

DZ

中华人民共和国地质矿产行业标准

DZ/T XXXXX—202X

地下水水质分析方法
第 107 部分：59 种挥发性有机物的测定
吹扫捕集/气相色谱-质谱法

Methods for analysis of groundwater Part 107: Determination of 59 Volatile
organic compounds P&T- Gas Chromatography- Mass Spectrometry

(点击此处添加与国际标准一致性程度的标识)

(征求意见稿)

在提交反馈意见时，请将您知道的相关专利连同支持性文件一并附上。

XXXX - XX - XX 发布

XXXX - XX - XX 实施

中华人民共和国自然资源部 发布

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》的规定和GB/T 20001.4—2015《标准编写规则 第4部分：试验方法标准》的规定起草。

本文件是《地下水水质分析方法》的第xx部分。DZ/T 0064已经发布了以下部分：

- 第1部分：一般要求；
- 第2部分：水样的采集和保存；
- 第3部分：温度的测定 温度计（测温仪）法；
- 第4部分：色度的测定 铂-钴标准比色法；
- 第5部分：pH值的测定 玻璃电极法；
- 第6部分：电导率的测定 电极法；
- 第7部分：Eh值的测定 电位法；
- 第8部分：悬浮物的测定 重量法；
- 第9部分：溶解性固体总量的测定 重量法；
- 第10部分：砷量的测定 二乙基二硫代氨基甲酸银分光光度法；
- 第11部分：砷量的测定 氢化物发生-原子荧光光谱法；
- 第12部分：钙和镁量的测定 火焰原子吸收分光光度法；
- 第13部分：钙量的测定 乙二胺四乙酸二钠滴定法；
- 第14部分：镁量的测定 乙二胺四乙酸二钠滴定法；
- 第15部分：总硬度的测定 乙二胺四乙酸二钠滴定法；
- 第16部分：催化极谱法测定镉；
- 第17部分：总铬和六价铬量的测定 二苯碳酰二肼分光光度法；
- 第18部分：总铬和六价铬量的测定 催化极谱法；
- 第19部分：催化极谱法测定铜；
- 第20部分：铜、铅、锌、镉、镍和钴量的测定 螯合树脂交换富集-火焰原子吸收分光光度法；
- 第21部分：铜、铅、锌、镉、镍、铬、钼和银量的测定 无火焰原子吸收分光光度法；
- 第22部分：铜、铅、锌、镉、锰、铬、镍、钴、钒、锡、铍和钛量的测定 电感耦合等离子体发射光谱法；
- 第23部分：铁量的测定 二氮杂菲分光光度法；
- 第24部分：铁量的测定 硫氰酸盐分光光度法；
- 第25部分：铁量的测定 火焰原子吸收分光光度法；
- 第26部分：汞量的测定 冷原子吸收分光光度法；
- 第27部分：钾和钠量的测定 火焰发射光谱法；
- 第28部分：钾、钠、锂和铵量的测定 离子色谱法；
- 第29部分：锂量的测定 火焰发射光谱法；
- 第30部分：锂量的测定 火焰原子吸收分光光度法；
- 第31部分：锰量的测定 过硫酸铵分光光度法；
- 第32部分：锰量的测定 火焰原子吸收分光光度法；
- 第33部分：钼量的测定 催化极谱法；
- 第34部分：催化极谱法测定镍和钴；
- 第35部分：催化极谱法测定铅；
- 第36部分：铷和铯量的测定 火焰发射光谱法；
- 第37部分：硒量的测定 催化极谱法；
- 第38部分：硒量的测定 氢化物发生-原子荧光光谱法；
- 第39部分：锑量的测定 火焰发射光谱法；

- 第40部分：催化极谱法测定钒；
- 第41部分：催化极谱法测定锌；
- 第42部分：钙、镁、钾、钠、铝、铁、锶、钡和锰量的测定 电感耦合等离子体发射光谱法；
- 第43部分：酸度的测定 滴定法；
- 第44部分：硼量的测定 H酸-甲亚胺分光光度法；
- 第45部分：硼量的测定 甘露醇碱滴定法；
- 第46部分：溴化物的测定 溴酚红分光光度法；
- 第47部分：游离二氧化碳的测定 滴定法；
- 第48部分：侵蚀性二氧化碳的测定 滴定法；
- 第49部分：碳酸根、重碳酸根和氢氧根的测定 滴定法；
- 第50部分：氯化物的测定 银量滴定法；
- 第51部分：氯化物、氟化物、溴化物、硝酸盐和硫酸盐的测定 离子色谱法；
- 第52部分：氰化物的测定 吡啶-吡啶酮分光光度法；
- 第53部分：氟化物的测定 茜素络合物分光光度法；
- 第54部分：氟化物的测定 离子选择性电极法；
- 第55部分：碘化物的测定 催化还原分光光度法；
- 第56部分：碘化物的测定 淀粉分光光度法；
- 第57部分：氨氮的测定 纳氏试剂分光光度法；
- 第58部分：硝酸盐的测定 二磺酸酚分光光度法；
- 第59部分：硝酸盐的测定 紫外分光光度法；
- 第60部分：亚硝酸盐的测定 分光光度法；
- 第61部分：磷酸盐的测定 磷钼钼蓝分光光度法；
- 第62部分：硅酸的测定 硅钼黄分光光度法；
- 第63部分：硅酸的测定 硅钼蓝分光光度法；
- 第64部分：硫酸盐的测定 乙二胺四乙酸二钠-钡滴定法；
- 第65部分：硫酸盐的测定 比浊法；
- 第66部分：硫化物的测定 碘量法；
- 第67部分：硫化物的测定 对氨基二甲基苯胺分光光度法；
- 第68部分：耗氧量的测定 酸性高锰酸钾滴定法；
- 第69部分：耗氧量的测定 碱性高锰酸钾滴定法；
- 第70部分：耗氧量的测定 重铬酸钾滴定法；
- 第71部分： α -六六六、 β -六六六、 γ -六六六、 δ -六六六、六氯苯、p, p'-滴滴伊、p, p'-滴滴滴、o, p'-滴滴涕和p, p'-滴滴涕的测定 气相色谱法；
- 第72部分：敌敌畏、甲拌磷、乐果、甲基对硫磷、马拉硫磷、毒死蜱和对硫磷的测定 气相色谱法；
- 第73部分：挥发性酚的测定 4-氨基安替吡啶分光光度法；
- 第74部分：氦气、氢气、氧气、氩气、氮气、甲烷、一氧化碳、二氧化碳和硫化氢的测定 气相色谱法；
- 第75部分：镭和氡放射性的测定 射气法；
- 第76部分：总 α 和总 β 放射性的测定 放射化学法；
- 第77部分： ^{18}O 的测定 CO_2 - H_2O 平衡-气体同位素质谱法；
- 第78部分：氡的测定 金属锌还原-气体同位素质谱法；
- 第79部分：氡的测定 放射化学法；
- 第80部分：锂、铷、铯等40个元素量的测定 电感耦合等离子体质谱法；
- 第81部分：汞量的测定 原子荧光光谱法；
- 第82部分：钠量的测定 火焰原子吸收分光光度法；
- 第83部分：铜、锌、镉、镍和钴量的测定 火焰原子吸收分光光度法；
- 第84部分：锶量的测定 火焰原子吸收分光光度法；
- 第85部分：挥发性酚的测定 流动注射在线蒸馏法；

- 第86部分：氰化物的测定 流动注射在线蒸馏法；
- 第87部分： ^{13}C 的测定 在线磷酸酸解-气体同位素质谱法；
- 第88部分： ^{14}C 的测定 合成苯-液体闪烁计数法；
- 第89部分：氘的测定 在线高温热转换-气体同位素质谱法；
- 第90部分： ^{18}O 的测定 在线 $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O}$ 平衡-气体同位素质谱法；
- 第91部分：二氯甲烷、氯乙烯、1,1-二氯乙烷等24种挥发性卤代烃类化合物的测定 吹扫捕集/气相色谱-质谱法。
- 第92部分：68种农药含量的测定 气相色谱-质谱法。
- 第93部分：70种半挥发性有机物含量的测定。
- 第94部分：38种多环芳烃衍生物及母体含量的测定 气相色谱-质谱法。
- 第95部分：15种激素含量的测定 液相色谱-质谱法。
- 第96部分：43种农药含量的测定 液相色谱-三重四极杆串联质谱法。
- 第97部分：31种抗生素含量的测定 液相色谱-质谱法。
- 第98部分：铈和铈含量的测定 电感耦合等离子体质谱法。
- 第99部分：铈含量的测定 氢化物发生-原子荧光光谱法。
- 第100部分：阴离子表面活性剂的测定 二氮杂菲萃取分光光度法。
- 第101部分：阴离子表面活性剂的测定 流动注射在线萃取法。
- 第102部分：多氯联苯的测定 气相色谱-质谱法。
- 第103部分：多环芳烃的测定 气相色谱-质谱法。
- 第104部分：6种酚类化合物的测定 高效液相色谱法。
- 第105部分：邻苯二甲酸酯类化合物的测定 气相色谱-质谱法。
- 第106部分：总石油烃及单体正构烷烃（ $\text{C}_{10}\text{-C}_{40}$ ）测定 气相色谱法。
- 第107部分：59种挥发性有机物的测定 吹扫捕集/气相色谱-质谱法。
- 第108部分：草甘膦、草铵膦和氨甲基膦酸测定 液相色谱-三重四极杆串联质谱法。

本文件由中华人民共和国自然资源部提出。

本文件由全国自然资源与国土空间规划标准化技术委员会（SAC/TC 93）归口。

本文件起草单位：国家地质实验测试中心、中国冶金地质总局山东局测试中心、中冶一局环境科技有限公司测试中心、山西省岩矿测试应用研究所、河北省地质实验测试中心、中国水利水电科学研究院、自然资源部南京矿产资源检测中心、山东省分析测试中心、北京师范大学。

本文件主要起草人贾静、朱帅、杨志鹏、刘晨、饶竹、杨利娟、赵高峰、冯丽、李国傲、高冉、陈相峰、张青、张泽华、张婷婷、高翔云、王磊。

引 言

为满足我国地下水水质检测分析工作需要，配套GB/T 14848《地下水质量标准》实施，原地质矿产部于1993年制定发布了DZ/T 0064《地下水水质检验方法》，分为总则、水样的采集与保存、各项水质检测方法等共80个部分。

按照标准修订计划安排，DZ/T 0064《地下水水质检验方法》进行修订，于2021年发布。本次修订保留了DZ/T 0064-1993第16、19、34、35、40、41部分等与催化极谱法测定有关的6个部分，对其他74个部分进行了修订，新制定测定方法标准11个部分。修订后的DZ/T 0064更名为《地下水水质分析方法》，由108个部分构成。

- 第1部分：一般要求；
- 第2部分：水样的采集和保存；
- 第3部分：温度的测定 温度计（测温仪）法；
- 第4部分：色度的测定 铂-钴标准比色法；
- 第5部分：pH值的测定 玻璃电极法；
- 第6部分：电导率的测定 电极法；
- 第7部分：Eh值的测定 电位法；
- 第8部分：悬浮物的测定 重量法；
- 第9部分：溶解性固体总量的测定 重量法；
- 第10部分：砷量的测定 二乙基二硫代氨基甲酸银分光光度法；
- 第11部分：砷量的测定 氢化物发生-原子荧光光谱法；
- 第12部分：钙和镁量的测定 火焰原子吸收分光光度法；
- 第13部分：钙量的测定 乙二胺四乙酸二钠滴定法；
- 第14部分：镁量的测定 乙二胺四乙酸二钠滴定法；
- 第15部分：总硬度的测定 乙二胺四乙酸二钠滴定法；
- 第16部分：催化极谱法测定镉；
- 第17部分：总铬和六价铬量的测定 二苯碳酰二肼分光光度法；
- 第18部分：总铬和六价铬量的测定 催化极谱法；
- 第19部分：催化极谱法测定铜；
- 第20部分：铜、铅、锌、镉、镍和钴量的测定 螯合树脂交换富集-火焰原子吸收分光光度法；
- 第21部分：铜、铅、锌、镉、镍、铬、钼和银量的测定 无火焰原子吸收分光光度法；
- 第22部分：铜、铅、锌、镉、锰、铬、镍、钴、钒、锡、铍和钛量的测定 电感耦合等离子体发射光谱法；
- 第23部分：铁量的测定 二氮杂菲分光光度法；
- 第24部分：铁量的测定 硫氰酸盐分光光度法；
- 第25部分：铁量的测定 火焰原子吸收分光光度法；
- 第26部分：汞量的测定 冷原子吸收分光光度法；
- 第27部分：钾和钠量的测定 火焰发射光谱法；
- 第28部分：钾、钠、锂和铵量的测定 离子色谱法；
- 第29部分：锂量的测定 火焰发射光谱法；
- 第30部分：锂量的测定 火焰原子吸收分光光度法；
- 第31部分：锰量的测定 过硫酸铵分光光度法；
- 第32部分：锰量的测定 火焰原子吸收分光光度法；
- 第33部分：钼量的测定 催化极谱法；
- 第34部分：催化极谱法测定镍和钴；
- 第35部分：催化极谱法测定铅；
- 第36部分：铷和铯量的测定 火焰发射光谱法；
- 第37部分：硒量的测定 催化极谱法；

- 第38部分：硒量的测定 氢化物发生-原子荧光光谱法；
- 第39部分：锑量的测定 火焰发射光谱法；
- 第40部分：催化极谱法测定钒；
- 第41部分：催化极谱法测定锌；
- 第42部分：钙、镁、钾、钠、铝、铁、锶、钡和锰量的测定 电感耦合等离子体发射光谱法；
- 第43部分：酸度的测定 滴定法；
- 第44部分：硼量的测定 H酸-甲亚胺分光光度法；
- 第45部分：硼量的测定 甘露醇碱滴定法；
- 第46部分：溴化物的测定 溴酚红分光光度法；
- 第47部分：游离二氧化碳的测定 滴定法；
- 第48部分：侵蚀性二氧化碳的测定 滴定法；
- 第49部分：碳酸根、重碳酸根和氢氧根的测定 滴定法；
- 第50部分：氯化物的测定 银量滴定法；
- 第51部分：氯化物、氟化物、溴化物、硝酸盐和硫酸盐的测定 离子色谱法；
- 第52部分：氰化物的测定 吡啶-吡啶酮分光光度法；
- 第53部分：氟化物的测定 茜素络合物分光光度法；
- 第54部分：氟化物的测定 离子选择性电极法；
- 第55部分：碘化物的测定 催化还原分光光度法；
- 第56部分：碘化物的测定 淀粉分光光度法；
- 第57部分：氨氮的测定 纳氏试剂分光光度法；
- 第58部分：硝酸盐的测定 二磺酸酚分光光度法；
- 第59部分：硝酸盐的测定 紫外分光光度法；
- 第60部分：亚硝酸盐的测定 分光光度法；
- 第61部分：磷酸盐的测定 磷钼钼蓝分光光度法；
- 第62部分：硅酸的测定 硅钼黄分光光度法；
- 第63部分：硅酸的测定 硅钼蓝分光光度法；
- 第64部分：硫酸盐的测定 乙二胺四乙酸二钠-钡滴定法；
- 第65部分：硫酸盐的测定 比浊法；
- 第66部分：硫化物的测定 碘量法；
- 第67部分：硫化物的测定 对氨基二甲基苯胺分光光度法；
- 第68部分：耗氧量的测定 酸性高锰酸钾滴定法；
- 第69部分：耗氧量的测定 碱性高锰酸钾滴定法；
- 第70部分：耗氧量的测定 重铬酸钾滴定法；
- 第71部分： α -六六六、 β -六六六、 γ -六六六、 δ -六六六、六氯苯、p, p'-滴滴伊、p, p'-滴滴涕、o, p'-滴滴涕和p, p'-滴滴涕的测定 气相色谱法。
- 第72部分：敌敌畏、甲拌磷、乐果、甲基对硫磷、马拉硫磷、毒死蜱和对硫磷的测定 气相色谱法。
- 第73部分：挥发性酚的测定 4-氨基安替吡啶分光光度法。
- 第74部分：氦气、氢气、氧气、氙气、氮气、甲烷、一氧化碳、二氧化碳和硫化氢的测定 气相色谱法。
- 第75部分：镭和氡放射性的测定 射气法。
- 第76部分：总 α 和总 β 放射性的测定 放射化学法。
- 第77部分：180的测定 CO₂-H₂O平衡-气体同位素质谱法。
- 第78部分：氡的测定 金属锌还原-气体同位素质谱法。
- 第79部分：氡的测定 放射化学法。
- 第80部分：锂、铷、铯等40个元素量的测定 电感耦合等离子体质谱法。
- 第81部分：汞量的测定 原子荧光光谱法。
- 第82部分：钠量的测定 火焰原子吸收分光光度法。
- 第83部分：铜、锌、镉、镍和钴量的测定 火焰原子吸收分光光度法。

- 第84部分：铈量的测定 火焰原子吸收分光光度法。
- 第85部分：挥发性酚的测定 流动注射在线蒸馏法。
- 第86部分：氰化物的测定 流动注射在线蒸馏法。
- 第87部分：13C的测定 在线磷酸酸解-气体同位素质谱法。
- 第88部分：14C的测定 合成苯-液体闪烁计数法。
- 第89部分：氘的测定 在线高温热转换-气体同位素质谱法。
- 第90部分：18O的测定 在线CO₂-H₂O平衡-气体同位素质谱法。
- 第91部分：二氯甲烷、氯乙烯、1,1-二氯乙烷等24种挥发性卤代烃类化合物的测定 吹扫捕集/气相色谱-质谱法。

此次补充后的DZ/T 0064 拟由108个部分构成。

- 第92部分：68种农药含量的测定 气相色谱-质谱法。
- 第93部分：70种半挥发性有机物含量的测定。
- 第94部分：38种多环芳烃衍生物及母体含量的测定 气相色谱-质谱法。
- 第95部分：15种激素含量的测定 液相色谱-质谱法。
- 第96部分：43种农药含量的测定 液相色谱-三重四极杆串联质谱法。
- 第97部分：31种抗生素含量的测定 液相色谱-质谱法。
- 第98部分：铈和铈含量的测定 电感耦合等离子体质谱法。
- 第99部分：铈含量的测定 氢化物发生-原子荧光光谱法。
- 第100部分：阴离子表面活性剂的测定 二氮杂菲萃取分光光度法。
- 第101部分：阴离子表面活性剂的测定 流动注射在线萃取法。
- 第102部分：多氯联苯的测定 气相色谱-质谱法。
- 第103部分：多环芳烃的测定 气相色谱-质谱法。
- 第104部分：6种酚类化合物的测定 高效液相色谱法。
- 第105部分：邻苯二甲酸酯类化合物的测定 气相色谱-质谱法。
- 第106部分：总石油烃及单体正构烷烃（C₁₀-C₄₀）测定 气相色谱法。
- 第107部分：59种挥发性有机物的测定 吹扫捕集/气相色谱-质谱法。
- 第108部分：草甘膦、草铵膦和氨甲基膦酸测定 液相色谱-三重四极杆串联质谱法。

DZ/T 0064的第1部分其目的在于规定地下水水质分析的一般要求，第2部分其目的在于规定水样的采集与保存要求，第3至108部分其目的在于规定常用地下水质量指标分析测定方法及要求。

地下水水质分析方法

第 107 部分： 59 种挥发性有机物的测定

吹扫捕集/气相色谱-质谱法

警示——使用本标准的人员应具有气相色谱-质谱使用经验或在有气相色谱-质谱使用经验的分析人员指导下操作；分析中使用的标准溶液、替代物标准及有机溶剂等有毒或潜在有毒，应在通风橱中使用，并按规定佩戴防护器具、避免触及皮肤和衣物、妥善处置样品残液。有害残液应予以回收进行无害化处置。本警示并未指出所有可能的危害，使用者有责任采取适当措施确保安全，并保证符合国家相关法规和标准。

1 范围

本文件规定了地下水样品中氯甲烷、氯乙烯、苯、甲基叔丁基醚等59种挥发性有机物的测定，详细组分列表见附录A，其他挥发性组分经验证后也可用本方法测定。适用于地下水资源调查、评价、监测等工作。本文件经验证后可用于地表水、饮用水、海水、粪水测定。

当取样量为5.0mL时，气相色谱质谱仪全扫描检测模式下，方法检出限为0.05 µg/L~0.23 µg/L，方法定量限为0.18 µg/L~0.92 µg/L；选择离子扫描检测模式下，方法检出限为0.03 µg/L~0.21 µg/L，方法定量限为0.11 µg/L~0.85 µg/L。详见附录B。

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。其中，注日期的引用文件，仅该日期对应的版本适用于本文件；不注日期的引用文件，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本文件。

GB/T 4883 数据的统计处理和解释 正态样本离群值的判断和处理

GB/T 5750-2006 生活饮用水标准检验方法

GB/T 5750.2-2006 生活饮用水标准检验方法 水样的采集与保存

GB/T 6379 测量方法与结果的准确度（正确度与精密度）

GB/T 14848 地下水质量标准

HJ/T 164-2020地下水环境监测技术规范

3 术语和定义

本文件没有需要界定的术语和定义。

4 原理

借助吹扫-捕集装置，高纯氮（或氮）气将地下水试样中低水溶性的挥发性有机物、内标、替代物标准吹出并被吸附剂吸附，吸附的挥发性有机物经升温脱附后，高纯氮气导入气相色谱毛细管柱分离、质谱检测器检测。以试样组分质谱图、保留时间与标准组分质谱图和保留时间对比并结合标准谱库质谱图进行定性分析；以试样与标准组分的仪器响应值（峰面积或峰高）进行定量分析。

5 试剂与材料

5.1 试验用水

不含待测组分或待测组分质量浓度低于方法检出限的纯净水、蒸馏水或矿泉水。取与样品体积相同的上述水体按本方法检测后应满足上述要求。如果待测组分质量浓度超过方法检出限，可在高纯氮气流下煮沸30 min加以去除。

5.2 混合标准储备液

有证标准溶液。挥发性有机物混合标准储备溶液质量浓度约为1000 $\mu\text{g/mL}$ 。检测组分见附录A。购买的标准溶液应经不同源的标准样品核查合格后使用。

5.3 标准使用液

用微量气密性注射器（6.5）准确移取适量混合标准储备溶液（5.2）至已有一定量甲醇的2 mL容量瓶中，并用甲醇稀释定容，以此作为标准使用液，稀释后浓度应低于标准储备液1~2个数量级。

5.4 替代物 SS

4-溴氟苯、甲苯-d₈、二溴氟甲烷等标准品，甲醇介质。依据仪器灵敏度确定替代物标准添加质量浓度。添加方法：吹扫-捕集前将质量浓度为25.0 $\mu\text{g/mL}$ ~50.0 $\mu\text{g/mL}$ 替代物标准1.0 μL 添加到标准样品、空白样品和样品中。

5.5 内标 IS

氟苯、1,2-二氯苯-d₄等标准品，甲醇介质。依据仪器灵敏度确定内标添加质量浓度。添加方法：吹扫-捕集前将质量浓度为25.0 $\mu\text{g/mL}$ ~50.0 $\mu\text{g/mL}$ 的内标1.0 μL 添加到标准样品、空白样品和样品中。

5.6 4-溴氟苯 BFB

质量浓度为25.0 $\mu\text{g/mL}$ ~50.0 $\mu\text{g/mL}$ ，甲醇介质。

注1：有证标准应按标准生产厂商推荐的条件保存和使用；自配标准应在-24 $^{\circ}\text{C}$ 下避光、密闭保存。有证、自配标准、稀释的各类标准原则性应为一次性使用。各类标准使用前应恢复到室温。

注2：定期检查标准溶液，及时更换过期或偏差大于15 %的标准溶液。

5.7 甲醇

农残级或相当级别。不含待测组分，贮存在无污染的区域。

5.8 磷酸溶液

优级纯浓磷酸与试验用水（4.1）配制而成。配制比例为 $V_{(\text{H}_3\text{PO}_4)}:V_{(\text{H}_2\text{O})}=2:1$ 。

5.9 载气与吹扫气

氦气、氮气，纯度 $\geq 99.999\%$ ，分别通过含5A分子筛、活性炭、硅胶的净化管净化。

6 仪器设备

6.1 气相色谱-质谱仪

四极杆、离子阱气相色谱-质谱联用仪或类似联用分析仪器。气相色谱具有毛细管柱分流/不分流进样口，可程序升温。质谱仪带电子轰击离子源（EI），扫描速度 $\geq 1000\text{ amu/s}$ ，配备数据处理系统。仪器应检定合格后检定并在有效期内使用，仪器灵敏度应满足要求。

6.2 吹扫-捕集系统

由吹扫装置、捕集管及脱附装置组成，系统带捕集阱，捕集阱填料为各为1/3的聚2,6-苯基对苯醚（Tenax）/ 硅胶/ 碳分子筛。

6.3 吹扫管

5 mL、25 mL砂芯式吹扫管。根据检测需要和气相色谱—质谱仪灵敏度选择吹扫管。一般选用5 mL吹扫管，需更高灵敏检测可选用25 mL吹扫管。

6.4 毛细管气相色谱柱

6%腈丙基苯基—94%二甲基聚硅氧烷的分析柱，规格60 m×0.32 mm i.d，1.8 μm膜厚；或其他等效毛细管色谱柱。

6.5 注射器

气密性注射器，规格10μL，25 μL，50μL，100μL，250μL，1mL和5mL。

6.6 容量瓶

玻璃容量瓶，容积50mL、100mL，具磨口塞，A级。

6.7 样品瓶

带螺旋盖、40 mL棕色VOA瓶，配聚四氟乙烯膜的硅胶瓶垫。

6.8 低温冷藏设备

存放样品，温度能保持在4 °C左右的冷藏设备。

7 样品采集与保存

7.1 采样准备

正压泵用于地下水样品采集。抽水泵排水管带有可控阀门。抽水泵和套管材质为经过钝化处理的碳钢或不锈钢或聚四氟乙烯。待水温、pH值、电导率等水质指标稳定后开始采样。采样流速为200 mL/min~500 mL/min。

7.2 采样方法

倾斜40 mL样品瓶（6.7），将水样缓慢导入样品瓶至瓶满并形成一向上弯月面（不能溢出，若溢出应换新瓶重新采集），旋即拧紧瓶盖（密封垫聚四氟乙烯膜一面对着样品）。颠倒小瓶、轻敲，检查是否有气泡；若无气泡，迅速贴好标签，并放入带密封条的塑料袋、倒置放入4 °C左右的低温冷藏设备（6.8）中；若有气泡，须重新采集。样品导入时应避免搅动、防止挥发性有机物逸出和空气气泡产生。每个样品至少应同时采集正副样各一瓶。样品采集后应尽快检测。如存放时间超过7天，需添加4滴磷酸溶液（5.8）约50 μL，延长保存时间。

7.3 现场质量控制样采集

样品采集前将试验用水（5.1）装入40 mL样品瓶（6.7）制成现场空白样。现场空白样在采样现场打开瓶盖放置，直至采样过程结束后盖好，与样品同步保存运输。每20个样品为一批，总数不足20个亦为一批。每批至少采集一个现场空白样、一个平行样。现场平行样采集方法同7.2。

7.4 样品保存

样品采集后冷藏运输，运回实验室后应立即放入冰箱，4 °C左右保存，防止样品瓶冻裂，14天内分析完毕。保存区域不得含有挥发性有机物蒸汽。

8 分析步骤

8.1 参考分析条件

8.1.1 吹扫-捕集条件

吹扫气(5.9)流速30 mL/min~40 mL/min; 吹扫温度40 °C; 吹扫时间10 min ~15 min; 捕集阱(6.2); 解析预热温度180 °C, 解析温度190 °C, 解析时间1.5 min; 烘焙温度220 °C, 烘焙时间8 min~10 min。 阀温110 °C, 传输线温度110 °C。

8.1.2 气相色谱条件

载气(5.9)流速1.20 mL/min; 进样口温度190 °C; 分流进样, 分流比10:1; 柱前压73 Kpa; 升温程序: 初温40 °C, 保持2 min; 以6 °C/min升至150 °C; 再以12 °C/min升至220 °C, 保持4 min。 毛细管色谱柱(6.4)。

8.1.3 质谱条件

气相色谱-质谱仪(6.1), 电离能量70 eV, 离子源温度200 °C, 接口温度220 °C。全扫描(Full Scan), 扫描范围45 amu~300 amu, 扫描时间0.45 s; 遇基质极复杂情况可用选择离子扫描(SIM)检测模式。溶剂延迟时间3 min。组分定性、定量特征质量离子见附录C。59种挥发性有机物标准样品总离子流色谱图见附录D。

8.2 标准样品配制

将约为40 mL试验用水(5.1)置入50 mL容量瓶(6.6)中, 用气密性注射器(6.5)从液面下准确注入适量标准使用液(5.3), 迅速用试验用水定容、盖上塞子、上下颠倒振摇3次, 放置5 min。如果由自动进样器进样, 混匀后标准样品立即转移至40 mL LVOA瓶(6.7)中保存(注意: 瓶中不能有气泡)。如果手动进样, 仍将标准溶液保存在原容量瓶中。

8.3 标准系列配制

按8.2配制方法配制标准系列。初始标准系列至少含5个质量浓度水平, 质量浓度水平下限为3倍方法检出限, 质量浓度水平上限应与样品质量浓度一致, 但不超过方法的线性范围。本标准配制的标准系列质量浓度为1.00 µg/L, 5.00 µg/L, 10.0 µg/L, 25.0 µg/L, 50.0 µg/L, 100 µg/L。水介质标准系列溶液不稳定, 应现用现配。

8.4 质谱调谐

先用全氟三丁胺(质谱专用调谐液)对气相色谱-质谱仪进行自动调谐, 自动调谐通过后继续用25 ng 4-溴氟苯(4.7)调谐仪器。扣除背景后的4-溴氟苯特征质量离子(m/z)强度应满足表1的规定, 否则应重新调谐质谱仪直至满足要求。

表1 4-溴氟苯特征质量离子强度准则*

质荷比 <i>m/z</i>	相对丰度指标
50	是质量为95离子丰度的15%~40%
75	是质量为95离子丰度的30%~80%
95	基峰, 相对丰度为100%
96	是质量为95离子丰度的5%~9%
173	小于质量为174离子丰度的2%
174	大于质量为95离子丰度的50%
175	是质量为174离子丰度的5%~9%
176	是质量为174离子丰度的95%~101%
177	是质量为176离子丰度的5%~9%

注*: BFB调谐准则来自US EPA 524方法。

8.5 进样方式

8.5.1 手动进样

用5.0mL（或25.0 mL）气密性注射器从已配好的初始标准溶液中抽取略多于5.0mL（或25.0 mL）的标准溶液，倒转注射器，排除空气及多余溶液使标准样品体积为5.0 mL（或25.0 mL），通过吹扫捕集仪吹扫管顶端加入一定量的替代物标准和内标，迅速注入吹扫-捕集装置中，按仪器分析条件（8.1）测定。

8.5.2 自动进样

由自动进样器从40 mL VOA标准溶液样品瓶中抽取5.0 mL标准溶液后注入吹扫-捕集装置中，同时注入一定量的替代物标准和内标，按分析条件（8.1）测定。

8.6 初始校准

将8.3标准系列作为初始标准。通过组分、内标浓度的比值与对应组分、内标仪器响应值的比值（峰面积或峰高）建立标准曲线的回归方程。质量控制要求应满足11.7。

8.7 持续校准

按8.2配制方法配制标准系列中间浓度的标准溶液作为确证标准。当分析超过12 h或每分析一批样品后应用确证标准检查仪器是否偏离初始标准，质量控制要求应满足11.8。

9 检测

分析前将样品和标准恢复到室温。室温宜保持在18℃左右。样品与标准样品同时、同条件分析。

9.1 定性分析

根据样品组分保留时间、质谱图与标准组分保留时间、质谱图比较并结合标准谱库质谱图对待测组分定性。样品组分保留时间应在标准组分保留时间的±2.5%之内。标准质谱图中相对强度大于10%的所有特征质量离子应出现在样品质谱图中，样品中离子强度与标准质谱图中离子强度符合度偏差应在±20%之内。（例：在标准质谱图中丰度为50%的一个离子，在样品质谱图中强度应在30%~70%之间。）

9.2 定量分析

采用标准曲线、内标法定量。对于检出浓度接近检出限的样品，宜采用接近检出限浓度的标准单点进行校正。

9.3 结果计算

检测结果按下述公式计算。

9.3.1 响应因子（RF）的计算

$$R_F = \frac{A_{\text{标}} \times \rho_{\text{内标}}}{A_{\text{内标}} \times \rho_{\text{标}}} \dots\dots\dots (1)$$

式中：

$A_{\text{标}}$ —各标准样品目标物定量离子峰面积。

$A_{\text{内标}}$ —内标物定量离子峰面积。

$\rho_{\text{标}}$ —各标准样品目标物浓度，单位 $\mu\text{g/L}$ 。

$\rho_{\text{内标}}$ —各内标物浓度，单位 $\mu\text{g/L}$ 。

注：各浓度水平的平均响应因子（ R_F ）的RSD小于20%。对于含量接近检出限水平的样品，可采用与之浓度相近的单点标准响应因子校正。响应因子（ R_F ）计算同式（1）

9.3.2 水样测定浓度计算

$$\rho_x = f \times \frac{A_x \times \rho_{\text{内标}}}{A_{\text{内标}} \times R_F^*} \dots\dots\dots (2)$$

式中：

ρ_x —样品中挥发性有机物质量浓度，单位 $\mu\text{g/L}$ 。

f —稀释倍数。

$A_{\text{内标}}$ —内标物定量离子峰面积。

A_x —各目标物定量离子峰面积。

$\rho_{\text{内标}}$ —各内标物浓度，单位 $\mu\text{g/L}$ 。

R_F^* —各浓度水平的平均响应因子。

9.3.3 结果表示

使用本标准中规定的毛细管柱时，间二甲苯和对二甲苯的测定结果为两者之和。水样测定浓度计算若样品质量浓度 $<10.0\mu\text{g/L}$ ，计算结果保留到小数点后两位； $10.0\mu\text{g/L}\leq$ 样品质量浓度 $<100\mu\text{g/L}$ ，计算结果保留到小数点后一位；样品质量浓度 $\geq 100\mu\text{g/L}$ ，计算结果保留到整数位。

10 结果评价

10.1 准确度

依据GB/T6379计算方法正确度和精密度，同一实验室配制5个浓度水平、每个浓度水平3个地下水基体加标平行样，按照样品分析方法考察实验室内方法准确度与精密度，评价方法准确度，参见附录E中标E.1。

10.2 正确度

7家实验室使用不同设备、按照相同测试方法、在较短时间内分别测定5个质量浓度水平、每个浓度水平3个试剂水加标平行样，计算回收率及精密度，评价方法正确度，参见附录E中表E.2。同一实验室配置不同水介质基体加标样每种类型7个平行样，计算平均回收率及相对标准偏差，评价方法正确度，参见附录E中表E.3。

10.3 精密度

7家实验室使用不同设备、按照相同测试方法、在较短时间内分别测定5个质量浓度水平、每个浓度水平3个基体加标平行样，评价方法精密度，其重复性、再现性以95%的置信度计算，参见附录E中表E.4。

10.4 重复性

同一实验室、同一操作者使用相同设备按相同测试方法在短时间内对同一组分进行独立检测，获得的两次质量浓度绝对差值不超过重复性限 r ，超过 r 的情况不超过5%。样品中待测组分质量浓度与其 r 的关系式见附录E中表E.4、表E.5。如果两次测定的质量浓度差值超过了 r ，应舍去检测结果并重新完成两次独立检测。

10.5 再现性

不同实验室、不同操作者使用不同设备按相同测试方法对同一组分进行独立检测，获得的两次质量浓度绝对差值不超过再现性限 R ，超过 R 的情况不超过5%。样品中待测组分质量浓度与其 R 关系式见附录E中表E.4、表E.5。如果两次测定质量浓度差值超过了 R ，应舍去检测结果并重新完成两次独立检测。

11 质量保证和质量控制

11.1 实验室初始试剂与材料空白确认

在分析任何样品之前，均应确认所使用的试剂、材料和玻璃器皿引起的干扰处于误差允许范围之内。每次试剂、材料等改变时，应重新分析试剂空白。

11.2 实验室初始检测能力确认

开展空白加标平行样分析（加标质量浓度约为10倍检出限）3~5份，空白样品加标回收率应在70%~120%、相对标准偏差（RSD） $\leq 20\%$ ；同时获得的方法检出限应满足附录B。

11.3 实验室全流程空白样分析

每批样至少进行一个全流程实验室空白样分析，以监测分析流程中使用的试剂、溶剂和玻璃器皿等带来的干扰。

11.4 实验室空白加标样分析

每批样品至少进行一个实验室空白加标样分析，加标浓度应与样品浓度匹配。如组分加标回收率不在70%~120%，应查找原因并加以解决，否则不能继续样品分析。

11.5 实验室基体加标样分析

每批样品至少进行一个基体加标样分析。加标浓度应与样品浓度匹配。如组分基体加标回收率不在70%~120%，应查找原因；如果样品和分析系统不存在问题，应重新分析基体加标样；若分析结果仍超出控制限，表明实验室分析系统处于受控，加标回收率超差是由样品基体引起的，样品分析结果可以报出，但应注明基体干扰，检测结果供参考。对于没有备份的样品，样品分析结果可以报出，但应注明基体干扰。

11.6 实验室平行样分析

每批样品至少进行一个实验室平行样分析，以评价前处理、仪器测定等分析过程中是否存在问题。平行样相对偏差应满足：当检测结果≤3倍检出限时，平行样相对偏差%≤100；当检测结果>3倍检出限时，平行样相对偏差%≤50。平行样相对偏差计算公式为：

$$\text{平行样相对偏差}\% = \frac{|(A - B)|}{(A + B)/2} \times 100 \dots\dots\dots (3)$$

11.7 初始校准

建立的标准曲线线性相关系数r应满足 $r^2 \geq 0.995$ 。如果 $r^2 < 0.995$ 应检查标准系列、仪器是否存在问题，并恢复正常；如果仪器没有问题应重新配标准曲线使 $r^2 \geq 0.995$ 。如果样品检出浓度超过标准曲线，应稀释后重测或增加标准曲线上限浓度但不超过方法线性范围；或重新减量测定使样品测定浓度保持在标准曲线线性范围内。

11.8 持续校准

当分析超过12h或每分析一批样品后应用确证标准校准、评价仪器工作状态，当确证标准与初始标准的相对偏差超过±20%时，应重新建立校准曲线，重新测定超差样品。

11.9 替代物加标回收率控制限

替代物加标回收率控制限见表2。如果样品替代物加标回收率不在控制限内，应确认替代物加标浓度、仪器和计算是否存在问题。如没有问题或重新分析样品后替代物加标回收率仍不在控制限内，表明检测过程不存在问题，加标回收率超出控制限是由样品基体造成的，替代物回收率以“基体干扰”报出。

表2 替代物加标回收率控制限

替代物标准	回收率R%
二溴氟甲烷	70~120
甲苯-d ₈	70~120
4-溴氟苯	70~120

12 特殊情况处理

在样品运输和贮存过程中，强挥发性氟代烃、二氯甲烷等组分极易穿透样品瓶污染其它样品，每个样品采集后应用塑料袋单独密封保存，并采集现场空白样监测此类污染。现场空白样检测结果与同批次样品检测结果可同时报出，作为运输存储过程情况监控。

全流程空白样分析可以反映室内挥发性有机物、非聚四氟乙烯管路、吹扫气不纯和捕集阱等对样品造成的污染。如果空白样中存在待测组分，应查找原因，必要时更换吹扫气、试剂和再生分子筛净化管等，不能采用从检测结果中扣空白值的办法。

注意样品分析时高浓度与低浓度间的交叉污染。

附录 A

(规范性)

59 种挥发性有机物组分名称、CAS 号

表A.1为本文件规定检测组分名称、英文名及CAS 号。

表A.1 59 种挥发性有机物组分名称、CAS 号列表

序号	组分名称	英文名	CAS 号	序号	组分名称	英文名	CAS 号
1	氯甲烷	Methyl chloride	74-87-3	31	1,1,1,2-四氯乙烷	1,1,1,2-tetrachloroethane	630-20-6
2	氯乙烯	vinyl chloride	75-01-4	32	乙苯	ethylbenzene	100-41-4
3	1,1-二氯乙烯	1,1-dichloroethylene	75-35-4	33	间二甲苯	m-xylene	108-38-3
4	二氯甲烷	dichloromethane	75-09-2	34	对二甲苯	p-xylene	106-42-3
5	甲基叔丁基醚	Methyl tert butyl ether	1634-04-4	35	邻二甲苯	O-xylene	95-47-6
6	反-1,2-二氯乙烯	Trans-1,2-dichloroethylene	156-60-5	36	苯乙烯	Styrene	100-42-5
7	1,1-二氯乙烷	1,1-dichloroethane	75-34-3	37	异丙苯	Cumene	98-82-8
8	氯丁二烯	Chloroprene	126-99-8	38	三溴甲烷	Tribromomethane	75-25-2
9	2,2-二氯丙烷	2,2-dichloropropane	594-20-7	39	1,1,2,2-四氯乙烷	1,1,2,2-tetrachloroethane	79-34-5
10	顺-1,2-二氯乙烯	Cis-1,2-dichloroethylene	156-59-2	40	1,2,3-三氯丙烷	1,2,3-trichloropropane	96-18-4
11	三氯甲烷	Chloroform	67-66-3	41	正丙苯	N-propyl benzene	103-65-1
12	溴氯甲烷	Bromochloromethane	74-97-5	42	溴苯	Bromobenzene	108-86-1
13	1,1,1-三氯乙烷	1,1,1-trichloroethane	71-55-6	43	1,3,5-三甲苯	1,3,5-trimethylbenzene	108-67-8
14	1,1-二氯丙烯	1,1-dichloropropene	563-58-6	44	2-氯甲苯	2-chlorotoluene	95-49-8
15	四氯化碳	carbon tetrachloride	56-23-5	45	4-氯甲苯	4-chlorotoluene	106-43-4
16	1,2-二氯乙烷	1,2-dichloroethane	107-06-2	46	叔丁基苯	Tert butylbenzene	98-06-6
17	苯	benzene	71-43-2	47	1,2,4-三甲苯	1,2,4-trimethylbenzene	95-63-6
18	三氯乙烯	Trichloroethylene	79-01-6	48	仲丁基苯	Sec-butylbenzene	135-98-8
19	1,2-二氯丙烷	1,2-dichloropropane	78-87-5	49	4-异丙甲苯	4-cumene	99-87-6
20	一溴二氯甲烷	Bromodichloromethane	75-27-4	50	1,3-二氯苯	1,3-Dichlorobenzene	541-73-1
21	二溴甲烷	Dibromomethane	74-95-3	51	1,4-二氯苯	1,4-dichlorobenzene	106-46-7
22	顺-1,3-二氯丙烯	Cis-1,3-dichloropropene	10061-01-5	52	正丁苯	n-butylbenzene	104-51-8
23	甲苯	toluene	108-88-3	53	1,2-二氯苯	1,2-dichlorobenzene	95-50-1
24	反-1,3-二氯丙烯	Trans-1,3-dichloropropene	10061-02-6	54	1,2-二溴-3-氯丙烷	1,2-dibromo-3-chloropropane	96-12-8
25	1,1,2-三氯乙烷	1,1,2-trichloroethane	79-00-5	55	1,3,5-三氯苯	1,3,5-trichlorobenzene	108-70-3
26	1,3-二氯丙烷	1,3-dichloropropane	142-28-9	56	1,2,4-三氯苯	1,2,4-trichlorobenzene	120-82-1
27	四氯乙烯	Tetrachloroethylene	127-18-4	57	六氯丁二烯	Hexachlorobutadiene	87-68-3
28	二溴氯甲烷	Dibromomethane chloride	124-48-1	58	萘	naphthalene	91-20-3
29	1,2-二溴乙烷	1,2-dibromoethane	106-93-4	59	1,2,3-三氯苯	1,2,3-trichlorobenzene	87-61-6
30	氯苯	chlorobenzene	108-90-7				

附 录 B

(规范性)

59 种挥发性有机物线性范围、方法检出限和定量限

表B.1为按照本文件检测挥发性有机物所得的线性范围、方法检出限和定量限列表。

表B.1 59 种挥发性有机物线性范围、方法检出限和定量限表

序号	组分名称	线性范围 ($\mu\text{g/L}$)	全扫描模式		选择离子扫描模式	
			检出限 ($\mu\text{g/L}$)	定量限 ($\mu\text{g/L}$)	检出限 ($\mu\text{g/L}$)	定量限 ($\mu\text{g/L}$)
1	氯甲烷	1.00~100	0.17	0.67	0.03	0.11
2	氯乙烯	1.00~100	0.17	0.66	0.06	0.26
3	1,1-二氯乙烯	1.00~100	0.12	0.48	0.11	0.42
4	二氯甲烷	1.00~100	0.15	0.60	0.05	0.22
5	甲基叔丁基醚	1.00~100	0.12	0.47	0.16	0.63
6	反-1,2-二氯乙烯	1.00~100	0.11	0.43	0.12	0.49
7	1,1-二氯乙烷	1.00~100	0.06	0.24	0.11	0.43
8	氯丁二烯	1.00~100	0.16	0.64	0.09	0.37
9	2,2-二氯丙烷	1.00~100	0.22	0.89	0.21	0.85
10	顺-1,2-二氯乙烯	1.00~100	0.13	0.54	0.11	0.43
11	三氯甲烷	1.00~100	0.10	0.39	0.18	0.71
12	溴氯甲烷	1.00~100	0.11	0.43	0.04	0.17
13	1,1,1-三氯乙烷	1.00~100	0.11	0.46	0.13	0.54
14	1,1-二氯丙烯	1.00~100	0.13	0.50	0.12	0.50
15	四氯化碳	1.00~100	0.17	0.69	0.09	0.37
16	1,2-二氯乙烷	1.00~100	0.10	0.39	0.07	0.26
17	苯	1.00~100	0.10	0.38	0.11	0.45
18	三氯乙烯	1.00~100	0.14	0.57	0.16	0.63
19	1,2-二氯丙烷	1.00~100	0.10	0.39	0.12	0.47
20	一溴二氯甲烷	1.00~100	0.15	0.61	0.06	0.22
21	二溴甲烷	1.00~100	0.10	0.42	0.21	0.84
22	顺-1,3-二氯丙烯	1.00~100	0.12	0.50	0.11	0.43
23	甲苯	1.00~100	0.08	0.34	0.08	0.31
24	反-1,3-二氯丙烯	1.00~100	0.12	0.47	0.07	0.28
25	1,1,2-三氯乙烷	1.00~100	0.14	0.57	0.08	0.33
26	1,3-二氯丙烷	1.00~100	0.10	0.40	0.08	0.32
27	四氯乙烯	1.00~100	0.08	0.31	0.10	0.39
28	二溴氯甲烷	1.00~100	0.13	0.53	0.10	0.41
29	1,2-二溴乙烷	1.00~100	0.08	0.31	0.18	0.74
30	氯苯	1.00~100	0.08	0.30	0.07	0.27
31	1,1,1,2-四氯乙烷	1.00~100	0.18	0.72	0.08	0.32
32	乙苯	1.00~100	0.05	0.21	0.09	0.35
33/34	间二甲苯/对二甲苯	2.00~200	0.10	0.41	0.17	0.70
35	邻二甲苯	1.00~100	0.11	0.45	0.08	0.33

表B.1 59种挥发性有机物线性范围、方法检出限和定量限表（续）

序号	组分名称	线性范围 ($\mu\text{g/L}$)	全扫描模式		选择离子扫描模式	
			检出限 ($\mu\text{g/L}$)	定量限 ($\mu\text{g/L}$)	检出限 ($\mu\text{g/L}$)	定量限 ($\mu\text{g/L}$)
36	苯乙烯	1.00~100	0.05	0.18	0.12	0.47
37	异丙苯	1.00~100	0.07	0.28	0.09	0.36
38	三溴甲烷	1.00~100	0.10	0.39	0.09	0.36
39	1,1,2,2-四氯乙烷	1.00~100	0.14	0.56	0.19	0.77
40	1,2,3-三氯丙烷	1.00~100	0.17	0.70	0.12	0.48
41	正丙苯	1.00~100	0.06	0.26	0.15	0.59
42	溴苯	1.00~100	0.10	0.38	0.09	0.35
43	1,3,5-三甲苯	1.00~100	0.08	0.33	0.11	0.45
44	2-氯甲苯	1.00~100	0.17	0.67	0.12	0.47
45	4-氯甲苯	1.00~100	0.08	0.34	0.13	0.50
46	叔丁基苯	1.00~100	0.08	0.34	0.12	0.47
47	1,2,4-三甲苯	1.00~100	0.06	0.23	0.11	0.43
48	仲丁基苯	1.00~100	0.13	0.50	0.10	0.40
49	4-异丙甲苯	1.00~100	0.08	0.30	0.10	0.41
50	1,3-二氯苯	1.00~100	0.06	0.22	0.12	0.47
51	1,4-二氯苯	1.00~100	0.09	0.35	0.09	0.36
52	正丁苯	1.00~100	0.08	0.34	0.10	0.41
53	1,2-二氯苯	1.00~100	0.07	0.29	0.09	0.36
54	1,2-二溴-3-氯丙烷	1.00~100	0.23	0.92	0.09	0.35
55	1,3,5-三氯苯	1.00~100	0.09	0.35	0.09	0.37
56	1,2,4-三氯苯	1.00~100	0.18	0.71	0.05	0.21
57	六氯丁二烯	1.00~100	0.15	0.58	0.08	0.34
58	萘	1.00~100	0.21	0.82	0.06	0.22
59	1,2,3-三氯苯	1.00~100	0.19	0.77	0.11	0.43

附录 C

(资料性)

59 种挥发性有机物、内标、替代物定性定量特征离子及定量内标

表C.1为本文件中所列59种挥发性有机物、内标、替代物的定性定量特征离子及定量内标。

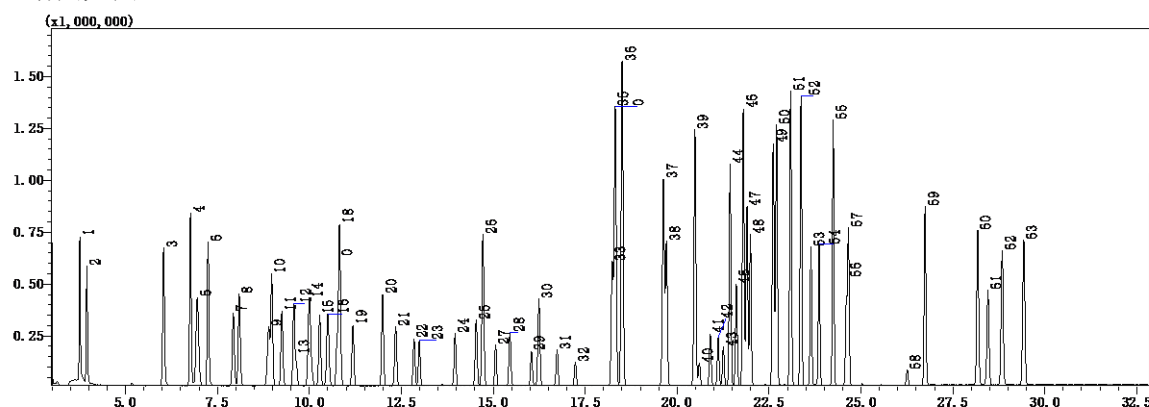
表C.1 59 种挥发性有机物、内标、替代物定性定量特征离子及定量内标表

序号	组分名称	特征离子	定量内标	序号	组分名称	特征离子	定量内标
1	氯甲烷	50*,49,52	内标 1	33	氯苯	112*,114,77	内标 2
2	氯乙烯	62*,64,47	内标 1	34	1,1,1,2-四氯乙烷	131*,133,117	内标 2
3	1,1-二氯乙烯	61*,96,98	内标 1	35	乙苯	91*,106,65	内标 2
4	二氯甲烷	49*,84,86	内标 1	36	间二甲苯	91*,106,105	内标 2
5	甲基叔丁基醚	73*,57,45	内标 1	37	对二甲苯	91*,106,105	内标 2
6	反-1,2-二氯乙烯	61*,96,98	内标 1	38	邻二甲苯	91*,106,105	内标 2
7	1,1-二氯乙烷	63*,65,83	内标 1	39	苯乙烯	104*,78,103	内标 2
8	氯丁二烯	53*,88,90	内标 1	40	异丙苯	105*,120,77	内标 2
9	2,2-二氯丙烷	77*,79,97	内标 1	41	三溴甲烷	173*,175,171	内标 2
10	顺-1,2-二氯乙烯	61*,96,98	内标 1	42	1,1,2,2-四氯乙烷	83*,85,95	内标 2
11	三氯甲烷	83*,85,47	内标 1	43	4-溴氟苯(替代物)	95*,174,176	内标 2
12	溴氯甲烷	49*,128,130	内标 1	44	1,2,3-三氯丙烷	75*,77,110	内标 2
13	二溴氟甲烷(替代物)	111*,113,192	内标 1	45	正丙苯	91*,65,120	内标 2
14	1,1,1-三氯乙烷	97*,99,61	内标 1	46	溴苯	77*,156,158	内标 2
15	1,1-二氯丙烯	75*,77,110	内标 1	47	1,3,5-三甲苯	105*,120,119	内标 2
16	四氯化碳	117*,119,121	内标 1	48	2-氯甲苯	91*,126,63	内标 2
17	1,2-二氯乙烷	62*,64,49	内标 1	49	4-氯甲苯	91*,126,125	内标 2
18	苯	78*,77,51	内标 1	50	叔丁基苯	119*,91,134	内标 2
19	氟苯(内标 1)	96*,70,95	内标 1	51	1,2,4-三甲苯	105*,120,119	内标 2
20	三氯乙烯	95*,130,132	内标 1	52	仲丁基苯	105*,134,91	内标 2
21	1,2-二氯丙烷	63*,62,65	内标 1	53	4-异丙甲苯	119*,91,134	内标 2
22	一溴二氯甲烷	83*,85,127	内标 1	54	1,3-二氯苯	146*,148,111	内标 2
23	二溴甲烷	93*,95,174	内标 1	55	1,4-二氯苯	146*,148,111	内标 2
24	顺-1,3-二氯丙烯	75*,77,110	内标 1	56	正丁苯	91*,92,134	内标 2
25	甲苯-D8(替代物)	98*,100,70	内标 1	57	1,2-二氯苯-D4(内标 2)	152*,115,150	内标 2
26	甲苯	91*,92,65	内标 1	58	1,2-二氯苯	146*,148,111	内标 2
27	反-1,3-二氯丙烯	75*,77,110	内标 1	59	1,2-二溴-3-氯丙烷	157*,155,75	内标 2
28	1,1,2-三氯乙烷	97*,83,99	内标 1	60	1,3,5-三氯苯	180*,182,145	内标 2
29	1,3-二氯丙烷	76*,63,78	内标 1	61	1,2,4-三氯苯	180*,182,145	内标 2
30	四氯乙烯	166*,164,129	内标 1	62	六氯丁二烯	225*,223,227	内标 2
31	三溴氯甲烷	129*,127,131	内标 1	63	萘	128*,127,129	内标 2
32	1,2-二溴乙烷	107*,109,93	内标 1	64	1,2,3-三氯苯	180*,182,74	内标 2

注：加注“*”的特征离子可选定为定量离子。

附录 D
(资料性)
挥发性有机物标准总离子流色谱图

吹扫捕集/气相色谱-质谱法测定氯甲烷、氯乙烯、苯、甲基叔丁基醚等59种挥发性有机物标准总离子流色谱图见图D.1。



出峰顺序：1.氯甲烷；2.氯乙烯；3.1,1-二氯乙烯；4.二氯甲烷；5.甲基叔丁基醚；6.反-1,2-二氯乙烯；7.1,1-二氯乙烷；8.氯丁二烯；9.2,2-二氯丙烷；10.顺-1,2-二氯乙烯；11.三氯甲烷；12.溴氯甲烷；13.二溴氟甲烷（替代物）；14.1,1,1-三氯乙烷；15.1,1-二氯丙烯；16.四氯化碳；17.1,2-二氯乙烷；18.苯；19.氟苯（内标1）；20.三氯乙烯；21.1,2-二氯丙烷；22.一溴二氯甲烷；23.二溴甲烷；24.顺-1,3-二氯丙烯；25.甲苯-D8（替代物）；26.甲苯；27.反-1,3-二氯丙烯；28.1,1,2-三氯乙烷；29.1,3-二氯丙烷；30.四氯乙烯；31.二溴氯甲烷；32.1,2-二溴乙烷；33.氯苯；34.1,1,1,2-四氯乙烷；35.乙苯；36.间二甲苯/对二甲苯；37.邻二甲苯；38.苯乙烯；39.异丙苯；40.三溴甲烷；41.1,1,2,2-四氯乙烷；42.4-溴氟苯（替代物）；43.1,2,3-三氯丙烷；44.正丙苯；45.溴苯；46.1,3,5-三甲苯；47.2-氯甲苯；48.4-氯甲苯；49.叔丁基苯；50.1,2,4-三甲苯；51.仲丁基苯；52.4-异丙甲苯；53.1,3-二氯苯；54.1,4-二氯苯；55.正丁苯；56.1,2-二氯苯-D4（内标2）；57.1,2-二氯苯；58.1,2-二溴-3-氯丙烷；59.1,3,5-三氯苯；60.1,2,4-三氯苯；61.六氯丁二烯；62.萘；63.1,2,3-三氯苯。

图D.1 挥发性有机物标准样品总离子流色谱图（标准浓度 50.0 $\mu\text{g/L}$ ）

附 录 E
(资料性)
方法有效性评价

本文本所列分析方法有效性评价主要包括实验室内方法准确度和精密度，实验室间方法平均回收率及精密度，不同介质样品加标平均回收率及相对标准偏差，方法加标平均值、重复性r和再现性R以及方法加标平均值m与重复性Sr和再现性SR关系。详细内容见表E.1~E.5。

表E.1 实验室内方法准确度与精密度表

组分名称	加标浓度 1.00 μ g/L		加标浓度 5.00 μ g/L		加标浓度 10.0 μ g/L		加标浓度 50.0 μ g/L		加标浓度 100 μ g/L	
	平均 回收 率/%	RSD/ % n=3	平均 回收 率/%	RSD/ % n=3	平均 回收 率/%	RSD/ % n=3	平均 回收 率/%	RSD /% n=3	平均 回收 率/%	RSD /% n=3
氯甲烷	95.0	8.42	103	5.45	97.3	5.45	97.5	6.48	102	4.03
氯乙烯	97.0	7.22	99.4	1.01	96.7	6.83	99.1	6.02	104	7.02
1,1-二氯乙烯	100	5.00	97.6	5.12	103	5.92	100	9.17	103	6.48
二氯甲烷	98.0	5.10	98.2	3.87	103	5.07	101	8.74	104	6.22
甲基叔丁基醚	100	1.00	97.4	5.13	102	3.54	102	7.06	103	5.65
反-1,2-二氯乙烯	102	4.90	97.4	5.54	102	3.73	103	6.54	103	5.39
1,1-二氯乙烷	100	1.00	96.8	6.40	103	5.92	103	6.84	103	4.76
氯丁二烯	104	7.69	96.4	7.26	103	5.45	103	7.03	102	5.42
2,2-二氯丙烷	101	4.95	98.2	3.46	100	0.40	104	3.24	103	6.18
顺-1,2-二氯乙烯	103	4.85	99.6	0.80	104	7.38	102	6.12	102	4.92
三氯甲烷	102	3.92	97.0	5.98	103	5.73	103	6.15	102	5.34
溴氯甲烷	102	3.92	97.4	5.34	103	4.88	104	5.07	103	5.20
1,1,1-三氯乙烷	102	4.90	97.4	5.34	102	3.34	103	7.64	102	5.22
1,1-二氯丙烯	103	4.85	97.4	5.34	103	5.73	104	5.21	102	6.06
四氯化碳	102	3.92	97.6	5.12	102	4.59	103	7.28	102	5.01
1,2-二氯乙烷	102	3.92	97.0	6.19	102	4.02	107	4.22	102	5.57
苯	102	3.92	97.2	5.76	103	5.54	105	3.53	102	6.03
三氯乙烯	103	5.83	97.6	5.12	103	4.97	107	2.87	102	6.20
1,2-二氯丙烷	102	4.90	98.0	4.29	103	5.36	108	2.50	102	6.02
一溴二氯甲烷	103	4.85	97.6	4.92	103	5.73	107	2.64	102	5.80
二溴甲烷	102	2.94	97.6	4.92	102	3.73	104	3.97	102	5.38
顺-1,3-二氯丙烯	102	3.92	97.8	4.29	103	5.07	106	2.37	102	6.18
甲苯	102	3.92	97.8	4.50	103	6.39	107	2.19	102	6.06
反-1,3-二氯丙烯	103	4.85	98.6	2.84	102	4.02	108	3.63	102	5.86
1,1,2-三氯乙烷	103	6.80	97.6	4.92	103	4.98	106	2.57	102	6.18
1,3-二氯丙烷	102	3.92	98.6	2.84	103	4.88	102	8.23	102	5.80
四氯乙烯	101	2.97	97.6	4.92	103	5.54	102	9.09	102	5.88
二溴氯甲烷	101	2.97	97.6	4.71	102	4.69	102	9.14	102	5.85
1,2-二溴乙烷	101	1.98	98.2	3.46	102	3.82	102	8.29	102	6.01
氯苯	101	2.97	98.0	4.08	102	4.69	103	8.74	102	6.38

表E.1 实验室内方法准确度与精密度表（续）

组分名称	加标浓度 1.00 $\mu\text{g/L}$		加标浓度 5.00 $\mu\text{g/L}$		加标浓度 10.0 $\mu\text{g/L}$		加标浓度 50.0 $\mu\text{g/L}$		加标浓度 100 $\mu\text{g/L}$	
	平均 回收 率/%	RSD/ % n=3	平均 回收 率/%	RSD/ % n=3	平均 回收 率/%	RSD/ % n=3	平均 回收 率/%	RSD /% n=3	平均 回收 率/%	RSD /% n=3
1,1,1,2-四氯乙烷	103	4.85	97.0	5.98	102	4.02	103	7.47	102	6.06
乙苯	101	0.99	98.0	4.29	103	5.54	102	8.79	102	6.49
间二甲苯/对二甲苯	101	1.98	98.1	3.98	103	5.45	110	4.68	106	0.53
邻二甲苯	101	2.97	97.6	4.92	103	5.16	103	8.03	102	6.20
苯乙烯	100	1.00	98.2	3.67	102	3.05	103	8.28	102	6.73
异丙苯	101	2.97	97.4	5.54	102	4.40	104	7.55	102	5.85
三溴甲烷	100	3.00	98.6	3.04	102	3.24	102	8.30	102	6.84
1,1,2,2-四氯乙烷	101	1.98	98.0	3.88	102	3.05	103	7.56	102	5.87
1,2,3-三氯丙烷	100	2.00	97.8	4.29	102	3.44	104	6.92	102	6.21
正丙苯	101	2.97	98.2	3.46	102	3.63	102	8.47	102	6.24
溴苯	101	1.98	97.8	4.50	102	3.34	103	7.81	102	6.90
1,3,5-三甲苯	100	2.00	97.4	5.13	102	3.54	104	7.60	102	5.84
2-氯甲苯	103	4.85	98.0	4.29	102	2.96	101	9.55	102	6.51
4-氯甲苯	100	3.00	98.0	3.88	102	3.82	104	7.33	102	6.93
叔丁基苯	101	1.98	97.6	5.12	101	2.76	104	8.03	101	6.68
1,2,4-三甲苯	101	2.97	98.0	4.08	102	3.34	104	7.97	99.3	2.64
仲丁基苯	101	1.98	97.8	4.50	102	2.96	104	7.36	102	5.91
4-异丙基甲苯	101	1.98	97.8	4.50	101	2.66	104	7.28	101	5.78
1,3-二氯苯	101	1.98	98.0	4.29	101	2.08	103	8.03	102	6.97
1,4-二氯苯	101	1.98	98.2	3.67	101	2.18	103	7.98	102	6.95
正丁苯	101	1.98	98.6	2.64	101	2.57	103	6.95	102	5.50
1,2-二氯苯	101	1.98	98.2	3.67	101	2.66	104	7.28	102	6.53
1,2-二溴-3-氯丙烷	104	5.77	98.4	3.05	100	0.80	103	6.70	102	6.06
1,3,5-三氯苯	100	1.00	98.4	3.25	101	1.78	104	6.63	102	5.79
1,2,4-三氯苯	100	1.00	97.8	4.50	101	1.00	104	6.02	101	5.60
六氯丁二烯	103	5.83	98.8	2.63	101	2.27	103	6.69	101	5.60
萘	101	1.98	97.4	5.34	100	0.90	104	5.80	102	5.80
1,2,3-三氯苯	102	2.94	98.2	3.87	101	1.19	104	5.86	101	5.77

表E.2 实验室间方法平均回收率及精密度

序号	组分名称	加标浓度 μg/L	平均回收率 R/%	RSD % n=7	序号	组分名称	加标浓度 μg/L	平均回收率 R/%	RSD % n=7
1	氯甲烷	1.00	97.6	2.17	30	氯苯	1.00	96.3	5.28
		5.00	98.4	2.70			5.00	101	4.45
		10.0	95.0	4.32			10.0	102	3.54
		50.0	97.5	3.22			50.0	104	2.76
		100	102	4.57			100	102	3.03
2	氯乙烯	1.00	94.9	4.22	31	1,1,1,2-四氯乙烷	1.00	96.2	5.43
		5.00	95.6	5.53			5.00	98.4	3.66
		10.0	92.5	5.58			10.0	100	2.62
		50.0	97.0	5.84			50.0	104	2.34
		100	102	4.71			100	102	2.77
3	1,1-二氯乙烯	1.00	97.9	7.33	32	乙苯	1.00	96.8	4.82
		5.00	97.7	5.38			5.00	99.5	4.80
		10.0	98.8	3.26			10.0	101	3.68
		50.0	101	3.73			50.0	103	2.89
		100	101	5.14			100	101	3.43
4	二氯甲烷	1.00	95.9	3.71	33/34	间二甲苯/对二甲苯	2.00	96.1	7.11
		5.00	98.7	2.14			10.00	99.0	4.11
		10.0	99.7	2.11			20.0	101	3.50
		50.0	101	1.35			100.0	104	3.92
		100	101	2.84			200	101	3.58
5	甲基叔丁基醚	1.00	104	3.79	35	邻二甲苯	1.00	94.7	5.54
		5.00	103	4.48			5.00	101	5.12
		10.0	102	2.47			10.0	102	4.09
		50.0	104	1.77			50.0	103	2.60
		100	102	2.11			100	101	2.94
6	反-1,2-二氯乙烯	1.00	97.0	5.33	36	苯乙烯	1.00	94.8	6.11
		5.00	98.6	5.07			5.00	101	4.54
		10.0	99.7	2.70			10.0	101	3.30
		50.0	102	3.06			50.0	103	2.37
		100	101	4.31			100	101	2.80
7	1,1-二氯乙烷	1.00	97.5	4.78	37	异丙苯	1.00	95.8	6.62
		5.00	98.2	4.63			5.00	99.9	5.00
		10.0	99.7	2.64			10.0	101	4.13
		50.0	103	2.53			50.0	103	2.97
		100	101	3.92			100	101	3.27
8	氯丁二烯	1.00	98.2	5.94	38	三溴甲烷	1.00	96.9	4.14
		5.00	98.9	6.53			5.00	98.6	1.99

表E.2 实验室间方法平均回收率及精密度 (续)

序号	组分名称	加标浓度 μg/L	平均回收 率 R/%	RSD % n=7	序号	组分名称	加标浓度 μg/L	平均回收率 R/%	RSD % n=7
		10.0	102	3.78			10.0	100	2.54
		50.0	102	3.77			50.0	104	1.98
		100	101	5.04			100	102	1.90
9	2,2-二氯丙烷	1.00	109	5.21	39	1,1,2,2-四氯乙烷	1.00	99.0	4.00
		5.00	95.3	5.37			5.00	100	1.57
		10.0	98.1	3.07			10.0	94.2	6.94
		50.0	101	4.13			50.0	98.0	5.35
		100	99.5	6.11			100	94.8	8.49
10	顺-1,2-二氯乙烯	1.00	97.6	5.64	40	1,2,3-三氯丙烷	1.00	100	4.74
		5.00	99.9	4.26			5.00	100	2.03
		10.0	101	2.68			10.0	100	2.68
		50.0	102	2.06			50.0	103	1.45
		100	100	2.75			100	100	1.62
11	三氯甲烷	1.00	97.2	5.25	41	正丙苯	1.00	98.6	4.76
		5.00	98.1	4.11			5.00	98.8	4.41
		10.0	100	2.40			10.0	101	3.80
		50.0	103	2.20			50.0	102	2.96
		100	102	3.40			100	100	3.01
12	溴氯甲烷	1.00	98.3	3.83	42	溴苯	1.00	95.5	4.73
		5.00	99.9	2.78			5.00	100	2.82
		10.0	101	2.36			10.0	101	2.93
		50.0	102	1.52			50.0	102	1.98
		100	101	2.96			100	101	2.45
13	1,1,1-三氯乙烷	1.00	97.0	6.28	43	1,3,5-三甲苯	1.00	96.3	6.66
		5.00	96.9	4.32			5.00	99.6	5.39
		10.0	99.3	2.90			10.0	101	3.78
		50.0	103	3.24			50.0	103	2.82
		100	102	4.43			100	101	2.78
14	1,1-二氯丙烯	1.00	101	6.31	44	2-氯甲苯	1.00	100	5.86
		5.00	98.5	5.75			5.00	99.3	3.14
		10.0	100	3.50			10.0	101	2.84
		50.0	103	3.49			50.0	102	2.78
		100	102	4.53			100	100	2.88
15	四氯化碳	1.00	96.9	4.30	45	4-氯甲苯	1.00	97.3	6.03
		5.00	95.9	5.51			5.00	98.6	3.82
		10.0	98.6	3.39			10.0	101	3.36
		50.0	103	3.54			50.0	102	2.39
		100	102	4.66			100	100	2.70

表E.2 实验室间方法平均回收率及精密度 (续)

序号	组分名称	加标浓度 μg/L	平均回收率 R/%	RSD %, n=7	序号	组分名称	加标浓度 μg/L	平均回收率 R/%	RSD %, n=7
16	1,2-二氯乙烷	1.00	99.9	3.23	46	叔丁基苯	1.00	96.5	5.42
		5.00	99.9	3.31			5.00	99.8	4.66
		10.0	101	1.72			10.0	100	4.02
		50.0	103	1.96			50.0	103	2.94
		100	102	2.92			100	100	2.85
17	苯	1.00	98.7	6.01	47	1,2,4-三甲苯	1.00	96.5	4.94
		5.00	99.2	4.37			5.00	97.9	4.70
		10.0	100	2.61			10.0	100	3.19
		50.0	103	2.57			50.0	102	2.64
		100	102	3.40			100	100	2.48
18	三氯乙烯	1.00	97.9	5.20	48	仲丁基苯	1.00	93.4	7.11
		5.00	99.9	5.06			5.00	98.6	4.45
		10.0	106	7.89			10.0	100	3.73
		50.0	104	3.30			50.0	102	2.94
		100	105	4.68			100	100	2.75
19	1,2-二氯丙烷	1.00	97.7	6.06	49	4-异丙苯	1.00	96.1	5.48
		5.00	99.7	4.18			5.00	99.1	4.60
		10.0	101	2.06			10.0	100.4	3.71
		50.0	104	2.64			50.0	102.2	2.95
		100	102	3.12			100	100.2	2.61
20	一溴二氯甲烷	1.00	96.8	4.58	50	1,3-二氯苯	1.00	96.4	4.70
		5.00	99.0	3.75			5.00	99.7	2.41
		10.0	101	2.17			10.0	101	2.91
		50.0	104	2.39			50.0	103	2.47
		100	102	3.12			100	101	2.24
21	二溴甲烷	1.00	97.3	4.05	51	1,4-二氯苯	1.00	95.4	4.65
		5.00	100	2.63			5.00	100	3.03
		10.0	99.9	2.21			10.0	101	3.35
		50.0	104	1.57			50.0	102	2.36
		100	102	2.38			100	101	2.14
22	顺-1,3-二氯丙烯	1.00	97.4	4.80	52	正丁苯	1.00	94.9	6.30
		5.00	102	4.08			5.00	99.0	4.21
		10.0	102	2.96			10.0	101	3.71
		50.0	104	2.26			50.0	102	3.14
		100	102	3.05			100	100	2.57
23	甲苯	1.00	97.4	5.75	53	1,2-二氯苯	1.00	96.5	4.11
		5.00	98.7	4.30			5.00	99.7	2.05
		10.0	101	3.01			10.0	101	2.39

表E.2 实验室间方法平均回收率及精密度 (续)

序号	组分名称	加标浓度 μg/L	平均回收率 R/%	RSD %, n=7	序号	组分名称	加标浓度 μg/L	平均回收率 R/%	RSD %, n=7
		50.0	104	3.03			50.0	102	2.22
		100	102	3.32			100	101	1.83
24	反-1,3-二氯丙烯	1.00	96.7	4.68	54	1,2-二溴-3-氯丙烷	1.00	98.3	3.35
		5.00	101	3.69			5.00	103	3.98
		10.0	101	3.17			10.0	102	2.75
		50.0	104	2.33			50.0	103	2.53
		100	102	2.77			100	100	2.25
25	1,1,2-三氯乙烷	1.00	99.8	3.81	55	1,3,5-三氯苯	1.00	95.8	3.42
		5.00	100	3.13			5.00	101	3.20
		10.0	101	1.95			10.0	102	2.70
		50.0	104	1.88			50.0	103	2.96
		100	102	2.10			100	101	2.17
26	1,3-二氯丙烷	1.00	98.1	4.29	56	1,2,4-三氯苯	1.00	94.6	7.65
		5.00	101	2.93			5.00	102	3.62
		10.0	101	2.12			10.0	103	2.99
		50.0	104	1.87			50.0	103	2.82
		100	102	2.34			100	102	1.99
27	四氯乙烯	1.00	96.2	5.15	57	六氯丁二烯	1.00	96.8	3.62
		5.00	98.5	4.97			5.00	99.1	2.35
		10.0	101	3.09			10.0	101	3.13
		50.0	105	3.96			50.0	103	3.58
		100	103	3.87			100	102	3.03
28	二溴氯甲烷	1.00	95.7	4.22	58	萘	1.00	94.2	7.35
		5.00	99.1	3.89			5.00	105	4.62
		10.0	101	2.18			10.0	103	2.74
		50.0	104	2.38			50.0	102	1.95
		100	103	2.32			100	101	1.03
29	1,2-二溴乙烷	1.00	97.8	3.45	59	1,2,3-三氯苯	1.00	90.2	11.9
		5.00	102	3.13			5.00	104	3.83
		10.0	102	2.64			10.0	102	2.91
		50.0	104	2.32			50.0	102	2.33
		100	102	1.92			100	101	1.20

表E.3 不同介质样品加标平均回收率及相对标准偏差表

组分名称	加标浓度 ($\mu\text{g/L}$)	饮用水		地下水		地表水		海水		粪水	
		平均回收率 R/%	RSD %, n =7	平均回收率 R/%	RSD %, n =7	平均回收率 R/%	RSD %, n =7	平均回收率 R/%	RSD%, n=7	平均回收率 R/%	RSD%, n =7
氯甲烷	50.0	102	6.78	99.0	8.63	101	8.30	90.2	5.62	105	10.3
氯乙烯	50.0	104	6.21	100	8.43	101	7.67	95.3	6.57	108	7.03
1,1-二氯乙烯	50.0	104	7.84	101	6.55	94.2	2.27	94.9	5.25	94.1	7.10
二氯甲烷	50.0	102	5.62	102	7.34	94.0	3.43	98.6	4.69	90.0	4.60
甲基叔丁基醚	50.0	102	6.47	99.1	9.67	89.3	7.83	96.9	4.89	92.7	3.99
反-1,2-二氯乙烯	50.0	103	8.16	104	8.19	92.3	5.41	96.0	5.10	94.5	5.30
1,1-二氯乙烷	50.0	103	7.25	102	7.22	93.9	6.50	96.7	4.68	91.8	4.47
氯丁二烯	50.0	104	7.78	98.7	4.59	92.8	3.25	101	6.74	95.6	6.22
2,2-二氯丙烷	50.0	101	8.33	83.9	4.16	91.5	6.94	91.5	7.03	93.3	3.74
顺-1,2-二氯乙烯	50.0	102	6.93	100	4.20	95.9	2.29	96.0	4.28	91.4	4.55
三氯甲烷	50.0	103	6.57	101	4.80	94.0	2.73	96.7	4.09	91.2	4.01
溴氯甲烷	50.0	102	6.13	102	4.08	99.8	4.51	97.8	4.11	92.8	3.13
1,1,1-三氯乙烷	50.0	106	5.27	102	4.12	96.5	4.62	97.1	4.55	96.2	4.95
1,1-二氯丙烯	50.0	105	7.79	102	3.39	94.7	1.41	93.2	5.17	92.1	4.20
四氯化碳	50.0	106	5.54	103	5.16	96.6	4.72	95.7	4.47	94.7	4.76
1,2-二氯乙烷	50.0	103	6.14	102	7.48	92.8	3.21	95.9	3.98	94.4	3.91
苯	50.0	104	6.38	100	1.86	98.4	4.93	106	6.84	83.8	5.94
三氯乙烯	50.0	103	5.89	97.3	3.27	94.9	4.42	103	6.91	85.3	4.69
1,2-二氯丙烷	50.0	105	5.68	102	3.58	94.8	2.90	103	5.87	91.0	4.64
一溴二氯甲烷	50.0	105	5.68	102	5.47	95.2	6.91	102	5.78	88.9	3.87
二溴甲烷	50.0	104	5.77	103	4.93	97.5	5.48	106	6.15	87.5	3.19
顺-1,3-二氯丙烯	50.0	103	9.19	102	6.12	95.8	6.85	104	7.96	83.8	3.83
甲苯	50.0	105	6.75	101	1.92	97.6	3.05	96.6	4.53	92.7	4.46
反-1,3-二氯丙烯	50.0	104	6.14	91.6	5.02	92.6	7.47	105	8.50	81.6	3.84
1,1,2-三氯乙烷	50.0	104	5.27	97.2	3.52	95.3	3.09	99.8	4.29	92.6	2.09
1,3-二氯丙烷	50.0	104	5.02	99.5	3.26	96.9	4.89	98.5	5.09	95.0	2.41
四氯乙烯	50.0	106	7.31	101	2.11	101	6.63	95.5	4.64	90.9	4.41
二溴氯甲烷	50.0	105	5.44	99.9	5.16	96.1	5.85	97.2	3.72	95.5	2.54
1,2-二溴乙烷	50.0	105	5.66	98.7	5.67	94.2	3.15	100	4.83	94.4	2.63
氯苯	50.0	106	5.52	104	5.41	92.6	5.97	95.8	4.21	92.8	4.22
1,1,1,2-四氯乙烷	50.0	104	7.58	101	5.71	90.9	3.66	104	5.66	90.4	4.46
乙苯	50.0	106	5.26	105	5.40	94.3	5.59	95.6	4.40	91.3	5.99
间二甲苯/对二甲苯	100	107	4.85	103	6.52	94.9	7.77	94.9	4.22	89.2	5.97
邻二甲苯	50.0	105	5.54	103	3.52	94.6	3.22	98.9	4.72	89.1	5.84
苯乙烯	50.0	104	6.49	101	3.02	95.0	1.78	94.2	4.13	90.9	5.38
异丙苯	50.0	104	7.48	104	3.46	94.1	1.40	99.0	5.32	88.3	6.14
三溴甲烷	50.0	104	6.14	97.1	6.54	91.2	6.21	97.0	5.00	98.6	2.28
1,1,2,2-四氯乙烷	50.0	101	6.17	104	7.20	91.1	4.15	101	4.10	91.6	5.51
1,2,3-三氯丙烷	50.0	105	4.38	106	9.94	94.0	5.26	103	5.71	92.3	4.52
正丙苯	50.0	105	5.65	103	4.36	94.6	3.18	93.0	5.37	88.2	6.11

表E.3 不同介质样品加标平均回收率及相对标准偏差表（续）

组分名称	加标浓度 ($\mu\text{g/L}$)	饮用水	地下水		地表水		海水		粪水		
		平均回收率 R/%	RSD%, n=7	平均回收率 R/%	RSD%, n=7	平均回收率 R/%	RSD%, n=7	平均回收率 R/%	RSD%, n=7	平均回收率 R/%	RSD%, n=7
溴苯	50.0	102	8.16	104	2.62	97.2	5.53	95.3	3.84	92.9	3.57
1,3,5-三甲苯	50.0	104	7.74	102	3.08	93.6	2.16	94.7	4.32	91.6	3.36
2-氯甲苯	50.0	104	5.26	101	3.66	94.7	2.58	95.2	2.79	91.1	3.79
4-氯甲苯	50.0	104	6.95	99.4	5.54	92.3	3.93	93.5	4.04	90.0	4.51
叔丁基苯	50.0	105	6.87	102	3.04	95.0	1.58	92.0	5.37	94.2	2.94
1,2,4-三甲苯	50.0	106	4.15	102	4.05	95.5	5.62	94.8	3.89	90.2	3.90
仲丁基苯	50.0	106	5.44	101	2.53	95.4	3.87	95.2	4.57	92.0	3.59
4-异丙甲苯	50.0	105	6.68	102	3.70	93.8	2.25	94.1	4.63	90.1	3.76
1,3-二氯苯	50.0	106	5.25	100	1.12	97.5	3.31	92.1	3.45	87.1	3.65
1,4-二氯苯	50.0	106	5.22	100	4.31	95.4	3.98	92.9	3.31	89.5	4.30
正丁苯	50.0	106	5.21	97.2	8.87	92.2	7.77	94.0	4.90	86.1	4.34
1,2-二氯苯	50.0	104	7.42	99.4	5.62	92.8	3.40	96.9	3.12	89.6	3.38
1,2-二溴-3-氯丙烷	50.0	104	8.20	101	7.06	95.5	2.99	106	7.48	91.2	8.32
1,3,5-三氯苯	50.0	105	7.87	103	6.47	93.8	2.59	88.1	8.18	82.3	4.22
1,2,4-三氯苯	50.0	107	5.32	102	7.11	94.7	5.58	88.8	8.49	79.0	5.08
六氯丁二烯	50.0	106	6.17	100	6.46	91.0	6.23	94.9	5.13	89.4	3.07
萘	50.0	104	7.24	100	7.17	93.1	3.06	102	5.83	75.9	7.59
1,2,3-三氯苯	50.0	106	4.78	102	7.28	95.3	5.10	96.0	5.65	81.5	4.92

表E.4 方法加标平均值、重复性 r 和再现性 R 表

序号	组分名称	平均值 ($\mu\text{g/L}$)	重复性限 r ($\mu\text{g/L}$)	再现性限 R ($\mu\text{g/L}$)	序号	组分名称	平均值 ($\mu\text{g/L}$)	重复性限 r ($\mu\text{g/L}$)	再现性限 R ($\mu\text{g/L}$)
1	氯甲烷	0.98	0.03	0.04	30	氯苯	1.03	0.05	0.10
		4.95	0.27	0.47			4.84	0.18	0.53
		8.86	0.43	1.13			10.1	0.36	0.59
		50.1	2.04	4.39			50.6	1.65	3.40
		101	4.13	15.4			99.7	4.91	8.10
2	氯乙烯	0.97	0.06	0.07	31	1,1,1,2- 四氯乙烷	0.99	0.12	0.13
		4.97	0.26	0.42			4.85	0.21	0.28
		9.11	0.52	1.03			9.81	0.41	0.60
		50.4	3.03	4.00			49.7	1.11	3.35
		100	5.67	13.2			97.5	4.78	8.71
3	1,1-二氯乙 烯	1.00	0.06	0.15	32	乙苯	1.01	0.04	0.13
		4.83	0.26	0.64			4.69	0.24	0.73
		9.51	0.56	1.18			9.87	0.43	0.92
		50.3	2.16	3.38			50.9	1.98	3.31
		101	6.58	13.1			99.2	4.89	6.14
4	二氯甲烷	1.00	0.05	0.12	33/34	间二甲苯 /对二甲 苯	1.92	0.11	0.23
		4.86	0.15	0.64			9.51	0.46	1.22
		9.73	0.37	1.29			20.1	0.79	1.48
		50.1	1.76	3.23			101	3.63	6.71
		103	4.53	7.71			196	9.13	13.45
5	甲基叔丁基 醚	0.96	0.04	0.12	35	邻二甲苯	0.97	0.05	0.14
		4.52	0.20	0.75			4.68	0.22	0.65
		9.04	0.30	1.45			9.89	0.41	0.82
		49.9	1.26	4.90			50.7	1.62	2.50
		103	3.75	5.60			100	4.52	4.95
6	反-1,2-二氯 乙烯	0.97	0.05	0.13	36	苯乙烯	0.94	0.05	0.07
		4.57	0.22	0.75			4.59	0.21	0.53
		9.36	0.43	1.38			9.80	0.37	0.52
		49.9	1.71	3.71			50.1	1.22	2.27
		102	4.97	8.21			101	4.45	4.50
7	1,1-二氯乙 烷	0.99	0.04	0.11	37	异丙苯	0.98	0.05	0.09
		4.65	0.20	0.91			4.65	0.23	0.67
		9.57	0.47	1.67			9.75	0.47	1.05
		49.6	1.75	4.87			50.4	1.26	2.53
		101	4.63	6.90			101	5.06	5.01
8	氯丁二烯	0.92	0.04	0.17	38	三溴甲烷	1.03	0.05	0.14
		4.16	0.24	1.10			4.70	0.20	0.38
		8.66	0.48	2.09			9.65	0.40	0.80
		48.2	1.98	6.44			49.1	1.50	3.80
		99.5	5.67	6.59			98.8	3.72	7.86
9	2,2-二氯丙 烷	1.02	0.04	0.11	39	1,1,2,2- 四氯乙烷	1.04	0.05	0.08

表E.4 方法加标平均值、重复性r和再现性R表 (续)

序号	组分名称	平均值 ($\mu\text{g/L}$)	重复性限 r ($\mu\text{g/L}$)	再现性限 R ($\mu\text{g/L}$)	序号	组分名称	平均值 ($\mu\text{g/L}$)	重复性限 r ($\mu\text{g/L}$)	再现性限 R ($\mu\text{g/L}$)
		4.53	0.23	0.83			5.01	0.20	0.28
		8.58	0.45	1.78			9.83	0.40	0.68
		46.7	2.18	5.28			48.7	1.92	4.09
		98.3	5.90	13.7			98.3	2.87	7.14
10	顺-1,2-二氯乙烯	1.02	0.05	0.11	40	1,2,3-三氯丙烷	0.98	0.05	0.07
		4.55	0.19	0.83			4.97	0.20	0.56
		9.21	0.31	1.69			10.2	0.34	0.88
		50.2	1.20	2.44			49.9	1.88	3.08
		100	4.57	7.79			100	4.45	5.31
11	三氯甲烷	0.92	0.05	0.19	41	正丙苯	0.96	0.05	0.11
		4.59	0.19	0.99			4.73	0.22	0.55
		9.33	0.36	1.78			9.78	0.40	0.78
		49.6	1.50	2.82			50.3	1.62	2.71
		100	4.08	5.63			101	4.82	5.20
12	溴氯甲烷	1.03	0.05	0.09	42	溴苯	0.99	0.05	0.10
		4.71	0.19	0.80			5.02	0.18	0.53
		9.49	0.27	1.54			10.4	0.34	0.77
		51.0	1.55	2.40			51.5	2.58	3.49
		102	3.53	7.13			101	3.96	4.20
13	1,1,1-三氯乙烷	0.92	0.05	0.13	43	1,3,5-三甲苯	0.97	0.05	0.14
		4.64	0.23	0.81			4.74	0.25	0.50
		9.39	0.42	1.68			9.95	0.42	0.66
		50.7	2.17	2.91			50.3	1.25	2.54
		102	5.51	6.15			101	4.74	5.78
14	1,1-二氯丙烯	1.01	0.04	0.13	44	2-氯甲苯	0.95	0.05	0.12
		4.34	0.26	0.79			4.74	0.21	0.52
		8.91	0.44	1.58			9.94	0.36	0.64
		50.4	1.79	2.96			50.2	1.47	2.62
		101	5.20	4.86			101	4.47	5.22
15	四氯化碳	0.94	0.05	0.09	45	4-氯甲苯	0.92	0.05	0.12
		4.54	0.27	0.73			4.74	0.24	0.43
		9.14	0.46	1.56			9.88	0.38	0.60
		50.7	2.16	3.05			49.7	1.31	3.05
		103	5.74	6.68			99.3	4.43	5.80
16	1,2-二氯乙烷	0.99	0.03	0.11	46	叔丁基苯	0.98	0.06	0.13
		4.80	0.18	0.64			4.67	0.26	0.60
		9.65	0.42	1.47			9.74	0.56	1.16
		50.0	1.59	3.67			50.4	1.39	2.56
		101	3.66	5.49			101	4.86	4.76
17	苯	0.96	0.05	0.10	47	1,2,4-三甲苯	0.93	0.05	0.09
		4.67	0.22	0.43			4.66	0.25	0.58

表E.4 方法加标平均值、重复性r和再现性R表(续)

序号	组分名称	平均值 ($\mu\text{g/L}$)	重复性限 r ($\mu\text{g/L}$)	再现性限 R ($\mu\text{g/L}$)	序号	组分名称	平均值 ($\mu\text{g/L}$)	重复性限 r ($\mu\text{g/L}$)	再现性限 R ($\mu\text{g/L}$)
		9.41	0.50	0.95			9.60	0.36	0.95
		50.1	1.58	2.29			50.6	2.02	2.58
		99.7	4.10	4.01			98.3	4.60	5.39
18	三氯乙烯	0.95	0.04	0.08	48	仲丁基苯	1.01	0.05	0.11
		4.69	0.23	0.44			4.58	0.24	0.62
		9.79	0.34	0.97			9.65	0.45	1.09
		49.8	1.67	3.37			50.5	1.72	2.49
		99.8	4.61	5.86			101	4.71	5.06
19	1,2-二氯丙烷	0.94	0.05	0.07	49	4-异丙甲 苯	0.96	0.05	0.13
		4.82	0.21	0.44			4.59	0.22	0.66
		9.82	0.36	0.69			9.54	0.44	1.14
		50.2	1.53	2.64			50.2	1.29	2.74
		99.8	3.81	4.24			101	4.57	5.12
20	一溴二氯甲 烷	1.03	0.05	0.08	50	1,3-二氯 苯	0.96	0.04	0.07
		4.91	0.20	0.54			4.83	0.19	0.28
		9.99	0.26	0.70			9.90	0.30	0.40
		50.0	1.53	3.13			50.6	1.68	2.20
		101	4.17	3.91			101	3.77	4.23
21	二溴甲烷	1.06	0.04	0.11	51	1,4-二氯 苯	0.98	0.05	0.09
		5.02	0.18	0.53			4.86	0.17	0.28
		10.1	0.36	0.95			9.87	0.34	0.48
		50.6	1.72	2.99			50.1	1.65	2.66
		103	3.62	5.12			101	3.63	4.24
22	顺-1,3-二氯 丙烯	1.00	0.05	0.12	52	正丁苯	0.97	0.05	0.12
		4.65	0.19	0.59			4.70	0.23	0.54
		9.41	0.28	1.04			9.56	0.44	1.16
		50.2	1.55	3.38			49.2	1.94	4.60
		102	3.48	4.18			99.7	4.66	5.67
23	甲苯	1.01	0.05	0.09	53	1,2-二氯 苯	0.99	0.04	0.08
		4.89	0.22	0.49			4.83	0.19	0.31
		9.95	0.28	0.82			9.89	0.31	0.41
		50.3	1.70	2.44			49.7	1.09	2.93
		101	4.68	5.14			101	3.42	4.16
24	反-1,3-二氯 丙烯	1.02	0.04	0.13	54	1,2-二溴- 3-氯丙烷	0.97	0.07	0.10
		4.54	0.17	0.59			4.57	0.21	0.61
		9.17	0.29	1.13			9.17	0.41	1.24
		48.1	1.39	3.48			48.6	1.58	5.24
		97.8	3.07	4.61			100	2.73	7.08
25	1,1,2-三氯 乙烷	1.00	0.03	0.07	55	1,3,5-三 氯苯	0.99	0.04	0.10
		4.90	0.22	0.41			4.71	0.19	0.42
		9.85	0.30	0.75			9.83	0.34	0.56

表E.4 方法加标平均值、重复性r和再现性R表 (续)

序号	组分名称	平均值 ($\mu\text{g/L}$)	重复性限 r ($\mu\text{g/L}$)	再现性限 R ($\mu\text{g/L}$)	序号	组分名称	平均值 ($\mu\text{g/L}$)	重复性限 r ($\mu\text{g/L}$)	再现性限 R ($\mu\text{g/L}$)
		49.6	1.49	2.23			50.6	1.17	3.15
		99.3	3.24	4.62			103	3.92	4.92
26	1,3-二氯丙烷	1.00	0.05	0.05	56	1,2,4-三氯苯	0.98	0.03	0.10
		4.76	0.17	0.52			4.60	0.17	0.52
		9.75	0.35	0.78			9.57	0.39	0.95
		49.8	1.38	2.14			50.2	1.90	3.37
		99.7	3.31	3.74			102	3.42	5.38
27	四氯乙烯	0.99	0.05	0.08	57	六氯丁二烯	0.97	0.04	0.06
		4.85	0.24	0.49			4.71	0.22	0.36
		10.0	0.38	0.87			9.75	0.39	0.74
		51.0	1.60	2.40			49.8	1.64	3.68
		102	5.49	5.34			101	4.61	6.66
28	二溴氯甲烷	1.01	0.06	0.12	58	萘	1.00	0.03	0.10
		4.77	0.20	0.48			4.64	0.21	0.56
		9.73	0.37	0.86			9.46	0.36	1.17
		49.9	1.51	2.70			49.7	1.09	3.00
		101	3.63	3.51			101	2.73	4.70
29	1,2-二溴乙烷	1.01	0.05	0.12	59	1,2,3-三氯苯	0.97	0.05	0.12
		4.70	0.17	0.48			4.75	0.17	0.47
		9.74	0.24	0.73			9.80	0.39	0.63
		49.8	1.42	2.71			50.4	1.85	3.14
		100	3.24	4.25			101	3.33	5.27

表E.5 方法加标平均值 m 与重复性 S_r 和再现性 S_R 关系

序号	组分名称	S _r 、S _R 与m的关系		序号	组分名称	S _r 、S _R 与m的关系	
		S _r 和m的关系	S _R 和m的关系			S _r 和m的关系	S _R 和m的关系
1	氯甲烷	S _r =-0.014+0.048m	S _R =-0.072+0.115m	30	氯苯	S _r =0.042m	S _R =0.021+0.08m
2	氯乙烯	S _r =0.001+0.057m	S _R =-0.021+0.098m	31	1,1,1,2-四氯乙烷	S _r =0.077+0.034m	S _R =0.039+0.077m
3	1,1-二氯乙烯	S _r =0.055m	S _R =0.061+0.102m	32	乙苯	S _r =0.045m	S _R =0.085+0.081m
4	二氯甲烷	S _r =0.008+0.036m	S _R =0.034+0.096m	33/34	间二甲苯/对二甲苯	S _r =0.03+0.042m	S _R =0.106+0.079m
5	甲基叔丁基醚	S _r =0.006+0.033m	S _R =0.114m	35	邻二甲苯	S _r =0.043m	S _R =0.12+0.066m
6	反-1,2-二氯乙烯	S _r =0.007+0.044m	S _R =0.054+0.107m	36	苯乙烯	S _r =0.04m	S _R =0.023+0.063m
7	1,1-二氯乙烷	S _r =0.043m	S _R =0.008+0.123m	37	异丙苯	S _r =0.011+0.043m	S _R =0.044+0.078m
8	氯丁二烯	S _r =-0.005+0.054m	S _R =0.167m	38	三溴甲烷	S _r =0.039m	S _R =0.051+0.081m
9	2,2-二氯丙烷	S _r =0.051m	S _R =-0.018+0.143m	39	1,1,2,2-四氯乙烷	S _r =0.017+0.033m	S _R =0.007+0.068m
10	顺-1,2-二氯乙烯	S _r =0.011+0.037m	S _R =0.03+0.109m	40	1,2,3-三氯丙烷	S _r =0.0001+0.045m	S _R =0.001+0.077m
11	三氯甲烷	S _r =0.04m	S _R =0.225+0.091m	41	正丙苯	S _r =0.044m	S _R =0.053+0.072m
12	溴氯甲烷	S _r =0.021+0.032m	S _R =-0.006+0.11m	42	溴苯	S _r =0.006+0.038m	S _R =0.047+0.068m
13	1,1,1-三氯乙烷	S _r =0.003+0.047m	S _R =0.115m	43	1,3,5-三甲苯	S _r =0.044m	S _R =0.085+0.064m
14	1,1-二氯丙烷	S _r =-0.007+0.05m	S _R =0.077+0.1m	44	2-氯甲苯	S _r =0.041m	S _R =0.068+0.065m
15	四氯化碳	S _r =0.052m	S _R =0.012+0.103m	45	4-氯甲苯	S _r =0.044m	S _R =0.068+0.065m
16	1,2-二氯乙烷	S _r =-0.0002+0.034m	S _R =0.046+0.09m	46	叔丁基苯	S _r =0.022+0.046m	S _R =0.088+0.076m
17	苯	S _r =0.044m	S _R =0.041+0.068m	47	1,2,4-三甲苯	S _r =0.045m	S _R =0.04+0.075m
18	三氯乙烯	S _r =0.042m	S _R =0.003+0.084m	48	仲丁基苯	S _r =0.046m	S _R =0.056+0.079m
19	1,2-二氯丙烷	S _r =0.039m	S _R =0.016+0.066m	49	4-异丙甲苯	S _r =0.01+0.041m	S _R =0.088+0.08m
20	一溴二氯甲烷	S _r =0.015+0.032m	S _R =0.021+0.07m	50	1,3-二氯苯	S _r =0.038m	S _R =0.013+0.054m
21	二溴甲烷	S _r =0.003+0.033m	S _R =0.038+0.077m	51	1,4-二氯苯	S _r =0.012+0.035m	S _R =0.033+0.056m
22	顺-1,3-二氯丙烷	S _r =0.016+0.034m	S _R =0.046+0.086m	52	正丁苯	S _r =0.047m	S _R =0.039+0.093m
23	甲苯	S _r =0.041m	S _R =0.028+0.072m	53	1,2-二氯苯	S _r =0.015+0.031m	S _R =0.027+0.055m
24	反-1,3-二氯丙烷	S _r =0.011+0.033m	S _R =0.061+0.087m	54	1,2-二溴-3-氯丙烷	S _r =0.042m	S _R =0.016+0.1m
25	1,1,2-三氯乙烷	S _r =-0.005+0.036m	S _R =0.015+0.063m	55	1,3,5-三氯苯	S _r =0.009+0.035m	S _R =0.036+0.068m
26	1,3-二氯丙烷	S _r =0.016+0.033m	S _R =-0.001+0.065m	56	1,2,4-三氯苯	S _r =-0.002+0.038m	S _R =0.039+0.079m
27	四氯乙烯	S _r =0.009+0.045m	S _R =0.018+0.074m	57	六氯丁二烯	S _r =0.003+0.043m	S _R =-0.013+0.078m
28	二溴氯甲烷	S _r =0.04m	S _R =0.078+0.062m	58	萘	S _r =-0.004+0.033m	S _R =0.085m
29	1,2-二溴乙烷	S _r =0.017+0.031m	S _R =0.069+0.063m	59	1,2,3-三氯苯	S _r =0.04m	S _R =0.061+0.065m