岛津
SHIMADZU
Excellence in Science

GCMS TVOC 计算软件使用指南

岛津企业管理（中国）有限公司
分析计测事业部 分析中心

目录

第一部分 GCMS TVOC 计算软件介绍 3

1.1 软件功能介绍 3

1.2 软件运行环境 4

1.3 软件安装 4

第二部分 TVOC 计算 7

2.1 标准曲线的建立 7

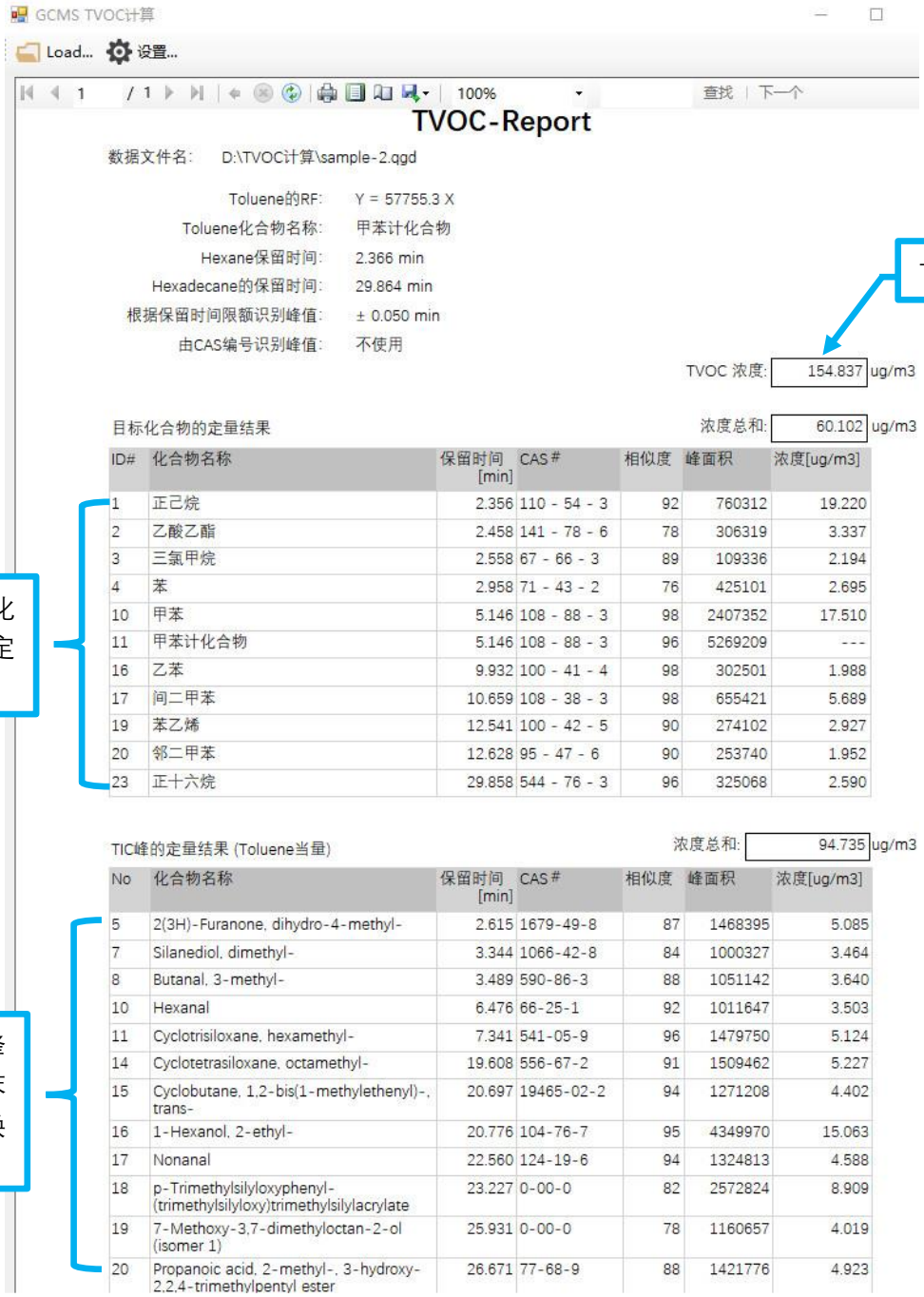
2.2 单个样品的 TVOC 计算 14

2.3 批处理 TVOC 计算 19

第一部分 GCMS TVOC 计算软件介绍

1.1 软件功能介绍

本软件可以读取事先通过 GCMSsolution 解析得到的数据进行 TVOC（总挥发性有机物）浓度的计算。主画面上显示目标化合物的定量结果表、未知峰的甲苯换算定量结果表以及两部分浓度值合计得到的 TVOC 浓度值。



ID#	化合物名称	保留时间 [min]	CAS #	相似度	峰面积	浓度[ug/m3]
1	正己烷	2.356	110 - 54 - 3	92	760312	19.220
2	乙酸乙酯	2.458	141 - 78 - 6	78	306319	3.337
3	三氯甲烷	2.558	67 - 66 - 3	89	109336	2.194
4	苯	2.958	71 - 43 - 2	76	425101	2.695
10	甲苯	5.146	108 - 88 - 3	98	2407352	17.510
11	甲苯计化合物	5.146	108 - 88 - 3	96	5269209	---
16	乙苯	9.932	100 - 41 - 4	98	302501	1.988
17	间二甲苯	10.659	108 - 38 - 3	98	655421	5.689
19	苯乙烯	12.541	100 - 42 - 5	90	274102	2.927
20	邻二甲苯	12.628	95 - 47 - 6	90	253740	1.952
23	正十六烷	29.858	544 - 76 - 3	96	325068	2.590

No	化合物名称	保留时间 [min]	CAS #	相似度	峰面积	浓度[ug/m3]
5	2(3H)-Furanone, dihydro-4-methyl-	2.615	1679-49-8	87	1468395	5.085
7	Silanediol, dimethyl-	3.344	1066-42-8	84	1000327	3.464
8	Butanal, 3-methyl-	3.489	590-86-3	88	1051142	3.640
10	Hexanal	6.476	66-25-1	92	1011647	3.503
11	Cyclotrisiloxane, hexamethyl-	7.341	541-05-9	96	1479750	5.124
14	Cyclotetrasiloxane, octamethyl-	19.608	556-67-2	91	1509462	5.227
15	Cyclobutane, 1,2-bis(1-methylethenyl)-, trans-	20.697	19465-02-2	94	1271208	4.402
16	1-Hexanol, 2-ethyl-	20.776	104-76-7	95	4349970	15.063
17	Nonanal	22.560	124-19-6	94	1324813	4.588
18	p-Trimethylsilyloxyphenyl-(trimethylsilyloxy)trimethylsilylacrylate	23.227	0-00-0	82	2572824	8.909
19	7-Methoxy-3,7-dimethyloctan-2-ol (isomer 1)	25.931	0-00-0	78	1160657	4.019
20	Propanoic acid, 2-methyl-, 3-hydroxy-2,2,4-trimethylpentyl ester	26.671	77-68-9	88	1421776	4.923

1.2 软件运行环境

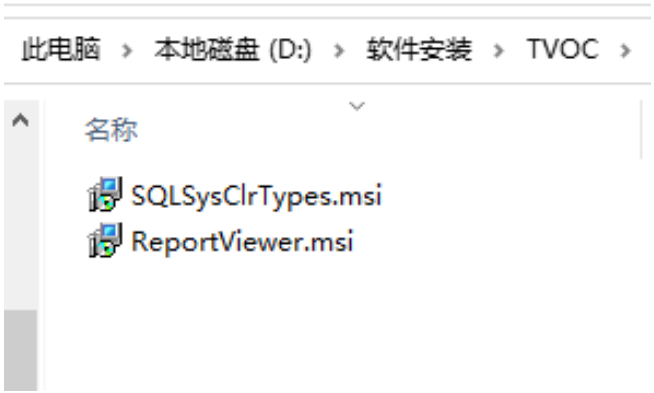
电脑系统	Windows 10 Professional 64 bit 版
工作站软件	GCMSsolution Ver4.50SP1 以后的版本

1.3 软件安装

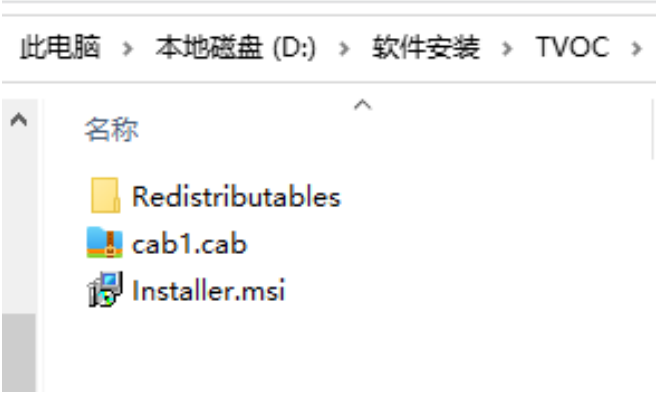
安装步骤:

1、将 GCMS TVOC 计算软件的安装 CD 插入至 PC。

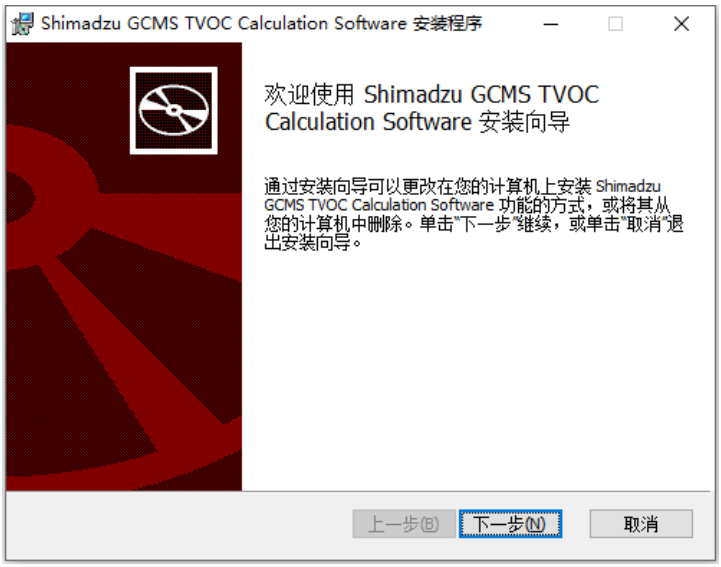
2、打开 CD 驱动器目录，切换至 Redistributables 文件夹，依次双击并安装 SQLSysClrTypes.msi 和 ReportViewer.msi。



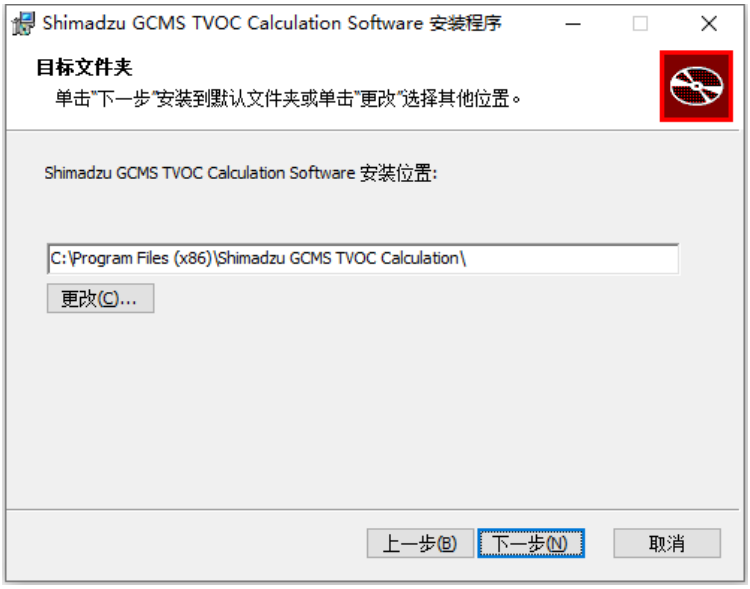
3、打开 CD 驱动器目录，双击并安装 installer.msi。



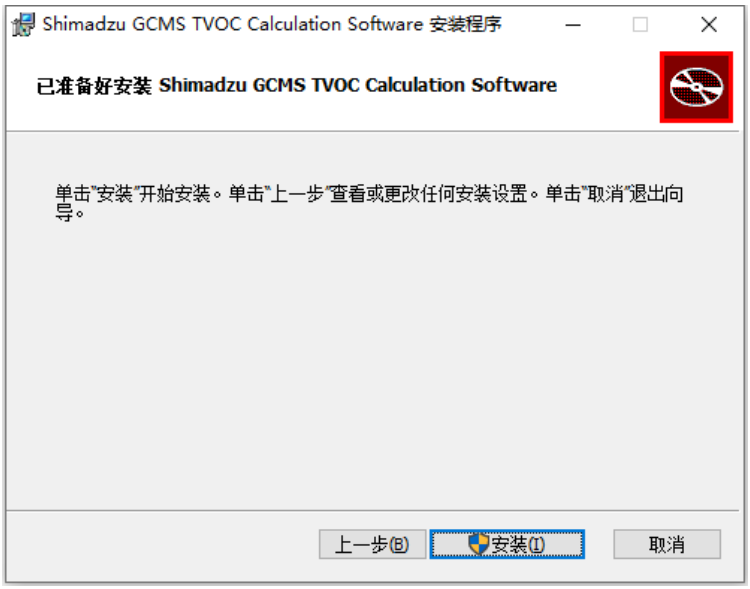
4、开始安装。点击下一步。



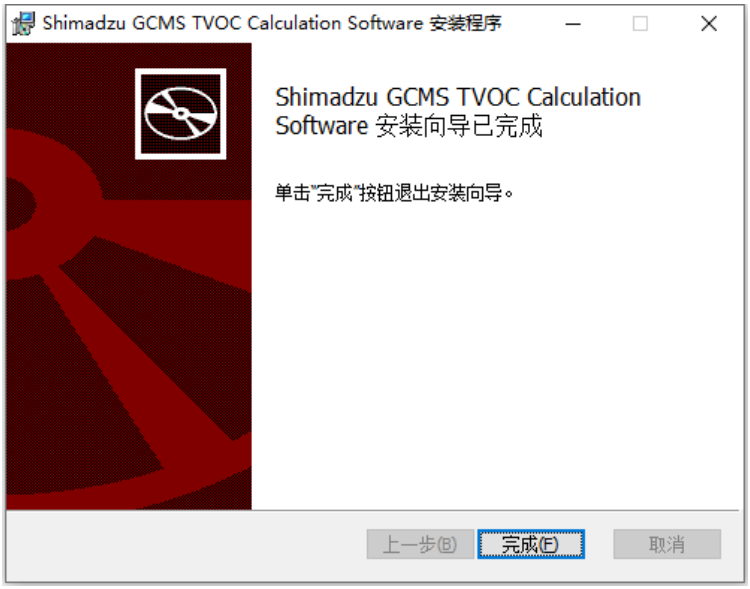
5、确认安装位置，然后点击下一步。默认安装位置为 C:\Program Files(x86)\Shimadzu GCMS TVOC Calculation。



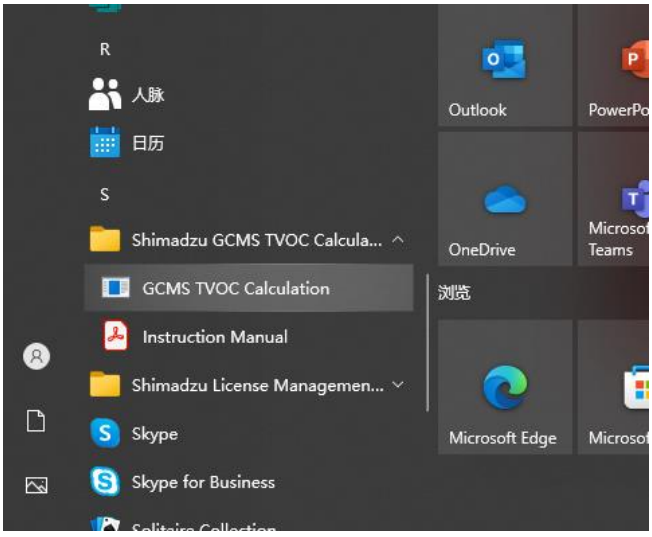
6、点击安装。



7、安装完成。点击完成。



8.启动本软件时，开始菜单内选择 Shimadzu GCMS TVOC Calculation Software。



第二部分 TVOC 计算

2.1 标准曲线的建立

1、化合物表建立

打开一个标准品数据文件，按照 GCMSsolution 基础操作，建立 22 种目标化合物的化合物表。

查看 编辑

ID#	名称	保留时间	m/z	参考离子	类型
1	正己烷	2.366	57.00	41.00-86.10	目标
2	乙酸乙酯	2.469	43.00	61.00-45.00	目标
3	三氯甲烷	2.568	83.00	47.00	目标
4	苯	2.967	78.00	77.00	目标
5	四氯化碳	3.008	117.00	78.00	目标
6	环己烷	3.009	84.00	56.00	目标
7	正庚烷	3.520	43.00	71.10	目标
8	三氯乙烯	3.526	60.00	95.00	目标
9	甲基环己烷	4.042	83.00	55.00	目标
10	甲苯	5.160	91.00	92.00-65.00	目标
11	正辛烷	6.482	85.00	43.00-57.00	目标
12	四氯乙烯	6.653	166.00	129.00	目标
13	乙酸丁酯	7.249	56.00	43.00	目标
14	氯苯	8.861	77.00	112.00	目标
15	乙苯	9.944	91.00	106.00	目标
16	间二甲苯	10.672	91.00	106.00	目标
17	对二甲苯	10.774	91.00	106.00	目标
18	苯乙烯	12.562	104.00	103.00	目标
19	邻二甲苯	12.643	91.00	106.00	目标
20	正壬烷	14.043	43.00	57.00	目标
21	1,4-二氯苯	20.195	146.00	111.00	目标
22	正十六烷	29.864	57.00	71.00	目标

参数 结果 组参数 组结果

在编辑状态下，选择甲苯的下一行，点击鼠标右键，选择插入行。



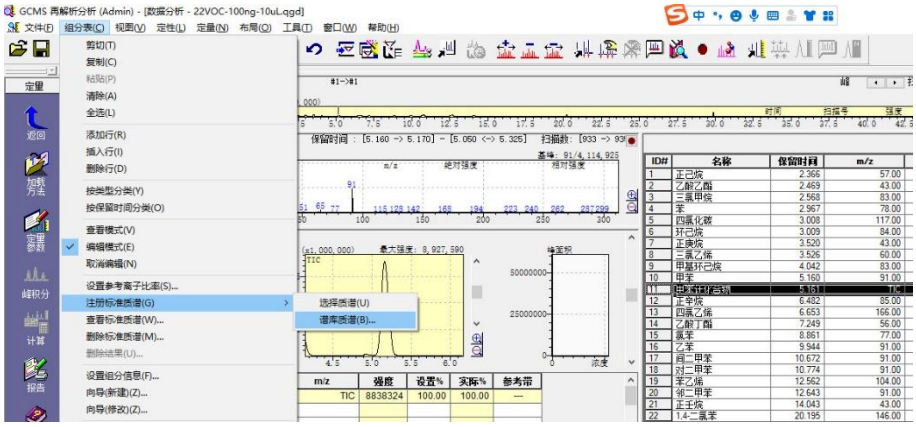
在该行的名称栏填入“甲苯计化合物”，m/z 栏输入 TIC，保留时间按照甲苯的保留时间输入，但不能完全一致，如这里甲苯的保留时间为 5.160，甲苯计化合物的则输入 5.161。

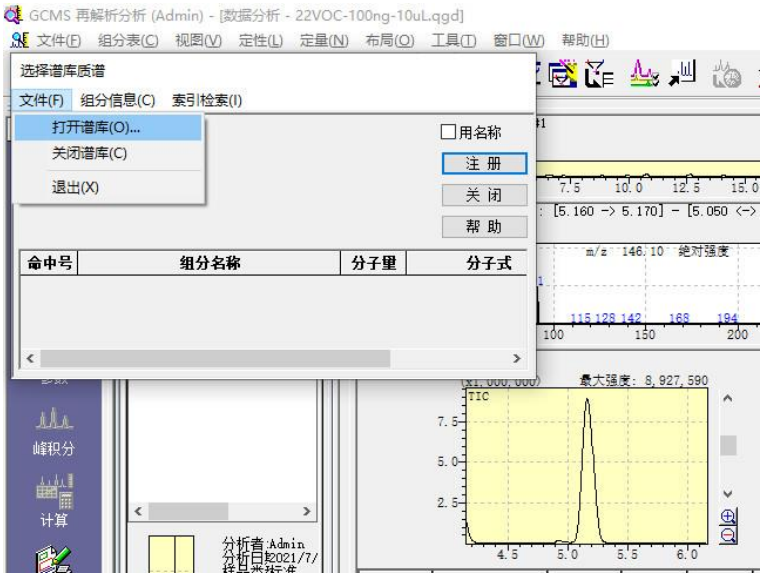
查看 编辑

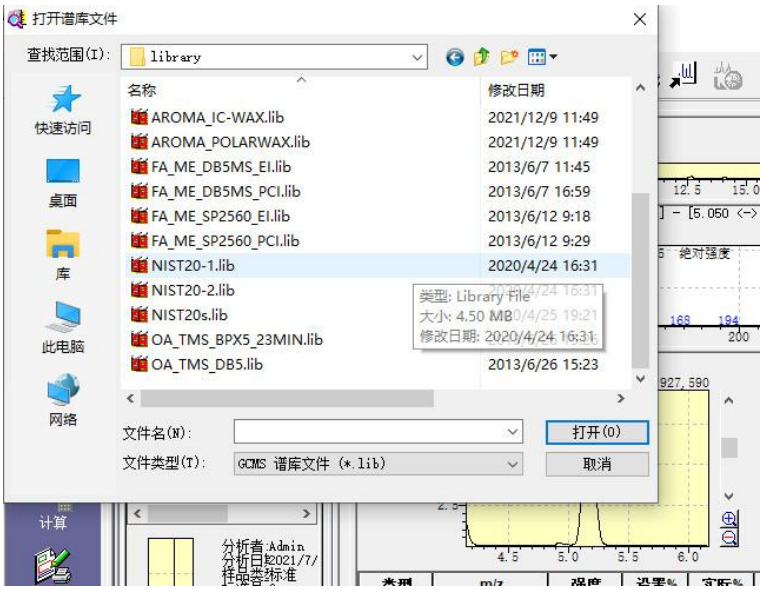
ID#	名称	保留时间	m/z	参考离子	类型
1	正己烷	2.366	57.00	41.00-86.10	目标
2	乙酸乙酯	2.469	43.00	61.00-45.00	目标
3	三氯甲烷	2.568	83.00	47.00	目标
4	苯	2.967	78.00	77.00	目标
5	四氯化碳	3.008	117.00	78.00	目标
6	环己烷	3.009	84.00	56.00	目标
7	正庚烷	3.520	43.00	71.10	目标
8	三氯乙烯	3.526	60.00	95.00	目标
9	甲基环己烷	4.042	83.00	55.00	目标
10	甲苯	5.160	91.00	92.00-65.00	目标
11	甲苯计化合物	5.161	TIC		目标
12	正辛烷	6.482	85.00	43.00-57.00	目标
13	四氯乙烯	6.653	166.00	129.00	目标
14	乙酸丁酯	7.249	56.00	43.00	目标
15	氯苯	8.861	77.00	112.00	目标
16	乙苯	9.944	91.00	106.00	目标
17	间二甲苯	10.672	91.00	106.00	目标
18	对二甲苯	10.774	91.00	106.00	目标
19	苯乙烯	12.562	104.00	103.00	目标
20	邻二甲苯	12.643	91.00	106.00	目标
21	正壬烷	14.043	43.00	57.00	目标
22	1,4-二氯苯	20.195	146.00	111.00	目标

参数 结果 组参数 组结果

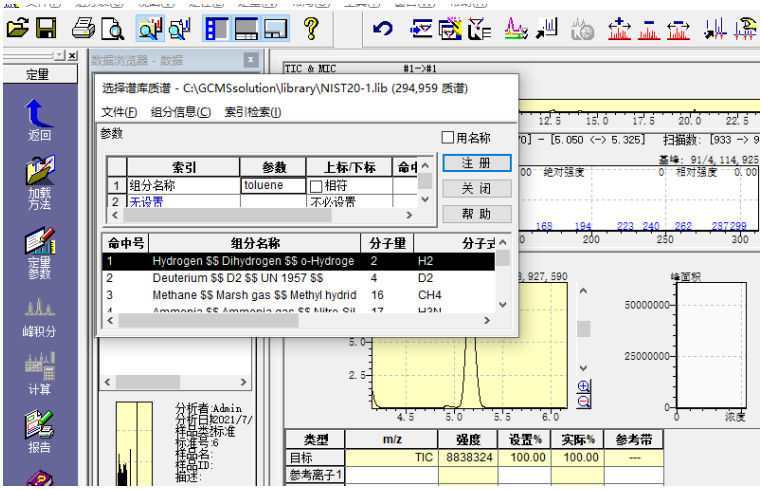
选中甲苯计化合物行，点击菜单栏中的组分表，选择注册标准质谱—谱库质谱，在弹出的窗口选择打开谱库，将查找范围的文件路径改为 GCMS 谱库所在位置，如 C:\GCMSsolution\library,选择一个谱库，如“NIST20-1.lib”，点打开。







在索引栏选择任意检索项，然后在参数栏输入甲苯对应的信息，如索引栏选择组分名称，参数栏输入 toluene，点击菜单栏中索引检索，完成检索后点击注册，关闭窗口，此时化合物表中甲苯计化合物的标准质谱栏显示已登记。





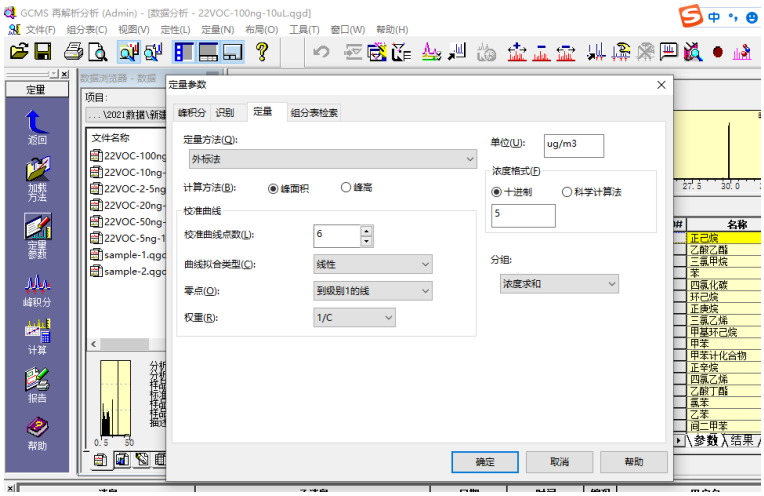
查看 编辑

ID#	名称	保留时间	m/z	参考离子	标准谱图	类
1	正己烷	2.366	57.00	41.00-86.10	已登记	目标
2	乙酸乙酯	2.469	43.00	61.00-45.00	已登记	目标
3	三氯甲烷	2.568	83.00	47.00	已登记	目标
4	苯	2.967	78.00	77.00	已登记	目标
5	四氯化碳	3.008	117.00	78.00	已登记	目标
6	环己烷	3.009	84.00	56.00	已登记	目标
7	正庚烷	3.520	43.00	71.10	已登记	目标
8	三氯乙烯	3.526	60.00	95.00	已登记	目标
9	甲基环己烷	4.042	83.00	55.00	已登记	目标
10	甲苯	5.160	91.00	92.00-65.00	已登记	目标
11	甲苯计化合物	5.161	TIC		已登记	目标
12	正辛烷	6.482	85.00	43.00-57.00	已登记	目标
13	四氯乙烯	6.653	166.00	129.00	已登记	目标
14	乙酸丁酯	7.249	56.00	43.00	已登记	目标
15	氯苯	8.861	77.00	112.00	已登记	目标
16	乙苯	9.944	91.00	106.00	已登记	目标
17	间二甲苯	10.672	91.00	106.00	已登记	目标
18	对二甲苯	10.774	91.00	106.00	已登记	目标
19	苯乙烯	12.562	104.00	103.00	已登记	目标
20	邻二甲苯	12.643	91.00	106.00	已登记	目标
21	正壬烷	14.043	43.00	57.00	已登记	目标
22	1,4-二氯苯	20.195	146.00	111.00	已登记	目标

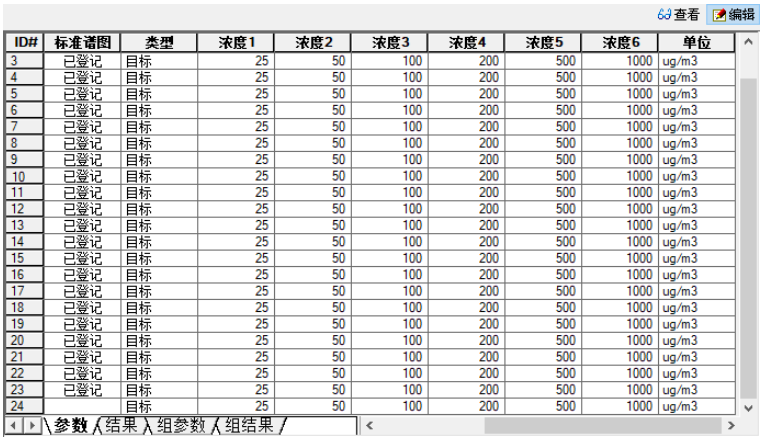
参数 结果 组参数 组结果

2、设置定量参数

点击定量参数，在定量界面设置定量方法为外标法，校准曲线点数根据实际情况设置，其他设置可参照下图。



输入各化合物各级别浓度。

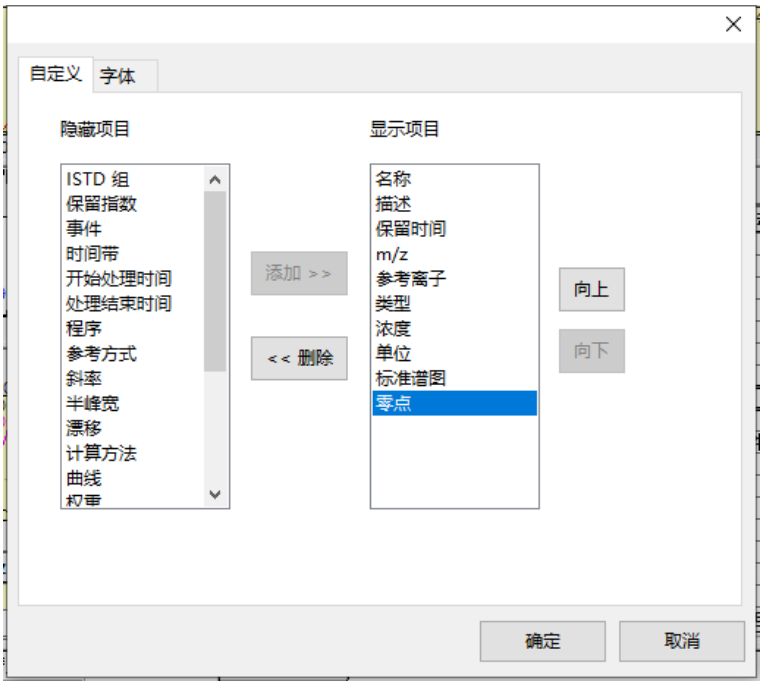


查看 编辑

ID#	标准谱图	类型	浓度1	浓度2	浓度3	浓度4	浓度5	浓度6	单位
3	已登记	目标	25	50	100	200	500	1000	ug/m3
4	已登记	目标	25	50	100	200	500	1000	ug/m3
5	已登记	目标	25	50	100	200	500	1000	ug/m3
6	已登记	目标	25	50	100	200	500	1000	ug/m3
7	已登记	目标	25	50	100	200	500	1000	ug/m3
8	已登记	目标	25	50	100	200	500	1000	ug/m3
9	已登记	目标	25	50	100	200	500	1000	ug/m3
10	已登记	目标	25	50	100	200	500	1000	ug/m3
11	已登记	目标	25	50	100	200	500	1000	ug/m3
12	已登记	目标	25	50	100	200	500	1000	ug/m3
13	已登记	目标	25	50	100	200	500	1000	ug/m3
14	已登记	目标	25	50	100	200	500	1000	ug/m3
15	已登记	目标	25	50	100	200	500	1000	ug/m3
16	已登记	目标	25	50	100	200	500	1000	ug/m3
17	已登记	目标	25	50	100	200	500	1000	ug/m3
18	已登记	目标	25	50	100	200	500	1000	ug/m3
19	已登记	目标	25	50	100	200	500	1000	ug/m3
20	已登记	目标	25	50	100	200	500	1000	ug/m3
21	已登记	目标	25	50	100	200	500	1000	ug/m3
22	已登记	目标	25	50	100	200	500	1000	ug/m3
23	已登记	目标	25	50	100	200	500	1000	ug/m3
24		目标	25	50	100	200	500	1000	ug/m3

参数 结果 组参数 组结果

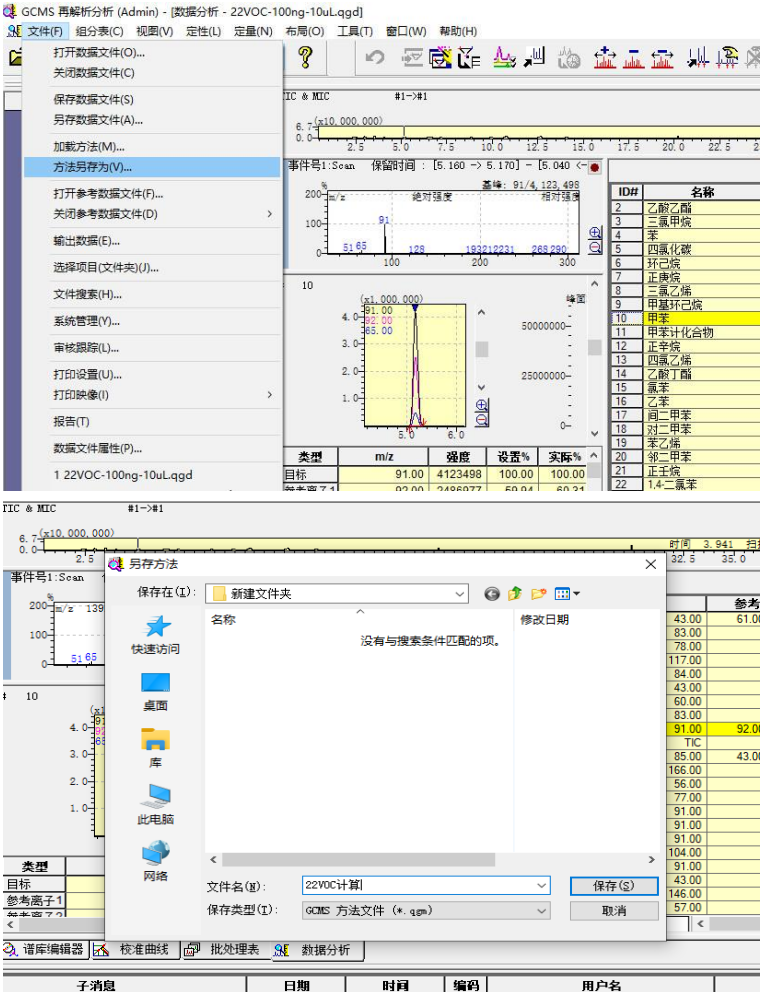
化合物表上点击鼠标右键，点击表样式，将隐藏项目中的零点添加到显示项目，点击确定。



将甲苯计化合物的的零点参数改为强制通过。

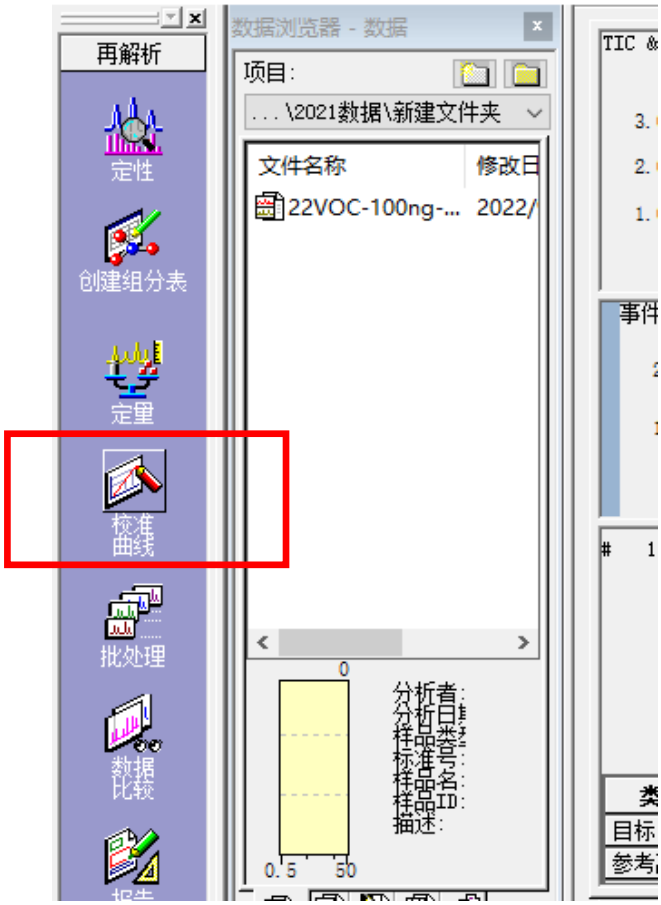
ID#	名称	零点
2	乙酸乙酯	缺省
3	三氯甲烷	缺省
4	苯	缺省
5	四氯化碳	缺省
6	环己烷	缺省
7	正庚烷	缺省
8	三氯乙烯	缺省
9	甲基环己烷	缺省
10	甲苯	缺省
11	甲苯计化合物	强制通过
12	正辛烷	缺省
13	四氯乙烯	缺省
14	乙酸丁酯	缺省
15	氯苯	缺省
16	乙苯	缺省
17	间二甲苯	缺省
18	对二甲苯	缺省

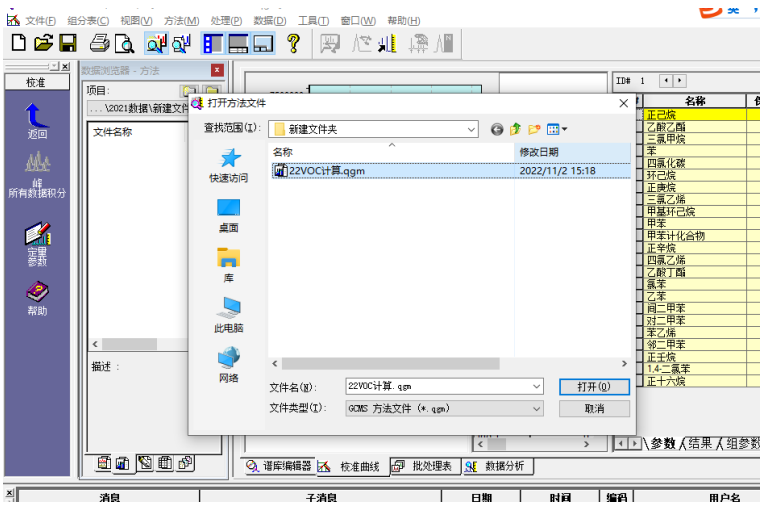
切换到查看状态，点击菜单栏中的文件，选择方法另存为，生成一个用于建立标准曲线的方法。



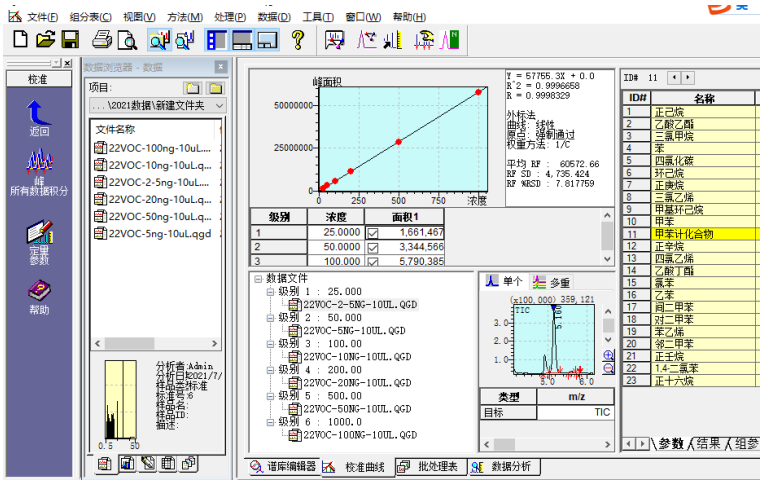
3、建立标准曲线

点击辅助栏的返回，点击校准曲线，进入校准曲线界面，点击菜单栏的文件，选择打开方法文件，选中刚才保存的方法打开。





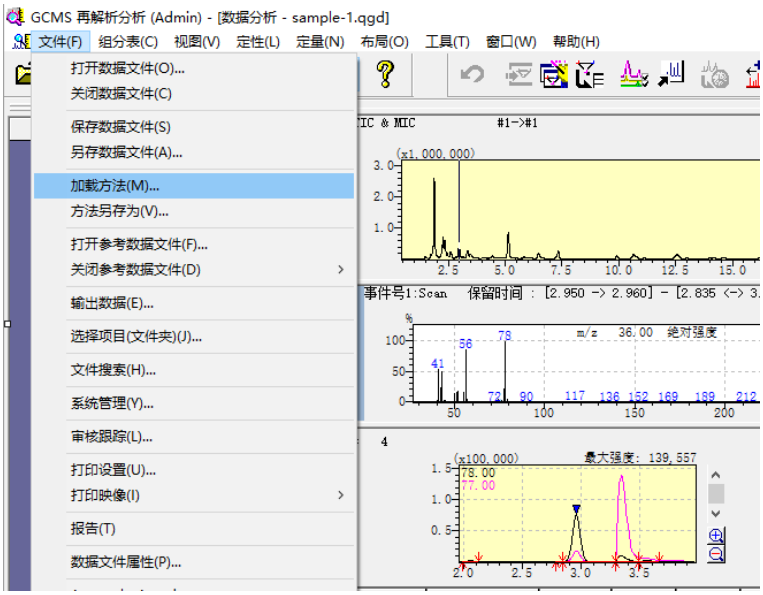
从数据浏览器将对应标准样品的数据拖到数据文件框对应级别处，建立标准曲线。检查各化合物的标准曲线，如有化合物积分或识别错误，可在色谱图窗口进行调整。记下甲苯计化合物最低浓度点峰面积，根据此峰面积手动计算 2μg/m3 对应的峰面积（《GB/T 18883-2022 室内空气质量标准》附录 D 规定 TVOC 浓度应合并特征目标化合物和浓度大于 2μg/m3 的未校正化合物）。保存方法文件（这里将此方法文件命名为“22VOC 计算”）。



2.2 单个样品的 TVOC 计算

1、目标化合物定量计算

打开样品数据，在文件中加载前述方法文件“22VOC 计算”，点击辅助栏定量，点击峰积分。待自动积分结束，点击化合物表中结果标签，检查各化合物的检测结果，对识别错误的峰进行纠正。



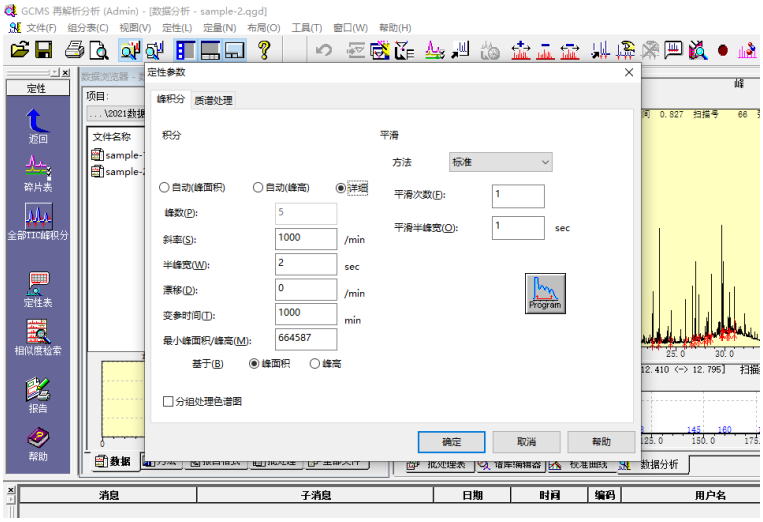
查看 编辑

ID#	名称	保留时间	浓度	保留指数	类型	m/z
1	正己烷	2.354	82.36369	0	目标	57.00
2	乙酸乙酯	2.457	15.08177	0	目标	43.00
3	三氯甲烷	2.555	9.50750	0	目标	83.00
4	苯	2.956	11.30547	0	目标	78.00
5	四氯化碳	没有识别到峰。				
6	环己烷	没有识别到峰。				
7	正庚烷	没有识别到峰。				
8	三氯乙烯	没有识别到峰。				
9	甲基环己烷	没有识别到峰。				
10	甲苯	5.145	70.41280	0	目标	91.00
11	甲苯计化合	5.145	70.89498	0	目标	TIC
12	正辛烷	没有识别到峰。				
13	四氯乙烯	没有识别到峰。				
14	乙酸丁酯	没有识别到峰。				
15	氯苯	没有识别到峰。				
16	乙苯	没有识别到峰。				
17	间二甲苯	10.653	23.16846	0	目标	91.00
18	对二甲苯	在时间窗/时间带范围内没有发现峰。				
19	苯乙烯	12.544	11.83779	0	目标	104.00
20	邻二甲苯	没有识别到峰。				
21	正壬烷	没有识别到峰。				
22	1,4-二氯苯	没有识别到峰。				
23	正十六烷	29.858	11.88117	0	目标	57.00

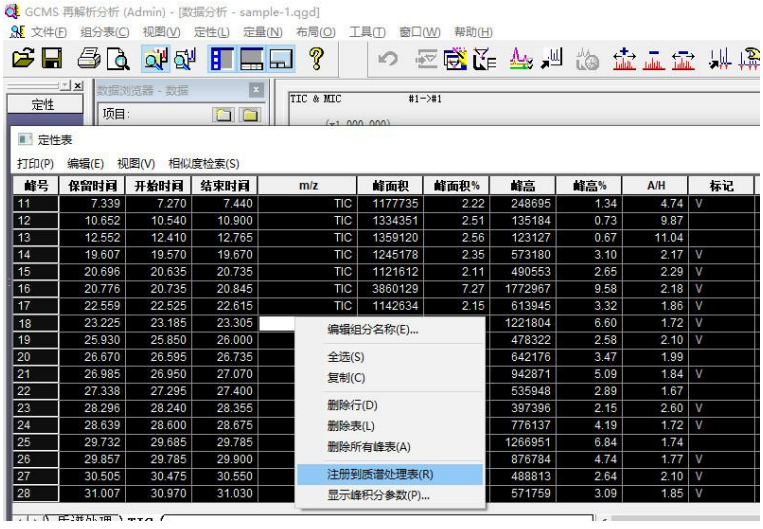
参数 结果 组参数 组结果

2、TVOC 计算

点击辅助栏的返回，点击定性进入定性界面。点击全部 TIC 峰积分，在弹出的定性参数窗口，将最小峰面积的参数设置为 2μg/m3 对应的峰面积，然后点击确定。

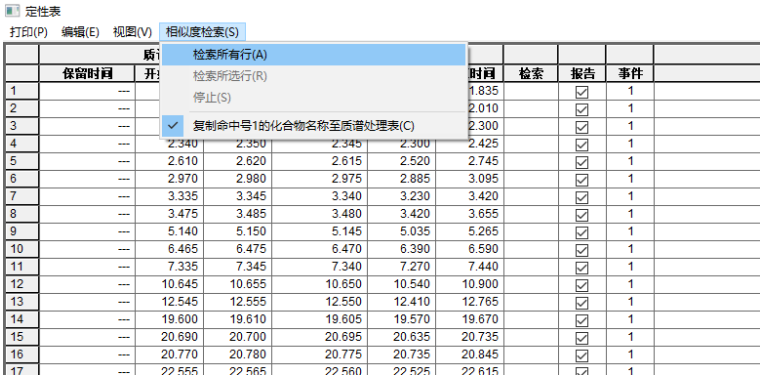


点击辅助栏定性表，选中所有行，点击鼠标右键，点击注册到质谱处理表。

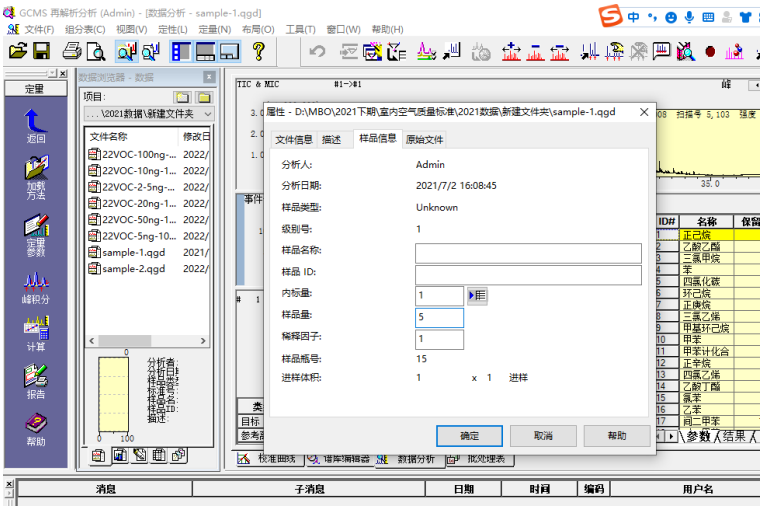


峰号	保留时间	开始时间	结束时间	m/z	峰面积	峰面积%	峰高	峰高%	A/H	标记
11	7.339	7.270	7.440	TIC	1177735	2.22	248695	1.34	4.74	V
12	10.652	10.540	10.900	TIC	1334351	2.51	135184	0.73	9.87	
13	12.552	12.410	12.765	TIC	1359120	2.56	123127	0.67	11.04	
14	19.607	19.570	19.670	TIC	1245178	2.35	573180	3.10	2.17	V
15	20.696	20.635	20.735	TIC	1121612	2.11	490553	2.65	2.29	V
16	20.776	20.735	20.845	TIC	3860129	7.27	1772967	9.58	2.18	V
17	22.559	22.525	22.615	TIC	1142634	2.15	613945	3.32	1.86	V
18	23.225	23.185	23.305				1221804	6.60	1.72	V
19	25.930	25.850	26.000				478322	2.58	2.10	V
20	26.670	26.595	26.735				642176	3.47	1.99	
21	26.985	26.950	27.070				942871	5.09	1.84	V
22	27.338	27.295	27.400				535948	2.89	1.67	
23	28.296	28.240	28.355				397396	2.15	2.60	V
24	28.639	28.600	28.675				776137	4.19	1.72	V
25	29.732	29.685	29.785				1266951	6.84	1.74	
26	29.857	29.785	29.900				876784	4.74	1.77	V
27	30.505	30.475	30.550				488813	2.64	2.10	V
28	31.007	30.970	31.030				571759	3.09	1.85	V

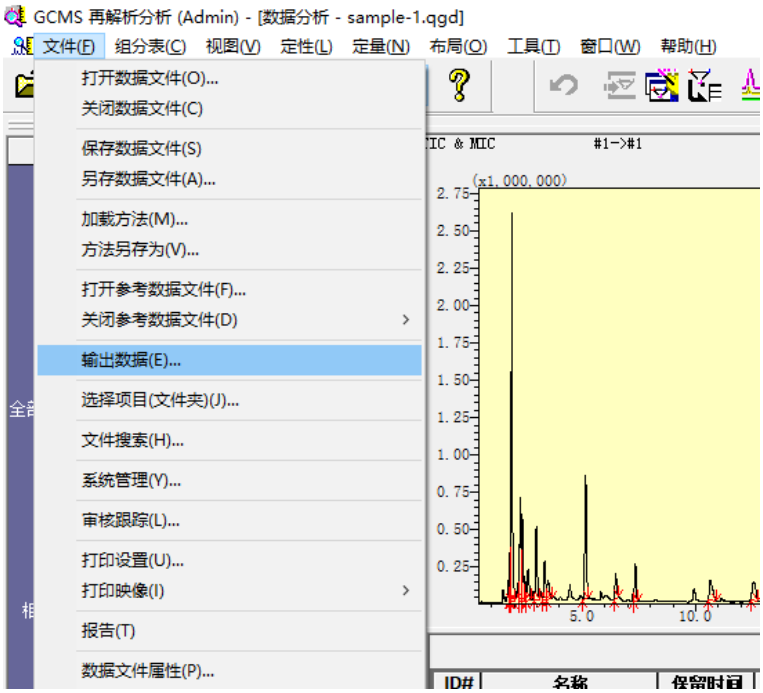
切换到质谱处理表界面，点击菜单栏中相似度检索，选择检索所有行，待检索结束，关闭此窗口。保存数据文件，另存一个方法文件（此方法文件用于后面批处理分析）。



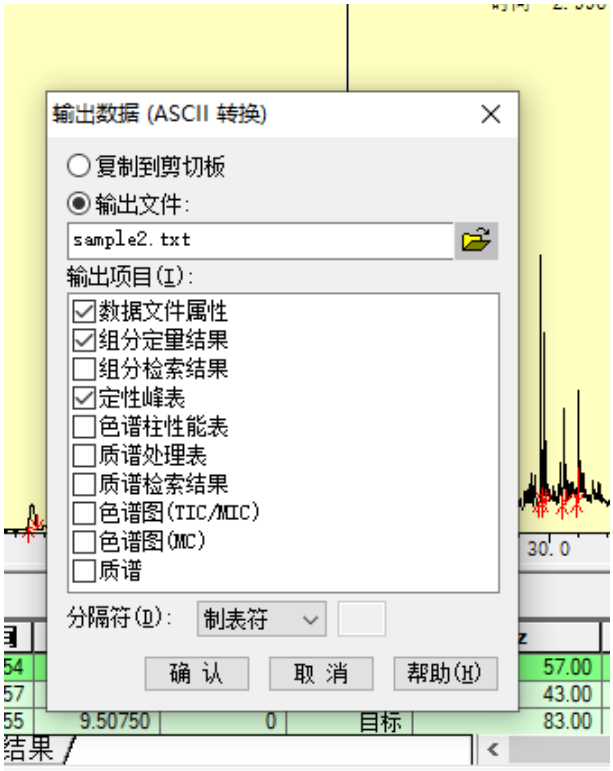
点击文件，选择数据文件属性，在属性窗口点击样品信息标签，输入样品量信息（即空气的吸收体积，如果标液浓度以 ng 计，则此体积单位为 L），点击确定。



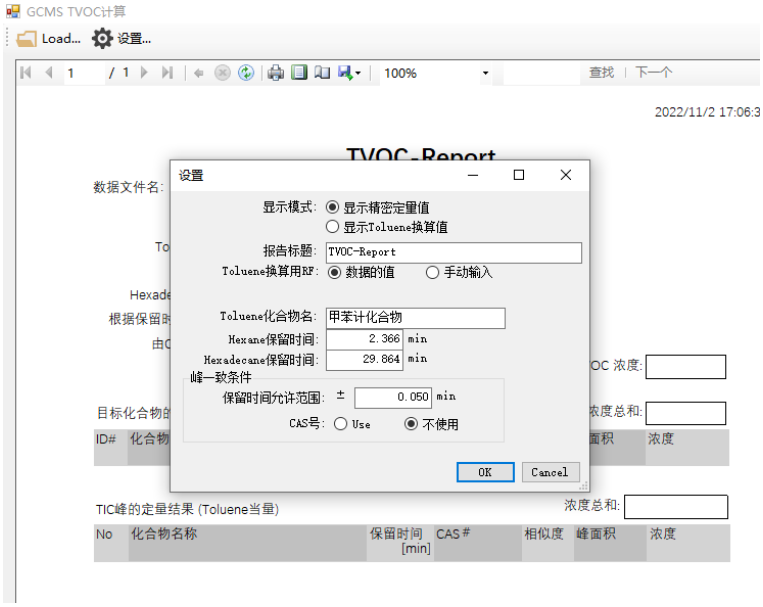
点击文件，点击输出数据。



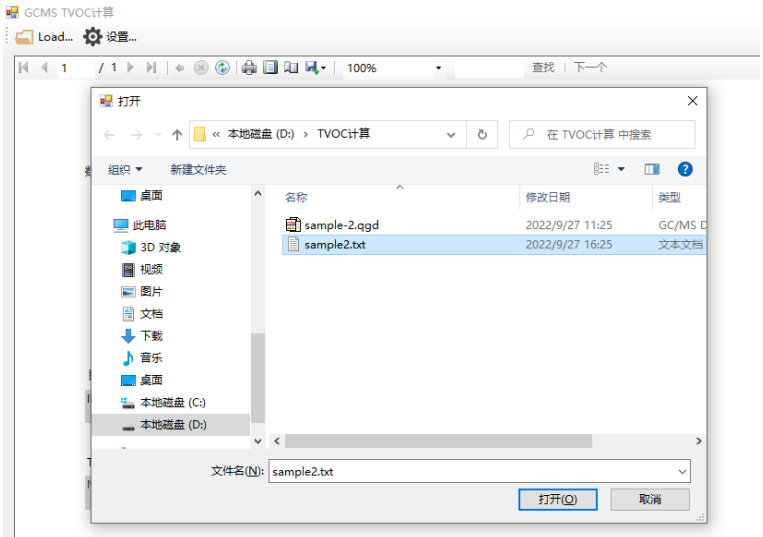
在输出数据窗口，设置好输出文件名以及保存的文件夹，其他设置如下图所示。设置好后，点击确认，即输出一个 txt 文件。



打开 GCMS TVOC 计算软件，点击设置，在弹出的设置窗口设置各项参数。报告标题可以根据实际情况输入，Toluene 化合物名与前面化合物表一致，这里输入甲苯计化合物，Hexane 保留时间与 Hexadecane 保留时间分别填入正己烷与正十六烷的实际保留时间。其他参数可以参照下图设置。



点击 Load 选择前述导出的 txt 文件，点击打开，软件即自动计算结果。



GCMS TVOC计算

Load... 设置...

1 / 2 100% 查找 下一个

2022/11/7 10:09:45

TVOC-Report

数据文件名: D:\MBO\2021下期\室内空气质量标准\2021数据\GCMS-409 raw data\数据运算\批处理计算\sample-2.qgd

Toluene的RF:	Y = 57755.3 X
Toluene化合物名称:	甲苯计化合物
Hexane保留时间:	2.366 min
Hexadecane的保留时间:	29.864 min
根据保留时间限额识别峰值:	± 0.050 min
由CAS编号识别峰值:	不使用

TVOC 浓度: 162.576 ug/m3

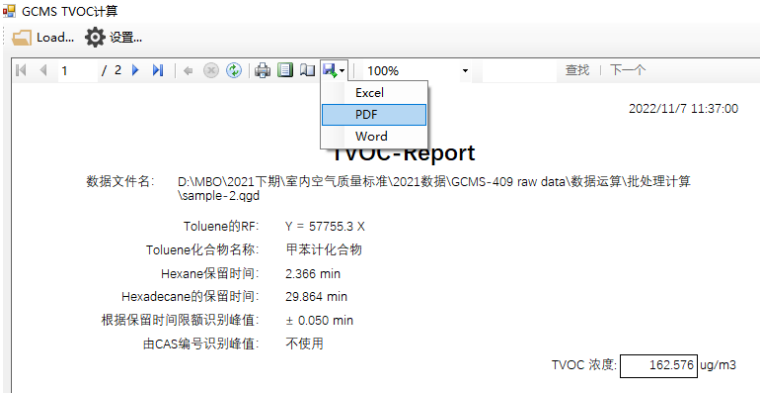
目标化合物的定量结果 浓度总和: 60.102 ug/m3

ID#	化合物名称	保留时间 [min]	CAS #	相似度	峰面积	浓度[ug/m3]
1	正己烷	2.356	110 - 54 - 3	92	760312	19.220
2	乙酸乙酯	2.458	141 - 78 - 6	78	306319	3.337
3	三氯甲烷	2.558	67 - 66 - 3	89	109336	2.194
4	苯	2.958	71 - 43 - 2	76	425101	2.695
10	甲苯	5.146	108 - 88 - 3	98	2407352	17.510
11	甲苯计化合物	5.146	108 - 88 - 3	96	5269209	---
16	乙苯	9.932	100 - 41 - 4	98	302501	1.988
17	间二甲苯	10.659	108 - 38 - 3	98	655421	5.689
19	苯乙烯	12.541	100 - 42 - 5	90	274102	2.927
20	邻二甲苯	12.628	95 - 47 - 6	90	253740	1.952
23	正十六烷	29.858	544 - 76 - 3	96	325068	2.590

TIC峰的定量结果 (Toluene当量) 浓度总和: 102.474 ug/m3

No	化合物名称	保留时间 [min]	CAS #	相似度	峰面积	浓度[ug/m3]
6	2(3H)-Furanone, dihydro-4-methyl-	2.615	1679-49-8	87	1468395	5.085
8	Silanediol, dimethyl-	3.344	1066-42-8	84	1000327	3.464
9	Butanal, 3-methyl-	3.489	590-86-3	88	1051142	3.640
11	Hexanal	6.476	66-25-1	92	1011647	3.503
12	Cyclotrisiloxane, hexamethyl-	7.341	541-05-9	96	1479750	5.124
15	N-[1-(Benzimidoyl-amino)-2,2,2-trifluoro-1-trifluoromethyl-ethyl]-benzamide	18.275	0-00-0	87	710501	2.460
16	Cyclotetrasiloxane, octamethyl-	19.608	556-67-2	91	1509462	5.227
17	Cyclobutane, 1,2-bis(1-methylethenyl)-, trans-	20.697	19465-02-2	94	1271208	4.402
18	1-Hexanol, 2-ethyl-	20.776	104-76-7	95	4349970	15.063
19	Nonanal	22.560	124-19-6	94	1324813	4.588
20	p-Trimethylsilyloxyphenyl-(trimethylsilyloxy)trimethylsilylacrylate	23.227	0-00-0	82	2572824	8.909
21	Decanal	24.447	112-31-2	93	760196	2.632
22	7-Methoxy-3,7-dimethyloctan-2-ol (isomer 1)	25.931	0-00-0	78	1160657	4.019
23	Propanoic acid, 2-methyl-, 3-hydroxy-2,2,4-trimethylpentyl ester	26.671	77-68-9	88	1421776	4.923
24	Propanoic acid, 2-methyl-, 3-hydroxy-2,2,4-trimethylpentyl ester	26.986	77-68-9	97	1934630	6.699
25	Tetradecane	27.339	629-59-4	97	979134	3.391
26	1,4-Methanophthalazine,	27.985	109746-14-7	68	764136	2.646

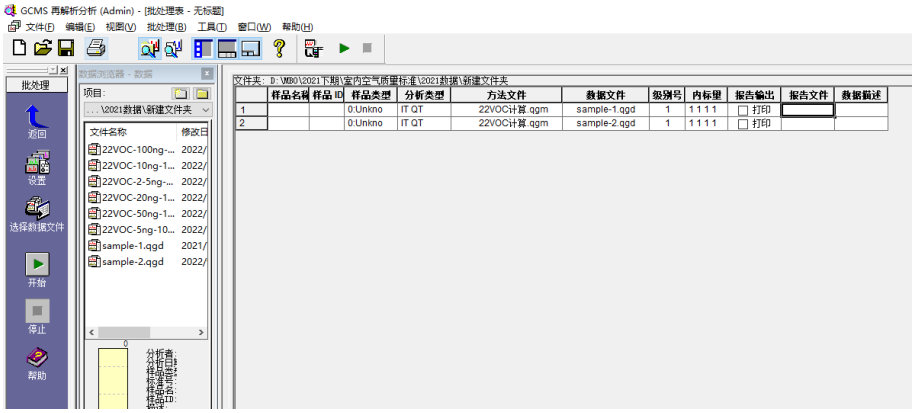
点击导出，导出 Excel、PDF、Word 格式的报告。



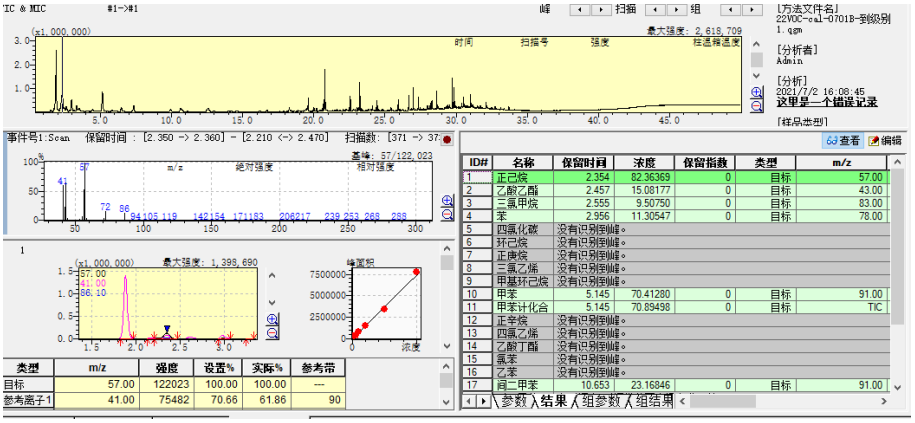
2.3 批处理 TVOC 计算

1、目标化合物定量计算

打开数据文件，点击辅助栏批处理进入批处理界面。新建一个批处理文件，将数据浏览器内待计算的样品数据文件全部拖到批处理表中。将批处理表中方法文件修改为 2.2 保存的方法文件。点击辅助栏内的开始，对各样品数据文件进行定量计算。

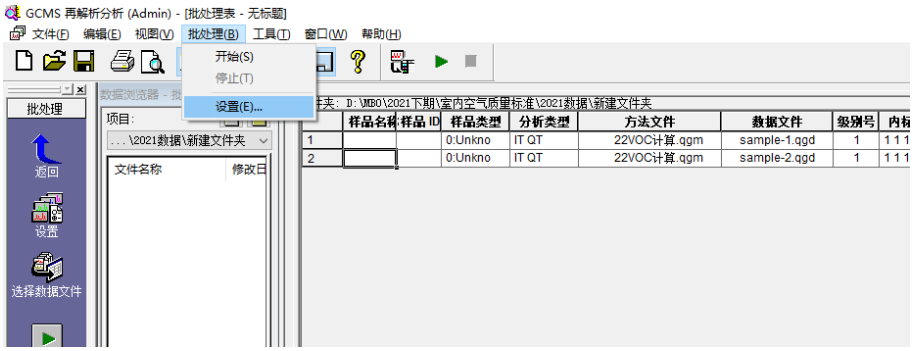


打开各个样品数据文件，对目标化合物的定量结果进行逐个确认，对识别错误的峰进行纠正。

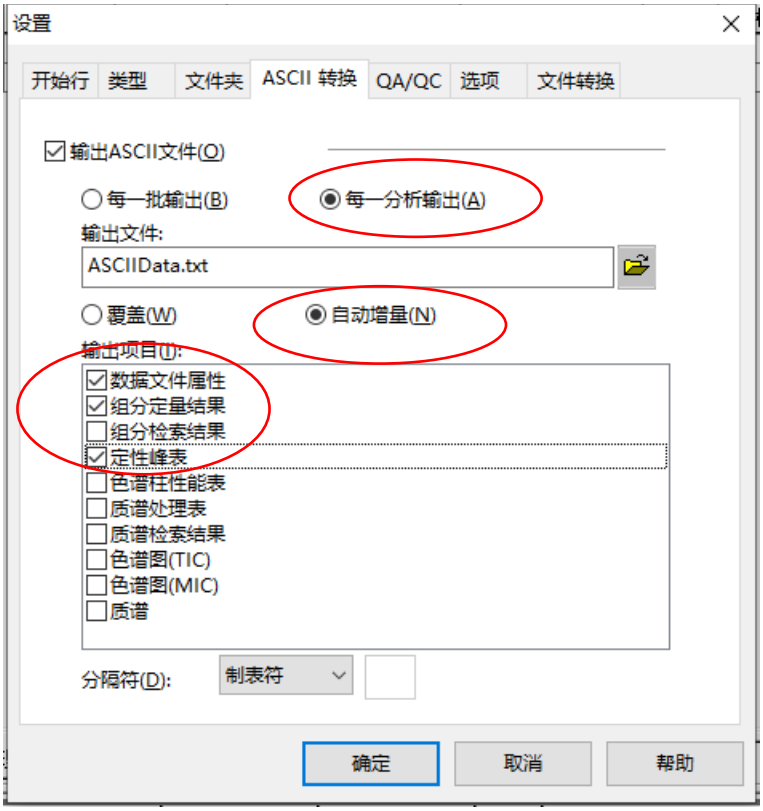


2、TVOC 计算

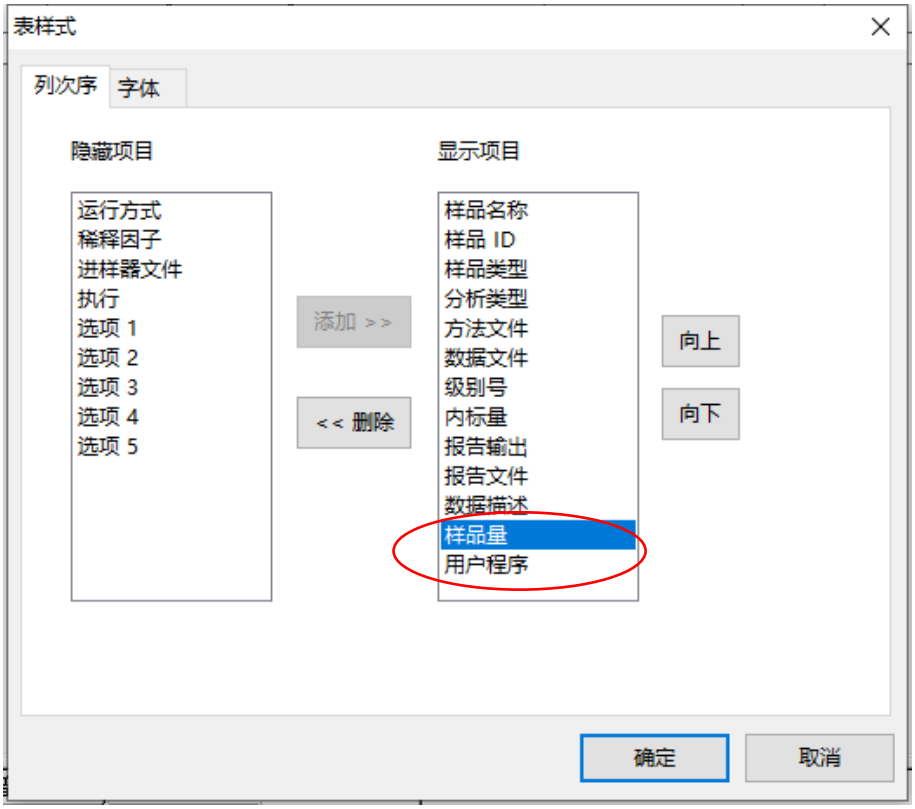
再次打开批处理文件，点击上方批处理，在下拉菜单点击设置。



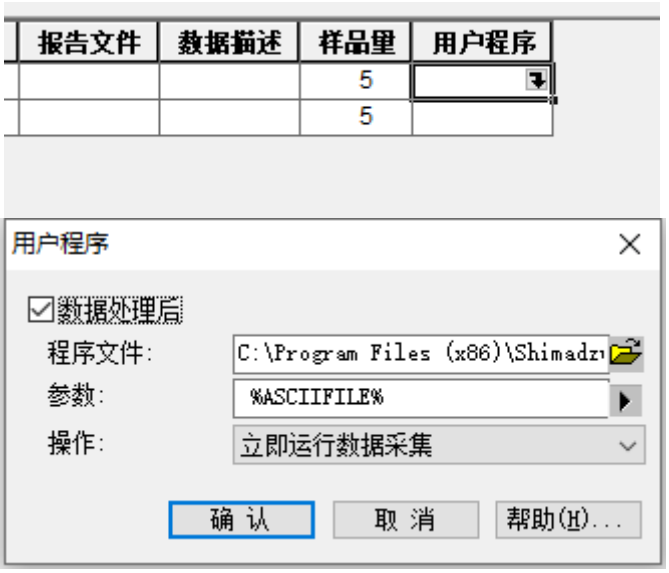
在批处理设置窗口，点击 ASCII 转换标签，按照下图进行设置，然后点击确定。



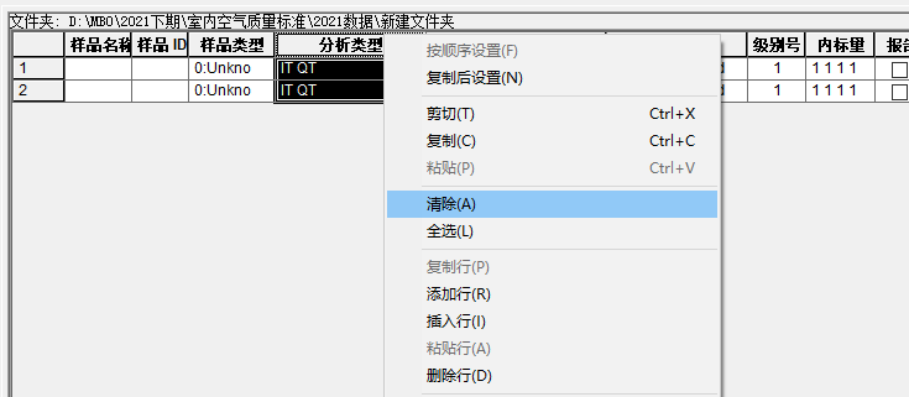
右击批处理，选择表样式进入表样式界面，将隐藏项目中的样品量与用户程序添加到显示项目，然后点击确定。



在样品量栏填入各样品体积（设置数值与 2.2 一致），点击批处理第一行用户程序里的图标进入设置界面，勾选数据处理，程序文件选择 GCMS TVOC 计算软件的安装文件夹内的运行程序（默认路径为 C:\Program Files (x86) Shimadzu GCMS TVOC Calculation 内的 Shimadzu.GCMS_TVOC_CalcApp.exe ），参数选择 ASCII 转化文件，操作选择立即运行数据采集，点击确认。



选中分析类型列，点击清除。



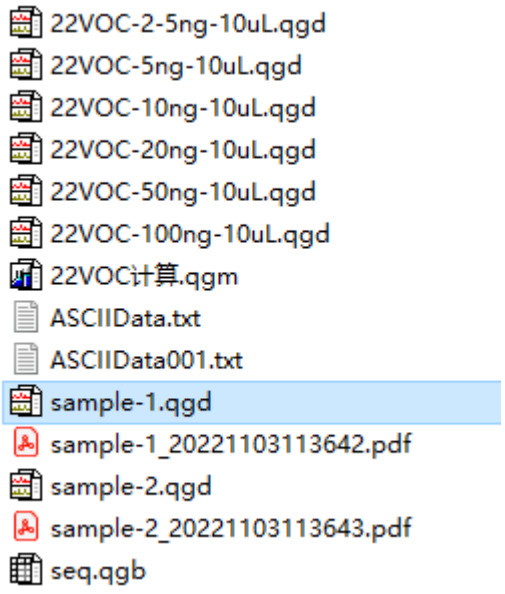
点击批处理第一行分析类型里的 进入数据分析设置界面，依次点击定量计算(QT)、定性积分:TIC(ILT)、制作质谱处理表:TIC(STT)、相似度检索(LS)，然后点击确认。



选中分析类型列，鼠标右键，点击复制后设置，选中用户程序列也做此操作。



保存批处理，点击左方工具栏内的开始，软件开始自动计算。待计算结束，每个样品数据会生成一个 txt 文件与一份 PDF 报告，打开 PDF 报告即可看到样品的 TVOC 计算结果。



2022/11/7 10:09:45

TVOC-Report

数据文件名: D:\MBO\2021下期\室内空气质量标准\2021数据\GCMS-409 raw data\数据运算\批处理计算\sample-2.qgd

Toluene的RF:	Y = 57755.3 X
Toluene化合物名称:	甲苯计化合物
Hexane保留时间:	2.366 min
Hexadecane的保留时间:	29.864 min
根据保留时间限额识别峰值:	±0.050 min
由CAS编号识别峰值:	不使用

TVOC 浓度: 162.576 ug/m3

目标化合物的定量结果

浓度总和: 60.102 ug/m3

ID#	化合物名称	保留时间 [min]	CAS #	相似度	峰面积	浓度[ug/m3]
1	正己烷	2.356	110 - 54 - 3	92	760312	19.220
2	乙酸乙酯	2.458	141 - 78 - 6	78	306319	3.337
3	三氯甲烷	2.558	67 - 66 - 3	89	109336	2.194
4	苯	2.958	71 - 43 - 2	76	425101	2.695
10	甲苯	5.146	108 - 88 - 3	98	2407352	17.510
11	甲苯计化合物	5.146	108 - 88 - 3	96	5269209	---
16	乙苯	9.932	100 - 41 - 4	98	302501	1.988
17	间二甲苯	10.659	108 - 38 - 3	98	655421	5.689
19	苯乙烯	12.541	100 - 42 - 5	90	274102	2.927
20	邻二甲苯	12.628	95 - 47 - 6	90	253740	1.952
23	正十六烷	29.858	544 - 76 - 3	96	325068	2.590

TIC峰的定量结果 (Toluene当量)

浓度总和: 102.474 ug/m3

No	化合物名称	保留时间 [min]	CAS #	相似度	峰面积	浓度[ug/m3]
6	2(3H)-Furanone, dihydro-4-methyl-	2.615	1679-49-8	87	1468395	5.085
8	Silanediol, dimethyl-	3.344	1066-42-8	84	1000327	3.464
9	Butanal, 3-methyl-	3.489	590-86-3	88	1051142	3.640
11	Hexanal	6.476	66-25-1	92	1011647	3.503
12	Cyclotrisiloxane, hexamethyl-	7.341	541-05-9	96	1479750	5.124
15	N-[1-(Benzimidoyl-amino)-2,2,2-trifluoro-1-trifluoromethyl-ethyl]-benzamide	18.275	0-00-0	87	710501	2.460
16	Cyclotetrasiloxane, octamethyl-	19.608	556-67-2	91	1509462	5.227
17	Cyclobutane, 1,2-bis(1-methylethenyl)-, trans-	20.697	19465-02-2	94	1271208	4.402
18	1-Hexanol, 2-ethyl-	20.776	104-76-7	95	4349970	15.063
19	Nonanal	22.560	124-19-6	94	1324813	4.588
20	p-Trimethylsilyloxyphenyl-(trimethylsilyloxy)trimethylsilylacrylate	23.227	0-00-0	82	2572824	8.909
21	Decanal	24.447	112-31-2	93	760196	2.632