙烯、反式-1,2-二氯乙烯、顺式-1,2-二氯乙烯；6—甲基丙烯酸甲酯、甲基异丁基酮、甲基丁基(甲)酮、庚烷；7—顺式-1,3-二氯丙烯、反式-1,3-二氯丙烯；8—1,2-二氯丙烷、氯苯；9—氟利昂-12；10—氯化苈；11—三氯乙烯；12—1,3-二氯苯、1,4-二氯苯、1,2-二氯苯；13—1-溴-2-氯甲烷；14—四氯乙烯；15—1,1,2,2-四氯乙烷；16—对氯三氟苯；17—1,2-二溴乙烷；18—三溴甲烷；19—六氯-1,3-丁二烯

图 B.2 T015 标准气体质谱图



1—甲硫醇；2—甲硫醚、乙硫醇；3—丙硫醇、二硫化碳；4—丁硫醇、乙硫醚

图 B.3 有机硫标准气体质谱图

附录 C
(资料性)
方法的精密度和正确度

方法精密度见附表 C.1，方法的正确度指标见附表 C.2。

表 C.1 方法精密度

序号	化合物名称	加标浓度 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	实验室 1 相对标准 偏差	实验室 2 相对标准 偏差	实验室 3 相对标准 偏差	实验室 4 相对标准 偏差	实验室 5 相对标准 偏差	实验室 6 相对标准 偏差	实验室间 相对标准 偏差
1	甲硫醇	32.1	6.3%	5.0%	4.0%	9.7%	6.5%	6.6%	30%
		129	4.4%	1.5%	3.1%	3.4%	1.8%	5.7%	49%
		214	3.9%	2.9%	2.9%	2.4%	2.3%	2.5%	21%
2	1,3-丁二烯	36.2	4.1%	7.7%	4.2%	6.3%	5.4%	6.4%	25%
		145	4.6%	7.5%	4.6%	8.6%	5.4%	9.0%	30%
		241	4.1%	2.5%	2.0%	4.9%	5.4%	5.5%	37%
3	反式-2-丁烯	113	0.44%	0.97%	0.42%	0.70%	0.48%	1.3%	57%
		450	0.28%	0.53%	0.29%	0.91%	0.73%	0.51%	40%
		750	0.25%	0.22%	0.17%	0.21%	0.60%	0.27%	55%
4	1-丁烯	113	0.44%	0.97%	0.42%	0.70%	0.48%	1.3%	57%
		450	0.28%	0.53%	0.29%	0.91%	0.73%	0.51%	40%
		750	0.25%	0.22%	0.17%	0.21%	0.60%	0.27%	55%
5	顺式-2-丁烯	113	0.44%	0.97%	0.42%	0.70%	0.48%	1.3%	57%
		450	0.28%	0.53%	0.29%	0.91%	0.73%	0.51%	40%
		750	0.25%	0.22%	0.17%	0.21%	0.60%	0.27%	55%
6	丙酮	38.8	1.2%	0.50%	1.6%	0.81%	2.6%	1.5%	50%
		155	0.77%	0.35%	0.26%	0.96%	1.2%	0.97%	50%
		259	0.38%	0.31%	0.34%	0.69%	0.77%	0.38%	42%
7	二甲基硫醚	83.0	3.6%	0.21%	0.80%	0.75%	0.52%	0.87%	109%
		332	1.3%	0.29%	0.46%	0.25%	0.21%	0.42%	80%
		554	1.8%	0.15%	0.31%	0.60%	0.29%	0.27%	109%
8	乙硫醇	83.0	3.6%	0.21%	0.80%	0.75%	0.52%	0.87%	109%
		332	1.3%	0.29%	0.46%	0.25%	0.21%	0.42%	80%
		554	1.8%	0.15%	0.31%	0.60%	0.29%	0.27%	109%
9	异戊二烯	45.5	0.92%	0.64%	0.43%	2.2%	0.97%	0.99%	60%
		182	0.41%	0.47%	1.0%	0.46%	0.80%	0.55%	33%
		304	0.35%	0.22%	0.40%	0.43%	0.32%	0.25%	24%

表 C.1 方法精密度 (续)

序号	化合物名称	加标浓度 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	实验室 1 相对标准 偏差	实验室 2 相对标准 偏差	实验室 3 相对标准 偏差	实验室 4 相对标准 偏差	实验室 5 相对标准 偏差	实验室 6 相对标准 偏差	实验室间 相对标准 偏差
10	环戊烷	188	0.85%	0.46%	0.24%	0.53%	0.82%	0.46%	33%
		750	0.25%	0.11%	0.17%	0.13%	0.30%	0.44%	50%
		1.25×10^3	0.41%	0.00%	0.33%	0.44%	0.79%	0.00%	91%
11	反式- 2-戊烯	188	0.85%	0.46%	0.24%	0.53%	0.82%	0.46%	33%
		750	0.25%	0.11%	0.17%	0.13%	0.30%	0.44%	50%
		1.25×10^3	0.41%	0.00%	0.33%	0.44%	0.79%	0.00%	91%
12	1-戊烯	188	0.85%	0.46%	0.24%	0.53%	0.82%	0.46%	33%
		750	0.25%	0.11%	0.17%	0.13%	0.30%	0.44%	50%
		1.25×10^3	0.41%	0.00%	0.33%	0.44%	0.79%	0.00%	91%
13	顺式- 2-戊烯	188	0.85%	0.46%	0.24%	0.53%	0.82%	0.46%	33%
		750	0.25%	0.11%	0.17%	0.13%	0.30%	0.44%	50%
		1.25×10^3	0.41%	0.00%	0.33%	0.44%	0.79%	0.00%	91%
14	甲基乙 基酮 (丁酮)	96.4	0.50%	0.44%	1.2%	1.5%	1.3%	1.2%	40%
		386	0.54%	0.14%	0.25%	0.42%	0.31%	0.31%	33%
		643	0.16%	0.28%	0.57%	0.46%	0.39%	0.33%	38%
15	四氢呋 喃	96.4	0.50%	0.44%	1.2%	1.5%	1.3%	1.2%	40%
		386	0.54%	0.14%	0.25%	0.42%	0.31%	0.31%	33%
		643	0.16%	0.28%	0.57%	0.46%	0.39%	0.33%	38%
16	丙硫醇	102	2.6%	0.47%	1.0%	0.59%	0.88%	0.83%	73%
		407	1.3%	0.27%	0.46%	0.28%	0.19%	0.18%	100%
		679	8.4%	0.41%	0.27%	0.26%	0.56%	0.28%	194%
17	二硫化 碳	102	2.6%	0.47%	1.0%	0.59%	0.88%	0.83%	73%
		407	1.3%	0.27%	0.46%	0.28%	0.19%	0.18%	100%
		679	8.4%	0.41%	0.27%	0.26%	0.56%	0.28%	194%
18	苯	52.2	0.43%	0.55%	0.82%	0.52%	0.50%	0.29%	40%
		209	0.70%	0.25%	0.49%	0.42%	0.62%	0.57%	40%
		348	0.34%	0.18%	0.41%	0.22%	0.51%	0.12%	50%
19	1-己烯	169	0.33%	0.28%	0.81%	0.34%	1.1%	0.39%	60%
		675	0.27%	0.23%	0.19%	0.28%	0.29%	0.25%	0%
		1.79×10^3	0.30%	0.00%	0.31%	0.00%	0.29%	0.47%	83%
20	甲基环 戊烷	169	0.33%	0.28%	0.81%	0.34%	1.1%	0.39%	60%
		675	0.27%	0.23%	0.19%	0.28%	0.29%	0.25%	0%
		1.13×10^3	0.55%	0.47%	0.49%	0.00%	0.00%	0.46%	79%

表 C.1 方法精密度 (续)

序号	化合物名称	加标浓度 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	实验室 1 相对标准 偏差	实验室 2 相对标准 偏差	实验室 3 相对标准 偏差	实验室 4 相对标准 偏差	实验室 5 相对标准 偏差	实验室 6 相对标准 偏差	实验室间 相对标准 偏差
21	环己烷	169	0.33%	0.28%	0.81%	0.34%	1.1%	0.39%	60%
		675	0.27%	0.23%	0.19%	0.28%	0.29%	0.25%	0%
		1.13×10^3	0.55%	0.47%	0.49%	0.00%	0.00%	0.46%	79%
22	2,2-二甲基丁烷	288	3.7%	0.87%	2.4%	2.1%	2.3%	2.4%	39%
		1.15×10^3	1.4%	0.75%	1.1%	2.0%	0.46%	0.71%	55%
		1.92×10^3	1.4%	0.44%	0.80%	1.0%	0.42%	0.79%	46%
23	2,3-二甲基丁烷	288	3.7%	0.87%	2.4%	2.1%	2.3%	2.4%	39%
		1.15×10^3	1.4%	0.75%	1.1%	2.0%	0.46%	0.71%	55%
		1.92×10^3	1.4%	0.44%	0.80%	1.0%	0.42%	0.79%	46%
24	2-甲基戊烷	288	3.7%	0.87%	2.4%	2.1%	2.3%	2.4%	39%
		1.15×10^3	1.4%	0.75%	1.1%	2.0%	0.46%	0.71%	55%
		1.92×10^3	1.4%	0.44%	0.80%	1.0%	0.42%	0.79%	46%
25	3-甲基戊烷	288	3.7%	0.87%	2.4%	2.1%	2.3%	2.4%	39%
		1.15×10^3	1.4%	0.75%	1.1%	2.0%	0.46%	0.71%	55%
		1.92×10^3	1.4%	0.44%	0.80%	1.0%	0.42%	0.79%	46%
26	正己烷	288	3.7%	0.87%	2.4%	2.1%	2.3%	2.4%	39%
		1.15×10^3	1.4%	0.75%	1.1%	2.0%	0.46%	0.71%	55%
		1.92×10^3	1.4%	0.44%	0.80%	1.0%	0.42%	0.79%	46%
27	甲基叔丁基醚	177	1.0%	0.40%	0.76%	2.0%	0.70%	0.57%	67%
		707	0.44%	0.65%	0.24%	0.21%	0.60%	0.37%	50%
		1.18×10^3	0.46%	0.00%	0.00%	0.44%	0.35%	0.35%	78%
28	1,4-二氧杂环己烷	177	1.0%	0.40%	0.76%	2.0%	0.70%	0.57%	67%
		707	0.44%	0.65%	0.24%	0.21%	0.60%	0.37%	50%
		1.18×10^3	0.46%	0.00%	0.00%	0.44%	0.35%	0.35%	78%
29	乙酸乙酯	177	1.0%	0.40%	0.76%	2.0%	0.70%	0.57%	67%
		707	0.44%	0.65%	0.24%	0.21%	0.60%	0.37%	50%
		1.18×10^3	0.46%	0.00%	0.00%	0.44%	0.35%	0.35%	78%
30	二乙基硫 (乙硫醚)	121	2.4%	0.00%	0.53%	0.00%	0.43%	0.00%	150%
		482	1.1%	0.28%	0.10%	0.20%	0.15%	0.31%	100%
		804	0.87%	0.10%	0.14%	0.23%	0.13%	0.13%	111%
31	丁硫醇	121	2.4%	0.00%	0.53%	0.00%	0.43%	0.00%	150%
		482	1.1%	0.28%	0.10%	0.20%	0.15%	0.31%	100%
		804	0.87%	0.10%	0.14%	0.23%	0.13%	0.13%	111%

表 C.1 方法精密度 (续)

序号	化合物名称	加标浓度 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	实验室 1 相对标准 偏差	实验室 2 相对标准 偏差	实验室 3 相对标准 偏差	实验室 4 相对标准 偏差	实验室 5 相对标准 偏差	实验室 6 相对标准 偏差	实验室间 相对标准 偏差
32	甲苯	61.6	0.48%	0.35%	0.52%	0.27%	0.82%	0.68%	40%
		246	0.16%	0.23%	0.32%	0.21%	0.60%	0.21%	67%
		411	0.18%	0.13%	0.13%	0.18%	0.13%	0.22%	25%
33	顺-1,2- 二氯乙烯	193	0.42%	0.60%	1.0%	1.0%	1.1%	0.73%	38%
		771	0.11%	0.12%	0.27%	0.18%	0.25%	0.42%	50%
		1.29×10^3	0.00%	0.00%	0.40%	0.33%	0.32%	0.00%	106%
34	1,1-二 氯乙烯	193	0.42%	0.60%	1.0%	1.0%	1.1%	0.73%	38%
		771	0.11%	0.12%	0.27%	0.18%	0.25%	0.42%	50%
		1.29×10^3	0.00%	0.00%	0.40%	0.33%	0.32%	0.00%	106%
35	反式- 1,2-二 氯乙烯	193	0.42%	0.60%	1.0%	1.0%	1.1%	0.73%	38%
		771	0.11%	0.12%	0.27%	0.18%	0.25%	0.42%	50%
		1.29×10^3	0.00%	0.00%	0.40%	0.33%	0.32%	0.00%	106%
36	甲基环 己烷	65.6	0.58%	0.35%	0.93%	0.52%	0.49%	0.74%	33%
		263	0.20%	0.40%	0.39%	0.79%	0.33%	0.46%	50%
		438	0.35%	0.18%	0.33%	0.34%	0.22%	0.22%	26%
37	甲基丙 烯酸甲 酯	268	0.14%	0.27%	0.31%	0.24%	0.85%	0.90%	60%
		1.07×10^3	0.39%	0.00%	0.00%	0.51%	0.70%	0.49%	100%
		1.79×10^3	0.30%	0.00%	0.31%	0.00%	0.29%	0.47%	83%
38	4-甲基- 2-戊酮	268	0.14%	0.27%	0.31%	0.24%	0.85%	0.90%	60%
		1.07×10^3	0.39%	0.00%	0.00%	0.51%	0.70%	0.49%	100%
		1.79×10^3	0.30%	0.00%	0.31%	0.00%	0.29%	0.47%	83%
39	2-己酮	268	0.14%	0.27%	0.31%	0.24%	0.85%	0.90%	60%
		1.07×10^3	0.39%	0.00%	0.00%	0.51%	0.70%	0.49%	100%
		1.79×10^3	0.30%	0.00%	0.31%	0.00%	0.29%	0.47%	83%
40	n-庚烷	268	0.14%	0.27%	0.31%	0.24%	0.85%	0.90%	60%
		1.07×10^3	0.39%	0.00%	0.00%	0.51%	0.70%	0.49%	100%
		1.79×10^3	0.30%	0.00%	0.31%	0.00%	0.29%	0.47%	83%
41	苯乙烯	69.6	0.35%	0.35%	0.37%	0.30%	0.53%	0.53%	25%
		279	0.00%	0.20%	0.20%	0.36%	0.18%	0.27%	50%
		464	0.12%	0.11%	0.11%	0.00%	0.11%	0.090%	56%
42	乙苯	284	0.31%	0.31%	0.15%	0.22%	0.14%	0.15%	50%
		1.14×10^3	0.00%	0.00%	0.00%	0.36%	0.00%	0.00%	100%
		1.89×10^3	0.00%	0.00%	0.30%	0.00%	0.00%	0.00%	240%

表 C.1 方法精密度 (续)

序号	化合物名称	加标浓度 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	实验室 1 相对标准 偏差	实验室 2 相对标准 偏差	实验室 3 相对标准 偏差	实验室 4 相对标准 偏差	实验室 5 相对标准 偏差	实验室 6 相对标准 偏差	实验室间 相对标准 偏差
43	对-二甲苯	284	0.31%	0.31%	0.15%	0.22%	0.14%	0.15%	50%
		1.14×10^3	0.00%	0.00%	0.00%	0.36%	0.00%	0.00%	100%
		1.89×10^3	0.00%	0.00%	0.30%	0.00%	0.00%	0.00%	240%
44	间-二甲苯	284	0.31%	0.31%	0.15%	0.22%	0.14%	0.15%	50%
		1.14×10^3	0.00%	0.00%	0.00%	0.36%	0.00%	0.00%	100%
		1.89×10^3	0.00%	0.00%	0.30%	0.00%	0.00%	0.00%	240%
45	邻二甲苯	284	0.31%	0.31%	0.15%	0.22%	0.14%	0.15%	50%
		1.14×10^3	0.00%	0.00%	0.00%	0.36%	0.00%	0.00%	100%
		1.89×10^3	0.00%	0.00%	0.30%	0.00%	0.00%	0.00%	240%
46	顺-1,3-二氯丙烯	147	0.34%	0.35%	0.95%	0.96%	1.2%	0.57%	57%
		589	0.47%	0.23%	0.16%	0.34%	0.40%	0.40%	33%
		982	0.17%	0.39%	0.17%	0.29%	0.37%	0.31%	36%
47	反-1,3-二氯丙烯	147	0.34%	0.35%	0.95%	0.96%	1.2%	0.57%	57%
		589	0.47%	0.23%	0.16%	0.34%	0.40%	0.40%	33%
		982	0.17%	0.39%	0.17%	0.29%	0.37%	0.31%	36%
48	氯苯	150	0.34%	0.36%	0.37%	0.37%	0.56%	0.44%	25%
		600	0.13%	0.16%	0.13%	0.15%	0.23%	0.20%	0%
		1.00×10^3	0.12%	0.00%	0.00%	0.13%	0.00%	0.30%	133%
49	1,2-二氯丙烷	150	0.34%	0.36%	0.37%	0.37%	0.56%	0.44%	25%
		600	0.13%	0.16%	0.13%	0.15%	0.23%	0.20%	0%
		1.00×10^3	0.12%	0.00%	0.00%	0.13%	0.00%	0.30%	133%
50	2,2,4-三甲基戊烷	382	0.75%	0.52%	0.42%	0.71%	1.3%	0.70%	43%
		1.53×10^3	0.35%	0.55%	0.42%	0.49%	0.33%	0.64%	20%
		2.54×10^3	0.32%	0.21%	0.21%	0.30%	0.38%	0.51%	34%
51	正辛烷	382	0.75%	0.52%	0.42%	0.71%	1.3%	0.70%	43%
		1.53×10^3	0.35%	0.55%	0.42%	0.49%	0.33%	0.64%	20%
		2.54×10^3	0.32%	0.21%	0.21%	0.30%	0.38%	0.51%	34%
52	2,3,4-三甲基戊烷	382	0.75%	0.52%	0.42%	0.71%	1.3%	0.70%	43%
		1.53×10^3	0.35%	0.55%	0.42%	0.49%	0.33%	0.64%	20%
		2.54×10^3	0.32%	0.21%	0.21%	0.30%	0.38%	0.51%	34%
53	3-甲基庚烷	382	0.75%	0.52%	0.42%	0.71%	1.3%	0.70%	43%
		1.53×10^3	0.35%	0.55%	0.42%	0.49%	0.33%	0.64%	20%
		2.54×10^3	0.32%	0.21%	0.21%	0.30%	0.38%	0.51%	34%

表 C.1 方法精密度 (续)

序号	化合物名称	加标浓度 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	实验室 1 相对标准 偏差	实验室 2 相对标准 偏差	实验室 3 相对标准 偏差	实验室 4 相对标准 偏差	实验室 5 相对标准 偏差	实验室 6 相对标准 偏差	实验室间 相对标准 偏差
54	2-甲基 庚烷	382	0.75%	0.52%	0.42%	0.71%	1.3%	0.70%	43%
		1.53×10^3	0.35%	0.55%	0.42%	0.49%	0.33%	0.64%	20%
		2.54×10^3	0.32%	0.21%	0.21%	0.30%	0.38%	0.51%	34%
55	1,3,5- 三甲苯	643	0.29%	0.28%	0.14%	0.070%	0.23%	0.26%	50%
		2.57×10^3	0.00%	0.21%	0.00%	0.15%	0.00%	0.15%	100%
		4.29×10^3	0.090%	0.00%	0.00%	0.12%	0.12%	0.12%	75%
56	1,2,4- 三甲苯	643	0.29%	0.28%	0.14%	0.070%	0.23%	0.26%	50%
		2.57×10^3	0.00%	0.21%	0.00%	0.15%	0.00%	0.15%	100%
		4.29×10^3	0.090%	0.00%	0.00%	0.12%	0.12%	0.12%	75%
57	4-乙基 甲苯	643	0.29%	0.28%	0.14%	0.070%	0.23%	0.26%	50%
		2.57×10^3	0.00%	0.21%	0.00%	0.15%	0.00%	0.15%	100%
		4.29×10^3	0.090%	0.00%	0.00%	0.12%	0.12%	0.12%	75%
58	正丙基 苯	643	0.29%	0.28%	0.14%	0.070%	0.23%	0.26%	50%
		2.57×10^3	0.00%	0.21%	0.00%	0.15%	0.00%	0.15%	100%
		4.29×10^3	0.090%	0.00%	0.00%	0.12%	0.12%	0.12%	75%
59	1,2,3- 三甲苯	643	0.29%	0.28%	0.14%	0.070%	0.23%	0.26%	50%
		2.57×10^3	0.00%	0.21%	0.00%	0.15%	0.00%	0.15%	100%
		4.29×10^3	0.090%	0.00%	0.00%	0.12%	0.12%	0.12%	75%
60	2-乙基 甲苯	643	0.29%	0.28%	0.14%	0.070%	0.23%	0.26%	50%
		2.57×10^3	0.00%	0.21%	0.00%	0.15%	0.00%	0.15%	100%
		4.29×10^3	0.090%	0.00%	0.00%	0.12%	0.12%	0.12%	75%
61	3-乙基 甲苯	643	0.29%	0.28%	0.14%	0.070%	0.23%	0.26%	50%
		2.57×10^3	0.00%	0.21%	0.00%	0.15%	0.00%	0.15%	100%
		4.29×10^3	0.090%	0.00%	0.00%	0.12%	0.12%	0.12%	75%
62	异丙基 苯	643	0.29%	0.28%	0.14%	0.070%	0.23%	0.26%	50%
		2.57×10^3	0.00%	0.21%	0.00%	0.15%	0.00%	0.15%	100%
		4.29×10^3	0.090%	0.00%	0.00%	0.12%	0.12%	0.12%	75%
63	氟利昂- 12	81.7	1.5%	0.54%	3.0%	2.6%	14%	4.0%	114%
		327	1.3%	0.25%	0.49%	0.75%	0.89%	0.69%	57%
		545	1.1%	0.14%	0.63%	0.51%	0.71%	1.5%	62%
64	氯化苧	84.4	0.30%	0.33%	0.27%	0.39%	0.70%	0.76%	40%
		338	0.30%	0.44%	0.16%	0.00%	0.32%	0.15%	100%
		563	0.00%	0.070%	0.11%	0.090%	0.10%	0.13%	63%

表 C.1 方法精密度 (续)

序号	化合物名称	加标浓度 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	实验室 1 相对标准 偏差	实验室 2 相对标准 偏差	实验室 3 相对标准 偏差	实验室 4 相对标准 偏差	实验室 5 相对标准 偏差	实验室 6 相对标准 偏差	实验室间 相对标准 偏差
65	三氯乙烯	87.1	0.76%	0.75%	0.58%	0.28%	1.2%	1.1%	38%
		348	0.24%	0.34%	0.12%	0.43%	0.00%	0.54%	67%
		580	0.35%	0.20%	0.33%	0.33%	0.57%	0.36%	33%
66	p-二乙苯	179	0.38%	0.61%	0.30%	0.30%	0.30%	0.65%	50%
		718	0.070%	0.060%	0.060%	0.22%	0.11%	0.25%	100%
		1.20×10^3	0.44%	0.00%	0.47%	0.34%	0.33%	0.43%	50%
67	m-二乙苯	179	0.38%	0.61%	0.30%	0.30%	0.30%	0.65%	50%
		718	0.070%	0.060%	0.060%	0.22%	0.11%	0.25%	100%
		1.20×10^3	0.44%	0.00%	0.47%	0.34%	0.33%	0.43%	50%
68	正癸烷	95.1	0.59%	0.82%	0.56%	0.49%	0.40%	0.71%	33%
		380	0.30%	0.20%	0.27%	0.29%	0.25%	0.14%	50%
		634	0.13%	0.12%	0.38%	0.16%	0.13%	0.23%	53%
69	1,4-二氯苯	293	0.28%	0.20%	0.21%	0.40%	0.16%	0.59%	67%
		1.17×10^3	0.35%	0.56%	0.00%	0.00%	0.56%	0.00%	150%
		1.96×10^3	0.21%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	225%
70	1,3-二氯苯	293	0.28%	0.20%	0.21%	0.40%	0.16%	0.59%	67%
		1.17×10^3	0.35%	0.56%	0.00%	0.00%	0.56%	0.00%	150%
		1.96×10^3	0.21%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	225%
71	1,2-二氯苯	293	0.28%	0.20%	0.21%	0.40%	0.16%	0.59%	67%
		1.17×10^3	0.35%	0.56%	0.00%	0.00%	0.56%	0.00%	150%
		1.96×10^3	0.21%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	225%
72	十一烷	104	0.00%	0.44%	0.40%	0.38%	0.39%	0.40%	67%
		418	0.28%	0.21%	0.13%	0.18%	0.32%	0.43%	33%
		696	0.25%	0.12%	0.15%	0.17%	0.17%	0.16%	24%
73	一溴二氯甲烷	110	0.45%	0.68%	0.51%	1.4%	0.79%	1.3%	44%
		439	0.13%	0.27%	0.29%	0.36%	0.31%	0.39%	33%
		732	0.060%	0.29%	0.090%	0.27%	0.37%	0.48%	62%
74	四氯乙烯	111	0.93%	0.00%	0.67%	0.37%	0.66%	0.49%	60%
		445	0.16%	0.21%	0.29%	0.45%	0.27%	0.34%	33%
		741	0.34%	0.050%	0.20%	0.20%	0.21%	0.61%	70%
75	1,1,2,2-四氯乙烷	113	0.78%	0.46%	1.3%	0.74%	0.46%	1.3%	50%
		450	0.19%	0.22%	0.30%	0.84%	0.41%	0.69%	75%
		750	0.21%	0.15%	0.26%	0.54%	0.50%	0.40%	47%

表 C.1 方法精密度 (续)

序号	化合物名称	加标浓度 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	实验室 1 相对标准 偏差	实验室 2 相对标准 偏差	实验室 3 相对标准 偏差	实验室 4 相对标准 偏差	实验室 5 相对标准 偏差	实验室 6 相对标准 偏差	实验室间 相对标准 偏差
76	正十二烷	114	0.52%	0.00%	0.39%	0.00%	0.00%	0.65%	100%
		455	0.00%	0.50%	0.19%	0.16%	0.090%	0.43%	100%
		759	1.1%	0.070%	0.11%	0.14%	0.15%	0.11%	143%
77	1,2,4-三氯苯	121	0.37%	13%	0.00%	0.39%	11%	0.45%	145%
		482	0.53%	0.39%	0.40%	0.33%	0.26%	0.31%	25%
		804	0.15%	0.25%	0.10%	0.090%	0.24%	0.16%	41%
78	1,2-二溴乙烷	126	6.5%	1.6%	4.3%	4.5%	2.0%	7.6%	55%
		504	0.97%	1.2%	0.54%	0.85%	2.6%	4.9%	94%
		839	1.1%	0.57%	0.70%	1.0%	0.78%	1.9%	48%
79	三溴甲烷	169	1.8%	1.8%	2.3%	1.2%	2.2%	3.2%	33%
		675	0.49%	0.94%	1.1%	0.56%	1.2%	1.4%	44%
		1.13×10^3	0.90%	0.79%	0.46%	0.87%	0.89%	1.5%	38%
80	六氯-1,3-丁二烯	174	0.28%	14%	0.29%	0.00%	17%	0.65%	146%
		696	0.46%	0.87%	0.10%	0.17%	0.73%	0.20%	75%
		1.16×10^3	0.00%	0.33%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	217%

表 C.2 方法的正确度

序号	化合物名称	加标浓度 (ug/m ³)	实验室 1 回收率	实验室 2 回收率	实验室 3 回收率	实验室 4 回收率	实验室 5 回收率	实验室 6 回收率	最终回收率 范围
1	甲硫醇	32.1	111%	125%	123%	83.5%	116%	113%	83.5%~125%
		129	111%	106%	109%	99.2%	109%	108%	99.2%~111%
		214	107%	104%	104%	101%	108%	105%	101%~108%
2	1,3-丁二烯	36.2	107%	100%	105%	82.9%	97.2%	100%	82.9%~107%
		145	101%	101%	104%	96.6%	93.1%	99.3%	93.1%~104%
		241	100%	100%	96.7%	101%	100%	97.9%	96.7%~101%
3	反式-2-丁烯	113	104%	88.0%	86.7%	94.7%	101%	94.7%	86.7%~104%
		450	103%	96.2%	90.7%	101%	100%	100%	90.7%~103%
		750	102%	98.1%	92.4%	101%	102%	99.2%	92.4%~102%
4	1-丁烯	113	104%	88.0%	86.7%	94.7%	101%	94.7%	86.7%~104%
		450	103%	96.2%	90.7%	101%	100%	100%	90.7%~103%
		750	102%	98.1%	92.4%	101%	102%	99.2%	92.4%~102%
5	顺式-2-丁烯	113	104%	88.0%	86.7%	94.7%	101%	94.7%	86.7%~104%
		450	103%	96.2%	90.7%	101%	100%	100%	90.7%~103%
		750	102%	98.1%	92.4%	101%	102%	99.2%	92.4%~102%
6	丙酮	38.8	106%	103%	97.9%	92.8%	100%	99.0%	92.8%~106%
		155	100%	101%	100%	101%	98.7%	99.4%	98.7%~101%
		259	101%	104%	102%	100%	100%	100%	100%~104%
7	二甲基硫醚	83.0	105%	109%	100%	97.8%	107%	102%	97.8%~109%
		332	122%	103%	104%	100%	108%	101%	100%~122%
		554	123%	100%	104%	99.3%	108%	101%	99.3%~123%
8	乙硫醇	83.0	105%	109%	100%	97.8%	107%	102%	97.8%~109%
		332	122%	103%	104%	100%	108%	101%	100%~122%
		554	123%	100%	104%	99.3%	108%	101%	99.3%~123%
9	异戊二烯	45.5	98.5%	92.7%	96.7%	95.6%	100%	93.4%	92.7%~100%
		182	101%	95.1%	96.7%	98.4%	103%	100%	95.1%~103%
		304	102%	96.1%	98.7%	100%	103%	98.0%	96.1%~103%
10	环戊烷	188	101%	96.3%	92.0%	99.5%	104%	97.9%	92.0%~104%
		750	102%	98.5%	95.9%	101%	101%	98.9%	95.9%~102%
		1.25×10 ³	102%	99.2%	98.4%	101%	102%	100%	98.4%~102%
11	反式-2-戊烯	188	101%	96.3%	92.0%	99.5%	104%	97.9%	92.0%~104%
		750	102%	98.5%	95.9%	101%	101%	98.9%	95.9%~102%
		1.25×10 ³	102%	99.2%	98.4%	101%	102%	100%	98.4%~102%
12	1-戊烯	188	101%	96.3%	92.0%	99.5%	104%	97.9%	92.0%~104%
		750	102%	98.5%	95.9%	101%	101%	98.9%	95.9%~102%
		1.25×10 ³	102%	99.2%	98.4%	101%	102%	100%	98.4%~102%

表 C.2 方法的正确度 (续)

序号	化合物名称	加标浓度 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	实验室 1 回收率	实验室 2 回收率	实验室 3 回收率	实验室 4 回收率	实验室 5 回收率	实验室 6 回收率	最终回收率 范围
13	顺式-2-戊烯	188	101%	96.3%	92.0%	99.5%	104%	97.9%	92.0%~104%
		750	102%	98.5%	95.9%	101%	101%	98.9%	95.9%~102%
		1.25×10^3	102%	99.2%	98.4%	101%	102%	100%	98.4%~102%
14	甲基乙基酮(丁酮)	96.4	107%	96.7%	97.6%	98.8%	92.9%	97.2%	92.9%~107%
		386	101%	98.4%	101%	99.2%	99.0%	100%	98.4%~101%
		643	98.9%	101%	101%	98.6%	98.8%	99.1%	98.6%~101%
15	四氢呋喃	96.4	107%	96.7%	97.6%	98.8%	92.9%	97.2%	92.9%~107%
		386	101%	98.4%	101%	99.2%	99.0%	100%	98.4%~101%
		643	98.9%	101%	101%	98.6%	98.8%	99.1%	98.6%~101%
16	丙硫醇	102	102%	109%	84.9%	94.6%	111%	105%	84.9%~111%
		407	113%	111%	108%	104%	115%	104%	104%~115%
		679	104%	107%	109%	100%	111%	98.2%	98.2%~111%
17	二硫化碳	102	102%	109%	84.9%	94.6%	111%	105%	84.9%~111%
		407	113%	111%	108%	104%	115%	104%	104%~115%
		679	104%	107%	109%	100%	111%	98.2%	98.2%~111%
18	苯	52.2	98.7%	94.1%	93.3%	96.0%	100%	100%	93.3%~100%
		209	102%	98.6%	98.1%	100%	100%	100%	98.1%~102%
		348	101%	99.4%	98.9%	98.9%	102%	101%	98.9%~102%
19	1-己烯	169	98.8%	88.2%	88.2%	95.9%	101%	95.3%	88.2%~101%
		675	103%	96.9%	94.7%	101%	101%	101%	94.7%~103%
		1.13×10^3	102%	98.2%	93.8%	100%	103%	100%	93.8%~103%
20	甲基环戊烷	169	98.8%	88.2%	88.2%	95.9%	101%	95.3%	88.2%~101%
		675	103%	96.9%	94.7%	101%	101%	101%	94.7%~103%
		1.13×10^3	102%	98.2%	93.8%	100%	103%	100%	93.8%~103%
21	环己烷	169	98.8%	88.2%	88.2%	95.9%	101%	95.3%	88.2%~101%
		675	103%	96.9%	94.7%	101%	101%	101%	94.7%~103%
		1.13×10^3	102%	98.2%	93.8%	100%	103%	100%	93.8%~103%
22	2,2-二甲基丁烷	288	94.8%	91.3%	95.1%	97.6%	96.9%	79.9%	79.9%~97.6%
		1.15×10^3	106%	95.7%	95.7%	101%	103%	100%	95.7%~106%
		1.92×10^3	105%	96.9%	97.9%	101%	102%	99.5%	96.9%~105%
23	2,3-二甲基丁烷	288	94.8%	91.3%	95.1%	97.6%	96.9%	79.9%	79.9%~97.6%
		1.15×10^3	106%	95.7%	95.7%	101%	103%	100%	95.7%~106%
		1.92×10^3	105%	96.9%	97.9%	101%	102%	99.5%	96.9%~105%

表 C.2 方法的正确度 (续)

序号	化合物名称	加标浓度 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	实验室 1 回收率	实验室 2 回收率	实验室 3 回收率	实验室 4 回收率	实验室 5 回收率	实验室 6 回收率	最终回收率 范围
24	2-甲基戊烷	288	94.8%	91.3%	95.1%	97.6%	96.9%	79.9%	79.9%~97.6%
		1.15×10^3	106%	95.7%	95.7%	101%	103%	100%	95.7%~106%
		1.92×10^3	105%	96.9%	97.9%	101%	102%	99.5%	96.9%~105%
25	3-甲基戊烷	288	94.8%	91.3%	95.1%	97.6%	96.9%	79.9%	79.9%~97.6%
		1.15×10^3	106%	95.7%	95.7%	101%	103%	100%	95.7%~106%
		1.92×10^3	105%	96.9%	97.9%	101%	102%	99.5%	96.9%~105%
26	正己烷	288	94.8%	91.3%	95.1%	97.6%	96.9%	79.9%	79.9%~97.6%
		1.15×10^3	106%	95.7%	95.7%	101%	103%	100%	95.7%~106%
		1.92×10^3	105%	96.9%	97.9%	101%	102%	99.5%	96.9%~105%
27	甲基叔丁基醚	177	116%	107%	96.0%	100%	105%	99.4%	96.0%~116%
		707	97.0%	98.3%	98.4%	100%	96.9%	100%	96.9%~100%
		1.18×10^3	95.8%	102%	100%	100%	98.3%	98.3%	95.8%~102%
28	1,4-二氧杂环己烷	177	116%	107%	96.0%	100%	105%	99.4%	96.0%~116%
		707	97.0%	98.3%	98.4%	100%	96.9%	100%	96.9%~100%
		1.18×10^3	95.8%	102%	100%	100%	98.3%	98.3%	95.8%~102%
29	乙酸乙酯	177	116%	107%	96.0%	100%	105%	99.4%	96.0%~116%
		707	97.0%	98.3%	98.4%	100%	96.9%	100%	96.9%~100%
		1.18×10^3	95.8%	102%	100%	100%	98.3%	98.3%	95.8%~102%
30	二乙基硫 (乙硫醚)	121	97.5%	102%	73.0%	90.9%	105%	89.3%	73.0%~105%
		482	106%	106%	105%	102%	115%	95.0%	95.0%~115%
		804	106%	105%	110%	102%	114%	94.0%	94.0%~114%
31	丁硫醇	121	97.5%	102%	73.0%	90.9%	105%	89.3%	73.0%~105%
		482	106%	106%	105%	102%	115%	95.0%	95.0%~115%
		804	106%	105%	110%	102%	114%	94.0%	94.0%~114%
32	甲苯	61.6	100%	97.6%	94.2%	97.2%	105%	97.6%	94.2%~105%
		246	104%	97.6%	95.9%	99.2%	101%	100%	95.9%~104%
		411	103%	96.4%	96.6%	99.3%	101%	100%	96.4%~103%
33	顺-1,2-二氯乙烯	193	104%	103%	98.4%	97.4%	100%	99.0%	97.4%~104%
		771	100%	104%	101%	99.4%	100%	100%	99.4%~104%
		1.29×10^3	96.9%	105%	101%	97.7%	100%	97.7%	96.9%~105%
34	1,1-二氯乙烯	193	104%	103%	98.4%	97.4%	100%	99.0%	97.4%~104%
		771	100%	104%	101%	99.4%	100%	100%	99.4%~104%
		1.29×10^3	96.9%	105%	101%	97.7%	100%	97.7%	96.9%~105%
35	反式-1,2-二氯乙烯	193	104%	103%	98.4%	97.4%	100%	99.0%	97.4%~104%
		771	100%	104%	101%	99.4%	100%	100%	99.4%~104%
		1.29×10^3	96.9%	105%	101%	97.7%	100%	97.7%	96.9%~105%

表 C.2 方法的正确度 (续)

序号	化合物名称	加标浓度 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	实验室 1 回收率	实验室 2 回收率	实验室 3 回收率	实验室 4 回收率	实验室 5 回收率	实验室 6 回收率	最终回收率 范围
36	甲基环己烷	65.6	94.1%	90.2%	92.2%	97.6%	103%	92.2%	90.2%~103%
		263	103%	96.2%	97.0%	101%	102%	98.9%	96.2%~103%
		438	103%	97.0%	96.1%	100%	102%	100%	96.1%~103%
37	甲基丙烯酸甲酯	268	107%	104%	97.8%	99.3%	101%	100%	97.8%~107%
		1.07×10^3	98.1%	101%	102%	100%	100%	100%	98.1%~102%
		1.79×10^3	96.6%	103%	101%	100%	100%	98.3%	96.6%~103%
38	4-甲基-2-戊酮	268	107%	104%	97.8%	99.3%	101%	100%	97.8%~107%
		1.07×10^3	98.1%	101%	102%	100%	100%	100%	98.1%~102%
		1.79×10^3	96.6%	103%	101%	100%	100%	98.3%	96.6%~103%
39	2-己酮	268	107%	104%	97.8%	99.3%	101%	100%	97.8%~107%
		1.07×10^3	98.1%	101%	102%	100%	100%	100%	98.1%~102%
		1.79×10^3	96.6%	103%	101%	100%	100%	98.3%	96.6%~103%
40	n-庚烷	268	107%	104%	97.8%	99.3%	101%	100%	97.8%~107%
		1.07×10^3	98.1%	101%	102%	100%	100%	100%	98.1%~102%
		1.79×10^3	96.6%	103%	101%	100%	100%	98.3%	96.6%~103%
41	苯乙烯	69.6	89.1%	89.1%	100%	100%	103%	94.8%	89.1%~103%
		279	103%	97.8%	98.9%	100%	103%	100%	97.8%~103%
		464	102%	97.8%	98.3%	101%	102%	101%	97.8%~102%
42	乙苯	284	95.4%	85.6%	96.5%	98.9%	103%	96.5%	85.6%~103%
		1.14×10^3	104%	93.0%	95.6%	100%	100%	100%	93.0%~104%
		1.89×10^3	104%	93.7%	96.3%	101%	102%	101%	93.7%~104%
43	对-二甲苯	284	95.4%	85.6%	96.5%	98.9%	103%	96.5%	85.6%~103%
		1.14×10^3	104%	93.0%	95.6%	100%	100%	100%	93.0%~104%
		1.89×10^3	104%	93.7%	96.3%	101%	102%	101%	93.7%~104%
44	间-二甲苯	284	95.4%	85.6%	96.5%	98.9%	103%	96.5%	85.6%~103%
		1.14×10^3	104%	93.0%	95.6%	100%	100%	100%	93.0%~104%
		1.89×10^3	104%	93.7%	96.3%	101%	102%	101%	93.7%~104%
45	邻二甲苯	284	95.4%	85.6%	96.5%	98.9%	103%	96.5%	85.6%~103%
		1.14×10^3	104%	93.0%	95.6%	100%	100%	100%	93.0%~104%
		1.89×10^3	104%	93.7%	96.3%	101%	102%	101%	93.7%~104%
46	顺-1,3-二氯丙烯	147	104%	102%	100%	99.3%	100%	98.0%	98.0%~104%
		589	100%	104%	103%	101%	102%	102%	100%~104%
		982	97.1%	106%	101%	98.9%	101%	100%	97.1%~106%

表 C.2 方法的正确度 (续)

序号	化合物名称	加标浓度 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	实验室 1 回收率	实验室 2 回收率	实验室 3 回收率	实验室 4 回收率	实验室 5 回收率	实验室 6 回收率	最终回收率 范围
47	反-1,3-二 氯丙烯	147	104%	102%	100%	99.3%	100%	98.0%	98.0%~104%
		589	100%	104%	103%	101%	102%	102%	100%~104%
		982	97.1%	106%	101%	98.9%	101%	100%	97.1%~106%
48	氯苯	150	102%	97.3%	99.3%	94.7%	98.0%	94.7%	94.7%~102%
		600	100%	101%	102%	101%	101%	101%	100%~102%
		1.00×10^3	97.8%	104%	101%	98.8%	100%	98.8%	97.8%~104%
49	1,2-二氯 丙烷	150	102%	97.3%	99.3%	94.7%	98.0%	94.7%	94.7%~102%
		600	100%	101%	102%	101%	101%	101%	100%~102%
		1.00×10^3	97.8%	104%	101%	98.8%	100%	98.8%	97.8%~104%
50	2,2,4-三 甲基戊烷	382	101%	91.1%	94.0%	95.8%	101%	96.6%	91.1%~101%
		1.53×10^3	103%	97.4%	98.7%	99.3%	102%	99.3%	97.4%~103%
		2.54×10^3	101%	98.8%	98.8%	99.2%	102%	100%	98.8%~102%
51	正辛烷	382	101%	91.1%	94.0%	95.8%	101%	96.6%	91.1%~101%
		1.53×10^3	103%	97.4%	98.7%	99.3%	102%	99.3%	97.4%~103%
		2.54×10^3	101%	98.8%	98.8%	99.2%	102%	100%	98.8%~102%
52	2,3,4-三 甲基戊烷	382	101%	91.1%	94.0%	95.8%	101%	96.6%	91.1%~101%
		1.53×10^3	103%	97.4%	98.7%	99.3%	102%	99.3%	97.4%~103%
		2.54×10^3	101%	98.8%	98.8%	99.2%	102%	100%	98.8%~102%
53	3-甲基庚 烷	382	101%	91.1%	94.0%	95.8%	101%	96.6%	91.1%~101%
		1.53×10^3	103%	97.4%	98.7%	99.3%	102%	99.3%	97.4%~103%
		2.54×10^3	101%	98.8%	98.8%	99.2%	102%	100%	98.8%~102%
54	2-甲基庚 烷	382	101%	91.1%	94.0%	95.8%	101%	96.6%	91.1%~101%
		1.53×10^3	103%	97.4%	98.7%	99.3%	102%	99.3%	97.4%~103%
		2.54×10^3	101%	98.8%	98.8%	99.2%	102%	100%	98.8%~102%
55	1,3,5-三 甲苯	643	80.2%	78.7%	99.1%	98.1%	100%	88.6%	78.7%~100%
		2.57×10^3	109%	104%	106%	108%	111%	107%	104%~111%
		4.29×10^3	103%	99.1%	100%	103%	104%	102%	99.1%~104%
56	1,2,4-三 甲苯	643	80.2%	78.7%	99.1%	98.1%	100%	88.6%	78.7%~100%
		2.57×10^3	109%	104%	106%	108%	111%	107%	104%~111%
		4.29×10^3	103%	99.1%	100%	103%	104%	102%	99.1%~104%
57	4-乙基甲 苯	643	80.2%	78.7%	99.1%	98.1%	100%	88.6%	78.7%~100%
		2.57×10^3	109%	104%	106%	108%	111%	107%	104%~111%
		4.29×10^3	103%	99.1%	100%	103%	104%	102%	99.1%~104%
58	正丙基苯	643	80.2%	78.7%	99.1%	98.1%	100%	88.6%	78.7%~100%
		2.57×10^3	109%	104%	106%	108%	111%	107%	104%~111%
		4.29×10^3	103%	99.1%	100%	103%	104%	102%	99.1%~104%

表 C.2 方法的正确度 (续)

序号	化合物名称	加标浓度 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	实验室 1 回收率	实验室 2 回收率	实验室 3 回收率	实验室 4 回收率	实验室 5 回收率	实验室 6 回收率	最终回收率 范围
59	1, 2, 3-三甲苯	643	80.2%	78.7%	99.1%	98.1%	100%	88.6%	78.7%~100%
		2.57×10^3	109%	104%	106%	108%	111%	107%	104%~111%
		4.29×10^3	103%	99.1%	100%	103%	104%	102%	99.1%~104%
60	2-乙基甲苯	643	80.2%	78.7%	99.1%	98.1%	100%	88.6%	78.7%~100%
		2.57×10^3	109%	104%	106%	108%	111%	107%	104%~111%
		4.29×10^3	103%	99.1%	100%	103%	104%	102%	99.1%~104%
61	3-乙基甲苯	643	80.2%	78.7%	99.1%	98.1%	100%	88.6%	78.7%~100%
		2.57×10^3	109%	104%	106%	108%	111%	107%	104%~111%
		4.29×10^3	103%	99.1%	100%	103%	104%	102%	99.1%~104%
62	异丙基苯	643	80.2%	78.7%	99.1%	98.1%	100%	88.6%	78.7%~100%
		2.57×10^3	109%	104%	106%	108%	111%	107%	104%~111%
		4.29×10^3	103%	99.1%	100%	103%	104%	102%	99.1%~104%
63	氟利昂-12	81.7	90.7%	95.2%	82.4%	80.4%	88.1%	78.6%	78.6%~95.2%
		327	93.0%	101%	99.1%	98.5%	96.3%	93.6%	93.0%~101%
		545	100%	105%	98.5%	97.2%	97.6%	93.9%	93.9%~105%
64	氯化苜	84.4	104%	87.2%	88.2%	81.0%	85.0%	84.1%	81.0%~104%
		338	100%	94.1%	104%	101%	93.8%	103%	93.8%~104%
		563	100%	104%	102%	100%	102%	101%	100%~104%
65	三氯乙烯	87.1	100%	101%	98.3%	97.4%	102%	100%	97.4%~102%
		348	101%	103%	102%	100%	101%	101%	100%~103%
		580	100%	104%	101%	99.3%	99.3%	100%	99.3%~104%
66	p-二乙苯	179	81.0%	74.9%	98.3%	96.6%	97.8%	85.5%	74.9%~98.3%
		718	103%	96.9%	98.6%	101%	105%	99.2%	96.9%~105%
		1.20×10^3	103%	98.3%	96.7%	102%	103%	102%	96.7%~103%
67	m-二乙苯	179	81.0%	74.9%	98.3%	96.6%	97.8%	85.5%	74.9%~98.3%
		718	103%	96.9%	98.6%	101%	105%	99.2%	96.9%~105%
		1.20×10^3	103%	98.3%	96.7%	102%	103%	102%	96.7%~103%
68	正癸烷	95.1	89.4%	85.5%	98.4%	104%	107%	94.8%	85.5%~107%
		380	104%	97.4%	98.7%	101%	104%	101%	97.4%~104%
		634	102%	95.6%	96.7%	100%	103%	101%	95.6%~103%
69	1, 4-二氯苯	293	107%	88.4%	90.8%	83.6%	87.4%	87.0%	83.6%~107%
		1.17×10^3	100%	95.7%	104%	102%	95.7%	104%	95.7%~104%
		1.96×10^3	99.0%	103%	101%	100%	102%	101%	99.0%~103%

表 C.2 方法的正确度 (续)

序号	化合物名称	加标浓度 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	实验室 1 回收率	实验室 2 回收率	实验室 3 回收率	实验室 4 回收率	实验室 5 回收率	实验室 6 回收率	最终回收率 范围
70	1,3-二氯苯	293	107%	88.4%	90.8%	83.6%	87.4%	87.0%	83.6%~107%
		1.17×10^3	100%	95.7%	104%	102%	95.7%	104%	95.7%~104%
		1.96×10^3	99.0%	103%	101%	100%	102%	101%	99.0%~103%
71	1,2-二氯苯	293	107%	88.4%	90.8%	83.6%	87.4%	87.0%	83.6%~107%
		1.17×10^3	100%	95.7%	104%	102%	95.7%	104%	95.7%~104%
		1.96×10^3	99.0%	103%	101%	100%	102%	101%	99.0%~103%
72	十一烷	104	75.0%	78.6%	98.1%	103%	102%	86.5%	75.0%~103%
		418	104%	97.6%	100%	106%	106%	100%	97.6%~106%
		696	102%	97.6%	96.4%	102%	103%	101%	96.4%~103%
73	一溴二氯甲烷	110	105%	100%	97.3%	96.4%	102%	100%	96.4%~105%
		439	100%	102%	103%	101%	102%	100%	100%~103%
		732	98.8%	103%	101%	101%	100%	99.0%	98.8%~103%
74	四氯乙烯	111	106%	102%	101%	99.1%	103%	96.4%	96.4%~106%
		445	103%	103%	102%	100%	100%	100%	100%~103%
		741	100%	104%	101%	99.2%	101%	100%	99.2%~104%
75	1,1,2,2-四氯乙烷	113	101%	99.1%	101%	100%	100%	99.1%	99.1%~101%
		450	100%	102%	104%	101%	98.7%	100%	98.7%~104%
		750	100%	104%	101%	98.8%	98.4%	100%	98.4%~104%
76	正十二烷	114	69.6%	78.6%	92.1%	92.1%	89.5%	81.4%	69.6%~92.1%
		455	100%	92.5%	97.4%	104%	105%	92.1%	92.1%~105%
		759	97.1%	101%	95.8%	105%	105%	100%	95.8%~105%
77	1,2,4-三氯苯	121	115%	97.5%	78.3%	86.0%	92.6%	80.0%	78.3%~115%
		482	85.9%	74.3%	97.9%	94.8%	79.7%	101%	74.3%~101%
		804	102%	101%	101%	104%	102%	104%	101%~104%
78	1,2-二溴乙烷	126	100%	94.4%	95.2%	86.5%	89.7%	88.9%	86.5%~100%
		504	96.0%	101%	106%	95.2%	92.1%	105%	92.1%~106%
		839	91.5%	103%	101%	100%	102%	101%	91.5%~103%
79	三溴甲烷	169	84.0%	94.7%	89.3%	92.3%	95.9%	84.6%	84.0%~95.9%
		675	102%	104%	103%	103%	101%	103%	101%~104%
		1.13×10^3	98.2%	112%	99.1%	100%	99.1%	99.1%	98.2%~112%
80	六氯-1,3-丁二烯	174	109%	97.1%	81.6%	81.6%	100%	78.7%	78.7%~109%
		696	97.0%	88.9%	104%	102%	87.1%	105%	87.1%~105%
		1.16×10^3	103%	109%	100%	102%	103%	103%	100%~109%

附录 D
(资料性)
目标外化合物定性参照表

对于目标外化合物，主要根据质谱峰的质荷比定性，定性参照表详见表 D. 1。

表 D. 1 目标外化合物定性参照表

序号	化合物名称	CAS 号	摩尔质量 (g/mol)
1	甲酰胺	75-12-7	45
2	乙胺	75-04-7	45
3	二甲胺	124-40-3	45
4	氟乙烯	75-02-5	46
5	二甲醚	115-10-6	46
6	单甲肼	60-34-4	46
7	1-丁炔	107-00-6	54
8	2-丁炔	503-17-3	54
9	丙烯醛	107-02-8	56
10	炔丙醇	107-19-7	56
11	氧化丙烯	75-56-9	56
12	乙二醛	107-22-2	58
13	烯丙醇	107-18-6	58
14	正丙醛	123-38-6	58
15	乙烯基甲基醚	107-25-5	58
16	异丁烷	75-28-5	58
17	正丙胺	107-10-8	59
18	异丙胺	75-31-0	59
19	三甲胺	75-50-3	59
20	正丙醇	71-23-8	60
21	异丙醇	67-63-0	60
22	1, 1-二甲基肼	57-14-7	60
23	氨基乙醇	141-43-5	61
24	乙二醇	107-21-1	62
25	氯乙烯	75-01-4	62、64
26	1, 3-环戊二烯	542-92-7	66
27	呋喃	110-00-9	68
28	环戊烯	142-29-0	68
29	反式-1, 3-戊二烯	2004-70-8	68
30	丁烯醛	123-73-9	70
31	丙烯酸	79-10-7	72

表 D.1 目标外化合物定性参照表 (续)

序号	化合物名称	CAS 号	摩尔质量 (g/mol)
32	正丁醛	123-72-8	72
33	异丁醛	78-84-2	72
34	正戊烷	109-66-0	72
35	异戊烷	78-78-4	72
36	二甲基甲酰胺	68-12-2	73
37	正丁胺	109-73-9	73
38	仲丁胺	33966-50-6	73
39	二乙胺	109-89-7	73
40	异丁胺	78-81-9	73
41	丙酸	79-09-4	74
42	乙酸甲酯	79-20-9	74
43	乙醚	60-29-7	74
44	正丁醇	71-36-3	74
45	仲丁醇	78-92-2	74
46	叔丁醇	75-65-0	74
47	异丁醇	78-83-1	74
48	1,2-丙二胺	78-90-0	74
49	3-氯丙烯	107-05-1	76、78
50	甲基乙基硫	624-89-5	76
51	乙二醇独甲醚	109-86-4	76
52	二甲氧基甲烷	109-87-5	76
53	肿	7784-42-1	78
54	氯乙醛	107-20-0	78、79
55	吡啶	110-86-1	79
56	氯甲基甲醚	107-30-2	80、82
57	2-氯乙醇	107-07-3	82、84
58	三氟乙烯	359-11-5	82
59	2-甲基咪喃	534-22-5	82
60	环己烯	110-83-8	82
61	2,3-二甲基-1,3-丁二烯	513-81-5	82
62	噻吩	110-02-1	84
63	环戊酮	120-92-3	84
64	哌啶	110-89-4	85
65	1,4-丁内酯	96-48-0	86
66	甲基丙烯酸	79-41-4	86
67	乙酸乙烯酯	108-05-4	86
68	环戊醇	96-41-3	86
69	正戊醛	110-62-3	86
70	2-戊酮	107-87-9	86

表 D.1 目标外化合物定性参照表 (续)

序号	化合物名称	CAS 号	摩尔质量 (g/mol)
71	二乙基酮	96-22-0	86
72	异戊醛	590-86-3	86
73	3-甲基-2-丁酮	563-80-4	86
74	异硫氰酸乙酯	542-85-8	87
75	氯丁二烯	126-99-8	88、90
76	乙酸乙酯	107-92-6	88
77	乙酰甲基甲醇	513-86-0	88
78	甲酸正丙酯	110-74-7	88
79	异戊醇	123-51-3	88
80	正戊醇	71-41-0	88
81	叔戊醇	75-85-4	88
82	3-戊醇	584-02-1	88
83	2-二甲氨基乙醇	108-01-0	89
84	异丁硫醇	513-44-0	90
85	乙二醇独乙醚	110-80-5	90
86	叔丁基过氧化氢	75-91-2	90
87	2-甲基吡啶	109-06-8	93
88	氯甲基乙基醚	3188-13-4	94、96
89	苯酚	108-95-2	94
90	2-氨基吡啶	504-29-0	94
91	糠醛	98-01-1	96
92	单氟苯	462-06-6	96
93	糠醇	98-00-0	98
94	环己酮	108-94-1	98
95	1-庚烯	592-76-7	98
96	异硫氰酸烯丙酯	57-06-7	99
97	N-甲基-2-吡咯烷酮	2687-44-7	99
98	环己胺	108-91-8	99
99	四氟乙烯	116-14-3	100
100	戊二醛	111-30-8	100
101	2, 4-戊二酮	123-54-6	100
102	乙烯基丁醚	<u>111-34-2</u>	100
103	己醛	66-25-1	100
104	环己醇	108-93-0	100
105	甲基丁基酮	591-78-6	100
106	二正丙胺	142-84-7	101
107	二异丙胺	108-18-9	101
108	三乙胺	121-44-8	101

表 D.1 目标外化合物定性参照表 (续)

序号	化合物名称	CAS 号	摩尔质量 (g/mol)
109	异丁酸甲酯	547-63-7	102
110	乙酸正丙酯	109-60-4	102
111	丙酸乙酯	105-37-3	102
112	甲酸异丁酯	542-55-2	102
113	乙酸异丙烷	108-21-4	102
114	丁酸甲酯	623-42-7	102
115	正丙醚	111-43-3	102
116	异丙醚	108-20-3	102
117	2-乙基-1-丁醇	97-95-0	102
118	异戊醚	544-01-4	102
119	1-二甲胺基-2-丙酮	15364-56-4	103
120	二亚乙基三胺	111-40-0	103
121	环辛四烯	629-20-9	104
122	二乙氧基甲烷	462-95-3	104
123	1-氯丁酮	4091-39-8	106、108
124	苯甲醛	100-52-7	106
125	邻甲苯胺	95-53-4	107
126	2,5-甲基吡啶	589-93-5	107
127	溴乙烯	593-60-2	106、108
128	氯乙酸甲酯	96-34-4	108、110
129	间甲苯酚	108-39-4	108
130	邻甲苯酚	95-48-7	108
131	对甲苯酚	106-44-5	108
132	苯甲醇	100-51-6	108
133	苯甲醚	100-66-3	108
134	2-氨基-3-甲基吡啶	1603-40-3	108
135	苯肼	100-63-0	108
136	4-乙烯-1-环己烯	100-40-3	108
137	间氟代甲苯	352-70-5	110
138	邻氟代甲苯	95-52-3	110
139	对氟代甲苯	352-32-9	110
140	甲基环己酮	583-60-8	110
141	1-辛烯	111-66-0	112
142	2-辛烯	111-67-1	112
143	1,2-二氟苯	367-11-3	114
144	甲基丙烯酸乙酯	97-63-2	114
145	庚醛	117-71-7	114
146	2-庚酮	110-43-0	114
147	3-庚酮	106-35-4	114

表 D.1 目标外化合物定性参照表 (续)

序号	化合物名称	CAS 号	摩尔质量 (g/mol)
148	4-庚酮	123-19-3	114
149	2, 4-二甲基-3-戊酮	565-80-0	114
150	2, 4-二甲基己烷	589-43-5	114
151	2, 5-二甲基己烷	592-13-2	114
152	丙烯酸乙酯	140-88-5	116
153	乙酸异丁酯	110-19-0	116
154	双丙酮醇	123-42-2	116
155	乙酸正丁酯	123-86-4	116
156	乙酸仲丁酯	105-46-4	116
157	乙酸叔丁酯	540-88-5	116
158	正庚醇	111-70-6	116
159	苯乙腈	140-29-4	117
160	二乙氨基乙醇	100-37-8	117
161	2-氯噻吩	96-43-5	118、120
162	对甲基苯乙烯	622-97-9	118
163	正二丙硫醚	111-47-7	118
164	乙二醇独丁醚	111-76-2	118
165	乙二醇二丁醚	112-48-1	118
166	异氰酸苯酯	103-71-9	119
167	3-溴丙烯	106-95-6	120、122
168	苯乙酮	98-86-2	120
169	氯代正己烷	544-10-5	120、122
170	2, 4-二甲基苯胺	95-68-1	121
171	2, 4, 6-三甲基吡啶	108-75-8	121
172	溴代异丙烷	75-26-3	122、124
173	溴代正丙烷	106-94-5	122、124
174	氯乙酸乙酯	105-39-5	122、124
175	二乙基化二硫	110-81-6	122
176	水杨醛	90-12-8	122
177	苯乙醇	60-12-8	122
178	硝基苯	98-95-3	123
179	苄硫醇	100-53-8	124
180	1, 1-二氯丙酮	534-07-6	126、128
181	1, 4-二氯丁烷	110-56-5	126、128
182	邻氯甲苯	95-49-8	126、128
183	二氯乙酸	79-43-6	128、130
184	丙烯酸丁酯	141-32-2	128
185	5-甲基-3-庚酮	541-85-5	128

表 D.1 目标外化合物定性参照表 (续)

序号	化合物名称	CAS 号	摩尔质量 (g/mol)
186	辛醛	124-13-0	128
187	3-辛酮	106-68-3	128
188	二正丁胺	111-92-2	129
189	1-氯-2-氟苯	348-51-6	130、132
190	乙酰乙酸乙酯	141-97-9	130
191	乙酸异戊酯	123-92-2	130
192	仲辛醇	4128-31-8	130
193	2-乙基己醇	104-76-7	130
194	正丁醚	142-96-1	130
195	1,2,4-三氟苯	367-23-7	132
196	1,3,5-三氟苯	372-38-3	132
197	乙酸溶纤剂	112-07-2	132
198	二聚环戊二烯	77-73-6	132
199	正壬醇	143-08-8	132
200	乙二醇乙醚	111-90-0	134
201	对异丙基苯甲烷	99-87-6	134
202	正丁苯	104-51-8	134
203	异丁基苯	538-93-2	134
204	溴代正丁烷	109-65-9	136、138
205	1-溴-2-甲基丙烷	78-77-3	136、138
206	蒎烯	2437-95-8	136
207	苯甲酸甲酯	93-58-3	136
208	甲基苯乙烯	1319-73-9	138
209	十氢萘	91-17-8	138
210	对氯苯乙烯	1073-67-2	138、140
211	甲基碘	74-88-4	142
212	二氯乙酸甲酯	116-54-1	142、144
213	三氟化硼乙醚	109-63-7	142
214	α -甲基萘	1321-94-4	142
215	甲基丙烯酸丁酯	97-88-1	142
216	2,6-二甲基-4-庚酮	108-83-8	142
217	5-壬酮	502-56-7	142
218	三氯乙醛	75-87-6	146、148、150
219	三氟甲基苯	98-08-8	146
220	三亚乙基四胺	112-24-3	146
221	三乙醇胺	102-71-6	149
222	二乙基苯胺	579-66-8	149
223	3-溴-2-丁酮	/	150、152
224	1-溴戊烷	110-53-2	150、152

表 D.1 目标外化合物定性参照表 (续)

序号	化合物名称	CAS 号	摩尔质量 (g/mol)
225	二丙基二硫醚	629-19-6	150
226	苯甲酸乙酯	93-89-0	150
227	水杨酸甲酯	119-36-8	152
228	碘乙烷	75-03-6	156
229	溴苯	108-86-1	156、158
230	2-癸酮	693-54-9	156
231	2-溴吡啶	109-04-6	157、159
232	邻硝基氯代苯	88-73-3	157、159
233	正癸醇	112-30-1	158
234	二氯化苳	98-87-3	160、162
235	六甲基二硅胺烷	999-97-3	161
236	2-溴噻吩	1003-09-4	162、164
237	1-十二烯	112-41-4	166
238	1-碘丙烷	107-08-4	168
239	2-碘丙烷	75-30-9	170
240	异碘丙烷	75-30-9	170
241	对溴甲苯	106-38-7	170、172
242	苯基醚	101-84-8	170、172
243	二溴甲烷	74-95-3	170
244	苯磺酰氯	98-09-9	176、178
245	磷酸三乙酯	78-40-0	176
246	二溴乙烯	540-49-8	184、186、188
247	1-碘丁烷	542-69-8	184
248	1-碘-2-甲基丙烷	513-38-2	184
249	正十三烷	629-50-5	184
250	三氯乙酸乙酯	515-84-4	190、192、194
251	1-溴辛烷	111-83-1	192、194
252	三氟碘甲烷	2314-97-8	196
253	1-碘戊烷	628-17-1	198
254	1,3-二溴丙烷	109-64-8	200、202、204
255	1-十二硫醇	112-55-0	202
256	碘苯	591-50-4	204
257	二溴氯甲烷	124-48-1	206、208、210
258	2-碘甲苯	615-37-2	208
259	1-氯-2-碘苯	615-41-8	238、240
260	溴仿	75-25-2	252、254
261	三溴乙烯	598-16-3	264、266

