

《光电复合电离源飞行时间质谱仪性能测试方法（征求意见稿）》团体标准编制说明

《光电复合电离源飞行时间质谱仪性能测试方法》团体标准编制组

2024年7月

目录

1 项目简况.....	3
1.1 项目来源.....	3
1.2 工作组情况.....	3
1.3 国内外情况.....	4
1.4 制修订的基本原则.....	5
2 标准的研制情况.....	5
2.1 制修订的主要工作内容.....	5
2.2 标准制修订的基本过程.....	18
2.3 解决的主要问题.....	19
3 主要试验（或验证）情况分析.....	19
4 标准中涉及的专利.....	20
5 预期达到的社会效益.....	20
6 采用国际标准和国外先进标准情况.....	21
7 与现行有关法律、法规、规章及相关标准，特别是强制性标准的协调性.....	21
8 重大分歧意见的处理经过和依据.....	21
9 标准性质的建议说明.....	21
10 贯彻标准的要求和措施建议（包括组织措施、技术措施、过渡方法、实施日期等）...	22
11 废止现行相关标准的建议.....	22
12 其他应予说明的事项.....	22

《光电复合电离源飞行时间质谱仪性能测试方法（征求意见稿）》团体标准编制说明

1 项目简况

1.1 项目来源

本标准根据中国计量测试学会公布的 2023 年第一批团体标准立项通知（量学发【2023】75 号），本项目名称为光电复合电离源飞行时间质谱仪性能测试方法。

本标准由中国测试技术研究院化学研究所牵头起草。

1.2 工作组情况

2023年3月，该项目任务下达后，中国测试技术研究院化学研究所作为项目承担单位，召集协作单位四川大学、成都艾立本科技有限公司、中国计量科学研究院、成都市环境保护科学研究院相关人员，成立了标准编制组，各起草单位的具体分工见表1，主要起草人及其承担的工作见表2。

表1 起草单位分工

序号	单位名称	主要工作
1	中国测试技术研究院化学研究所	负责完成工作组草案稿和编制说明，组织各起草单位开展验证试验及标准编写工作
2	四川大学	协助牵头单位完成工作组草案稿
3	成都艾立本科技有限公司	协助牵头单位整理征求意见稿，承担验证试验工作
4	中国计量科学研究院	协助牵头单位完成各阶段草案稿的修改
5	成都市环境保护科学研究院	协助牵头单位完成各阶段草案稿的修改

表2 标准起草人及其承担的工作情况列表

序号	姓名	职务/职称	单位	分工
1	谢琪	高级工程师	中国测试技术研究院化学研究所	负责测试方案的制定、组织协调、实施推进、数据分析与草案的统稿
2	潘义	副所长/研究员	中国测试技术研究院化学研究所	负责研究思路的把关与组织协调
3	李怀平	副院长/研究员	中国测试技术研究院化学研究所	负责研究思路的把关与组织协调
4	李晗	工程师	中国测试技术研究院化学研究所	负责配合完成起草任务
5	魏正宁	工程师	中国测试技术研究院	负责配合完成起草任务

			化学研究所	
6	潘祖帮	工程师	中国测试技术研究院 化学研究所	负责配合完成起草任务
7	王思聪	工程师	中国测试技术研究院 化学研究所	负责配合完成起草任务
8	陈劫靖	工程师	中国测试技术研究院 化学研究所	负责配合完成起草任务
9	陈宇	工程师	中国测试技术研究院 化学研究所	负责配合完成起草任务
10	段忆翔	教授	四川大学	负责配合完成起草任务
11	赵忠俊	副研究员	四川大学	负责配合完成起草任务
12	杨燕婷	总经理	成都艾立本科技有限公司	负责配合完成起草任务
13	郭星	博士	成都艾立本科技有限公司	负责配合完成起草任务
14	吴海	主任/研究员	中国计量科学研究院	负责配合完成起草任务
15	冯淼	副所长/ 高级工程师	成都市环境保护科学 研究院	负责配合完成起草任务

1.3 国内外情况

先进的质谱仪是科研工作者问鼎一流科研工作的“敲门砖”，是催发重大科技创新的重要支持。在我国，仪器研发相比欧美发达国家起步晚且发展滞后，科学研究高度依赖国外的高端仪器，严重制约了我国科技实力和社会生产实力的进一步发展。随着我国对生态环境日益关注，挥发性有机物（VOCs）成为十四五期间重点监测和减排的污染物种之一。近几年来，国家和各地方政府都将“VOCs 走航监测”作为 VOCs 污染问题排查的重要技术和监察手段。光电复合电离源飞行时间质谱仪（UVP-TOF-MS）是一种实时高性能监测分析仪器，具有灵敏度高、选择性好、可在线分析监测等显著优势，非常适用于该类监测。

UVP-TOF-MS 仪器可以满足环境 VOCs 走航监测、食品风味、爆炸物、毒品快速筛查等工作需求，在环境检测、安防、食品加工等领域可以有广泛应用。近年来，随着国家政策的大力支持和国产科学仪器厂家的发展，国产 UVP-TOF-MS 逐步发展成熟。

涉及飞行时间质谱仪器的国家标准 GB/T 37849-2019 《液相色谱飞行时间质谱联用仪性能测定方法》，其内容未包含光电复合电离源部分；长江三角洲区域地方标准 BD 31-33/T 310002-2021 第七章提到可以采用快速质谱方法进行

分析，离子源可以采用 SPI、PTR 等技术，但未涉及仪器的性能测试方法；我国国家计量技术规范 JJF 1528-2015 《飞行时间质谱仪》中，只规定了 ESI-TOF-MS 和 MALDI-TOF-MS 两种质谱仪的校准方法，不涉及光电复合电离源飞行时间质谱性能指标的测试。

1.4 制修订的基本原则

本标准按照 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。

2 标准的研制情况

2.1 制修订的主要工作内容

2.1.1 测试对象的研究

光电复合电离源飞行时间质谱仪主要包括光电复合电离源、离子传输区、飞行时间质量分析检测器等几个部分。

光电复合电离源的工作原理：在光电复合电离源中，光电子和电子束一起穿过离子源室，光电效应使得被测气态样品分子中的电子跃迁到激发态，随后与电子束发生复合反应，形成离子。

2.1.2 测试条件的优化

2.1.2.1 测试环境条件

表 3 本标准的测试环境条件

环境温度	(20~30) °C，温度波动不大于 2°C
相对湿度	20%~80%，相对湿度波动不大于 5%
供电电源	交流供电电源：电压 (220±22) V，频率 (50±1) Hz
其他	室内应清洁无尘，排风良好，无易燃、易爆、腐蚀性气体；质谱仪应平稳放置于工作台，周围无强烈机械震动和电磁干扰。

2.1.2.2 测试用标准物质及设备的选择

随着我国对生态环境日益关注，挥发性有机物（VOCs）成为十四五期间重点监测和减排的污染物种之一。近几年来，国家和各地方政府都将“VOCs 走航监测”作为 VOCs 污染问题排查的重要技术和监察手段。质子转移反应飞行时间质谱仪（PTR-TOFMS）是一种实时高性能监测分析仪器，具有灵敏度高、选择性好、可在线分析监测等显著优势，非常适用于该类监测。

2021 年 6 月正式实施的长江三角洲区域统一标准—DB31/T 310002-2021、DB32/T 310002-2021、DB33/T 310002-2021《长三角生态绿色一体化发展示范区挥发性有机物走航监测技术规范》中规定的挥发性有机物走航监测必测目标物见表 4，选测目标物见表 5。

表 4 挥发性有机物走航监测必测目标物

序号	化合物名称	摩尔质量 g/mol	CAS NO
1	苯	78	71-43-2
2	甲苯	92	108-88-3
3	苯乙烯	104	100-42-5
4	邻-/间-/对-二甲苯、乙苯	106	95-47-6、108-38-3、106-42-3、100-41-4

表 5 挥发性有机物走航监测选测目标物

序号	化合物名称	摩尔质量 g/mol	CAS NO
1	甲醇	32	67-56-1
2	乙腈	41	75-05-8
3	乙醛	44	75-07-0
4	二甲胺	45	124-40-3
5	甲硫醇	48	74-93-1
6	丙烯腈	53	107-13-1
7	丙烯醛	56	107-02-8
8	1-丁烯、顺-/反-2-丁烯、异丁烯	56	106-98-9、590-18-1、624-64-6、115-11-7
9	丙酮	58	67-64-1
10	甲硫醚	62	75-18-3
11	2-丁酮	72	78-93-3
12	二氯甲烷	85	75-09-2
13	正己烷	86	110-54-3
14	乙酸乙酯	88	141-78-6
15	乙硫醚	90	352-93-2
16	二甲基二硫醚	94	624-92-0
17	环己酮	98	108-94-1
18	1,1-/1,2-二氯乙烷	99	75-34-3、107-06-2

19	甲基丙烯酸甲酯	100	80-62-6
20	甲基异丁基酮	100	108-10-1
21	正庚烷	100	142-82-5
22	氯苯	112	108-90-7
23	正辛烷	114	111-65-9
24	乙酸丁酯	116	123-86-4
25	三氯乙烯	130	79-01-6
26	邻-/间-/对-二氯苯	147	95-50-1、541-73-1、106-46-7
27	十一烷	156	1120-21-4
28	十二烷	170	112-40-3
29	1,2,4-三氯苯	181.5	87-61-6

考虑到 UVP-TOF-MS 的应用及标准物质的可获取性，本标准各测试项目采用的标准物质见表 6。

表 6 测试项目及测试用标准物质

序号	测试项目	测试用标准物质
1	质量分辨率	100 nmol/mol 的甲苯气体标准物质
2	质量准确性	100 nmol/mol 的甲苯气体标准物质
3	质量稳定性	100 nmol/mol 的甲苯气体标准物质
4	质量范围	-
5	灵敏度	1 nmol/mol、5 nmol/mol、10 nmol/mol、20 nmol/mol、50 nmol/mol 的甲苯气体标准物质
6	检测限	1 nmol/mol、5 nmol/mol、10 nmol/mol、20 nmol/mol、50 nmol/mol 的甲苯气体标准物质、高纯氮气
7	线性范围	仪器测量范围内取至少 5 个浓度点的甲苯气体标准物质
8	重复性	100 nmol/mol 的甲苯气体标准物质

2.1.3 测试项目的选择

2.1.3.1 质量分辨率

分辨率即分辨本领，是质谱仪对不同质量离子分离和对相同质量离子聚焦两种能力的综合表征。如果两个离子峰的质量数分别为 m_1 和 m_2 ，两个离子峰的质量之差 $\Delta m = m_1 - m_2$ ，当仪器能把这两个离子峰刚好分开时，则定义仪器的分辨率为 $R = m_1 / \Delta m$ 。

所述两个离子峰刚好分开是指前一个离子峰的峰尾和后一个离子峰的起点相连，且连接点刚好落在基线上，或者说两个离子峰的中心距 Δx 等于两个离子峰的平均宽度 $W = (W_1 + W_2) / 2$ （如图 1 所示）

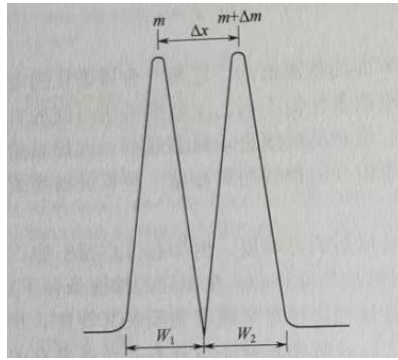


图 1 分辨率的定义

假设两离子峰的质量数 (m) 分别为 100 和 101, 当两个离子峰刚好分开时, 分辨率 $R = m_1 / \Delta m = 100 / (101 - 100) = 100$; 如果两离子峰的质量数 (m) 分别为 100.0 和 100.1, 当两个离子峰刚好分开时, 分辨率 $R = 100.0 / (100.1 - 100.0) = 1000$ 。换言之, 如果要将质量数 (m) 分别为 100.0 和 100.1 的两个离子峰分开, 仪器的分辨率 (R) 至少达到 1000。由此可见, 分辨率的物理意义是质谱仪在质量数 m 附近能够分辨的最小相对质量差。

分辨率 (R) 为 100, 表示在质量数 (m) 100 附近, 仪器能够分辨的质量差 (Δm) 为 1u; 分辨率 (R) 为 1000, 表示在质量数 (m) 100 附近, 仪器能够分辨的质量差 (Δm) 为 0.1u, 而在质量数 (m) 1000 附近, 仪器能够分辨的质量差 (Δm) 为 1u。同样是分辨 1u 的质量差 (Δm), 离子质量数 (m) 越大, 要求仪器的分辨率 (R) 越高。

在相同离子质量数 (m) 上, 分辨率 (R) 越高, 能够分辨的质量差 (Δm) 越小, 测定的质量精度越高。这说明质量测量精度既与仪器的分辨率 (R) 有关, 又与被测离子的质量 (m) 有关。

在相同的分辨率 (R) 下, 测量低质量离子的质量精度高, 而测量高质量离子的质量精度低。如果在相同的质量精度要求下, 测量较高质量离子, 则要求更高的仪器分辨率。

在实际测量仪器分辨率时, 找到两个刚好分开的离子峰往往比较困难, 因此, 可以任意选择两个分开的离子峰, 或选择有部分重叠的离子峰。则分辨率 R 可表示为:

$$R = \frac{m}{\Delta m} \times \frac{a}{b}$$

式中， a 为两离子峰的中心距； b 为平均峰宽（当两离子峰相隔不远时，可近似为其中任一离子峰的峰宽）。

现在国际上规定使用 10%峰谷作为测量分辨率的标准。10%峰谷是指相邻的两个相等峰高的峰谷高度为峰高的 10%，如图 2 所示，即两离子峰分别以 5%峰高重叠。此时，峰宽 b 的测量点确定为 5%峰高处。

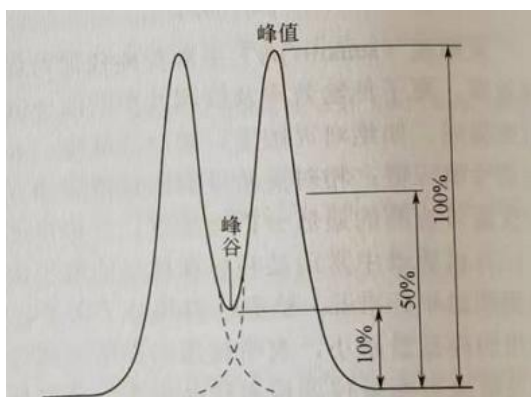


图 2 分辨率的测量

在 GB/T32267-2015《分析仪器性能测定术语》、GB/T33864-2017《质谱仪通用规范》、GB/T6041-2020《质谱分析方法通则》、GB/T37849-2019《液相色谱飞行时间质谱联用仪性能测试方法》中，都对分辨率/质量分辨率进行了定义，详见表 7；在 T/CIMA0019-2019《质子转移反应质谱仪》、GB/T33864-2017《质谱仪通用规范》、GB/T37849-2019《液相色谱飞行时间质谱联用仪性能测试方法》中，分辨率/质量分辨率的测试及计算方法均采用单峰法，详见表 8。

表 7 分辨率/质量分辨率定义

标准名称	GB/T32267-2015 分析仪器性能测定术语	GB/T33864-2017 质谱仪通用规范	GB/T6041-2020 质谱分析方法通则	GB/T37849-2019 液相色谱飞行时间质谱 联用仪性能测试方法
章节	4.15 质量分辨率	3.4 质量分辨率	2.6 分辨率	3.1 分辨率
内容	质谱仪分辨两个相邻质谱峰的质量差的能力。 $R=M/\Delta M$ （两种计算方法：1. 双峰法： M 是两个相邻峰的平均质量， ΔM 是相邻峰的质量差，相邻两个峰的峰谷为 10%；2. 单峰法： M 是最大峰值处的质量， ΔM 是最大峰值半峰高处的峰宽 [FWHM]）	质谱仪分辨两个相邻质谱峰的能力（两种计算方法：1. 双峰法：选取两个相邻峰进行计算；2. 单峰法：使用单一峰进行计算）	在给定的样品条件下，仪器对相邻的两个质谱峰的区分能力。相邻等高的两个质谱峰，其峰谷不大于峰高的 10% 时，就定义为可以区分。两个峰的分辨能力 R 的表示法是当峰谷为峰高的 10% 时，两峰所表示的质量的平均值与质量差的比值。当描述所用的质谱峰的质荷比时，列出对应的分辨能力数据是适宜的，因为不同的仪器，其分辨本领随质荷比的不同而有变化。	仪器对相邻两个质谱峰的区分能力（两种计算方法：1. 双峰法：选取两个相邻峰进行计算；2. 单峰法：使用单一峰进行计算）

表 8 质量分辨率测试及计算方法

标准名称	T/CIMA0019-2019 质子转移反应质谱仪	GB/T33864-2017 质谱仪通用规范	GB/T37849-2019 液相色谱飞行时间质谱联用仪性能测试方法
章节	6.4.2 质量分辨率	6.3.4 质量分辨率	6.2 分辨率
内容	<p>质谱仪按操作说明运行，待稳定后，使用浓度不小于 1μmol/mol 的苯标准气体进行测试，获得并记录质谱图。测量 C₆H₇⁺ 质谱峰 50% 峰高处的峰宽 $W_{1/2}$，按式 (1) 计算质量分辨率 R。</p> $R = M / W_{1/2} \dots \dots \dots (1)$ <p>式中： R—质谱仪的质量分辨率，单峰法计算，无量纲； M—C₆H₇⁺ 质谱峰对应的质荷比； $W_{1/2}$—C₆H₇⁺ 质谱峰 50% 峰高处的峰宽。</p>	<p>质谱仪按操作说明运行，待稳定后，使用相关标准或制造商确定的标准物质进行测试，获得并记录质谱图。可选用单峰法或双峰法之一进行计算，应标注使用的计算方法及质谱峰质荷比 M：</p> <p>a) 单峰法 在质谱图的全质量范围内高、中、低端各选取 1 个质荷比的质谱峰，测量质荷比 M 对应的质谱峰 50% 峰高处的峰宽 $W_{1/2}$，按式 (1) 分别计算不同质谱峰对应的分辨率 R_s，取其中最大值作为质量分辨率。</p> $R_s = M / W_{1/2} \dots \dots \dots (1)$ <p>式中： R_s—质量分辨率，单峰法计算，无量纲； M—质谱峰对应的质荷比； $W_{1/2}$—质谱峰 50% 峰高处的峰宽。</p> <p>b) 双峰法 在质谱图的全质量范围内高、中、低端各选取 1 个质荷比的质谱峰，以及其相邻的质谱峰，相邻两个峰的峰谷为 10%。按式 (2) 分别计算不同质谱峰对应的分辨率 R，取其中最大值作为质量分辨率。</p> $R_d = \overline{M} / \Delta M \dots \dots \dots (2)$ <p>式中： R_d—质量分辨率，双峰法计算，无量纲； \overline{M}—两相邻质谱峰的质荷比平均值； ΔM—两相邻质谱峰的质荷比之差。</p>	<p>通过流动注入方式以 10μL/min 流速注入一定浓度利血平标准物质，采集一级质谱和二级质谱图，采用单峰法计算分辨率。一级质谱以质荷比 609.2807 处峰根据式 (1) 计算，二级质谱以质荷比 195.0652 或 397.2122 处峰根据式 (1) 进行计算。</p> $R = M / \Delta M \dots \dots \dots (1)$ <p>式中： R—分辨率； M—离子峰的质荷比； ΔM—离子峰的半宽度。</p>

本标准中质量分辨率的测试方法为：

质谱仪按操作说明运行，待稳定后，使用浓度为 100 nmol/mol 的甲苯气体标准物质进行测试，积分时间 60 s，获得并记录质谱图，按式 (1) 计算质量分辨率 R 。

$$R = \frac{M}{W_{1/2}} \quad (1)$$

式中：

R ——质谱仪的质量分辨率，单峰法计算，无量纲；

M —— C_7H_8 质谱峰对应的质荷比，单位为原子质量单位（ u ）；

$W_{1/2}$ —— C_7H_8 质谱峰 50%峰高处的峰宽，单位为原子质量单位（ u ）。

2.1.3.2 质量准确性

在 GB/T32267-2015《分析仪器性能测定术语》、GB/T33864-2017《质谱仪通用规范》、GB/T6041-2020《质谱分析方法通则》、GB/T37849-2019《液相色谱飞行时间质谱联用仪性能测试方法》中，都对质量准确性进行了定义，详见表 9；在 T/CIMA0019-2019《质子转移反应质谱仪》、GB/T33864-2017《质谱仪通用规范》、GB/T37849-2019《液相色谱飞行时间质谱联用仪性能测试方法》中质量准确性的测试及计算方法列于表 10。

表 9 质量准确性定义

标准名称	GB/T32267-2015 分析仪器性能测定术语	GB/T33864-2017 质谱仪通用规范	GB/T6041-2020 质谱分析方法通则	GB/T37849-2019 液相色谱飞行时间质谱 联用仪性能测试方法
章节	4.5 质量准确性	3.2 质量准确性	2.7 质量准确性	3.6 质量准确性
内容	质量测定准确性。质谱仪对离子质量的测量值与理论值之间的偏差。	质谱仪测量得到某离子的质量与理论值的偏差。	某种离子的测量质荷比与实际（理论）质荷比的偏离程度。	离子质荷比测量值与理论值之间的偏差。

表 10 质量准确性测试及计算方法

标准名称	T/CIMA0019-2019 质子转移反应质谱仪	GB/T33864-2017 质谱仪通用规范	GB/T37849-2019 液相色谱飞行时间质谱联用仪性能测试方法
章节	6.4.3 质量准确性	6.3.2 质量准确性	6.7 质量准确性
内容	<p>质谱仪按操作说明运行，待稳定后，使用浓度为 $1\mu\text{mol/mol}$ 的苯标准气体进行测试，获得并记录质谱图。同样操作重复测试 3 次。记录 $C_6H_7^+$ 质谱峰-峰位的实际测量值，PTR-TOFMS 保留正负符号及小数点后 3 位，PTR-QMS 保留正负符号及小数点后 2 位，计算 3 次测量平均值，按式（1）计算质谱仪的质量准确性 D_A。</p> $D_A = \bar{M} - M_0 \dots\dots\dots (1)$ <p>式中： D_A—质量准确性，单位为原子质量单位（u）； \bar{M}—三次测量的 $C_6H_7^+$ 质谱峰的质荷比平均值，单位为原子质量单位（u）； M_0—$C_6H_7^+$ 的理论质荷比。</p>	<p>质谱仪按操作说明运行，待稳定后，使用相关标准或制造商确定的标准物质进行测试，获得并记录质谱图。同样操作重复测试 3 次。</p> <p>在质谱图的全质量范围内高、中、低端各选取 1 个质荷比的质谱峰，分别计算各自位置实测数值的 3 次测量平均值，按式（1）计算。选取计算结果绝对值最大的数值，保留正负符号及 2 位有效数字作为质量准确性。</p> $D_{Ai} = \bar{M}_i - M_{0i} \dots\dots\dots (1)$ <p>式中： D_{Ai}—第 i 个质谱峰的质量准确性，单位为原子质量单位（u）； \bar{M}_i—第 i 个质谱峰 3 次测量的平均值，单位为原子质量单位（u）； M_{0i}—第 i 个质谱峰的理论值，理论值采用物质组成元素计算数值，</p>	<p>仪器稳定后，按照附录 A 色谱条件，注入适当浓度（例如 $1\text{pmol}/\mu\text{L}$）的利血平溶液，扫描获得一级质谱或二级高分辨质谱图，记录一级质谱（m/z 609.2807）或二级质谱（m/z 195.0652 和 m/z 397.2122）离子测量值，进行 3 次以上，计算离子实际测量值与理论值的差，选取其中绝对值最大的一个，保留正负符号，作为质量准确性。</p>

单位为原子质量单位（u）。

本标准中质量准确性的测试方法为：

质谱仪按操作说明运行，待稳定后，使用浓度为 100 nmol/mol 的甲苯气体标准物质进行测试，积分时间 60 s，获得并记录质谱图。重复测试 3 次，按式（2）计算质谱仪的质量准确性 D_A 。

$$D_A = \overline{M} - M_0 \quad (2)$$

式中：

D_A ——质量准确性，单位为原子质量单位（u）；

\overline{M} ——三次测量 C_7H_8 质谱峰的质荷比平均值，单位为原子质量单位（u）；

M_0 —— C_7H_8 的理论质荷比，单位为原子质量单位（u）。

2.1.3.3 质量稳定性

质量稳定性是指质谱仪在工作时质量稳定的情况，通常用一定时间内质量漂移的质量单位来表示。

在 GB/T32267-2015《分析仪器性能测定术语》、GB/T37849-2019《液相色谱飞行时间质谱联用仪性能测试方法》中，都对质量稳定性进行了定义，详见表 11；在 T/CIMA0019-2019《质子转移反应质谱仪》、GB/T33864-2017《质谱仪通用规范》、GB/T37849-2019《液相色谱飞行时间质谱联用仪性能测试方法》中质量稳定性的测试及计算方法列于表 12。

表 11 质量稳定性定义

标准名称	GB/T32267-2015 分析仪器性能测定术语	GB/T37849-2019 液相色谱飞行时间质谱联用仪性能测试方法
章节	4.8 质量稳定性	3.5 质量稳定性
内容	质量标尺稳定性。质谱仪以标准物标定的质量标尺，在一段时间内，对指定离子质量测量值的变化。 注：常用原子质量单位每小时（amu）表示。	一段时间内，质谱仪对离子质荷比测量值的变化。

表 12 质量稳定性测试及计算方法

标准名称	T/CIMA0019-2019 质子转移反应质谱仪	GB/T33864-2017 质谱仪通用规范	GB/T37849-2019 液相色谱飞行时间质谱联用仪性能测试方法
章节	6.4.4 质量稳定性	6.3.3 质量稳定性	6.6 质量稳定性
内容	质谱仪按操作说明运行，待稳定后，使用浓度为 1 μmol/mol 的苯标准气体进行测试，获得并记录质谱图。每小时至少测量 1 次，进行 8 次以上的多次测试，测试时间间隔均匀分布，测试过程中不允许进行调谐或质量校准。选取 $C_6H_7^+$ 质谱峰，每次按式（1）分别计算偏差，取多次	质谱仪按操作说明运行，待稳定后，使用相关标准或制造商确定的标准物质进行测试，获得并记录质谱图。每小时至少测量 1 次，进行 8 次以上的多次测试，测试时间间隔均匀分布，测试过程中不允许进行调谐。选取同质量准确性测试中同样的质荷比的质谱峰，每次按式（1）分别	按照附录 A 色谱条件，注入适当浓度的利血平溶液，每 2h 进行一次样，重复不低于 6 次。记录一级质谱（m/z 609.2807）离子质荷比测量值，计算离子质荷比实际测量值的极差，作为稳定性测试结果。

<p>测试中计算结果绝对值最大的数值作为质谱仪的质量稳定性，保留正负符号及小数点后 2 位，并标注测试时间。</p> $D_{si} = M_i - M_{0i} \dots\dots\dots (1)$ <p>式中： D_{si}—第 i 次测量的质量偏差，单位为原子质量单位 (u)； M_i—第 i 次测量的 $C_6H_7^+$ 质谱峰的质荷比，单位为原子质量单位 (u)； M_{0i}—$C_6H_7^+$ 的理论质荷比。</p>	<p>计算偏差，取多次测试中计算结果绝对值最大的数值，保留正负符号及 2 位有效数字作为质量稳定性。</p> $D_{si} = M_i - M_{0i} \dots\dots\dots (1)$ <p>式中： D_{si}—本次第 i 个质谱峰实测后的质量偏差，单位为原子质量单位 (u)； M_i—本次第 i 个质谱峰的实测质荷比，单位为原子质量单位 (u)； M_{0i}—本次第 i 个质谱峰的理论值，理论值采用物质组成元素计算数值，单位为原子质量单位 (u)。</p>	
-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	--

本标准中质量稳定性的测试方法为：

质谱仪按操作说明运行，待稳定后，使用浓度为 100 nmol/mol 的甲苯气体标准物质进行测试，积分时间 60 s，获得并记录质谱图。每小时测试 1 次，进行不低于 8 次的多次测试，测试时间间隔均匀分布，测试过程中不允许进行调谐或质量校准。选取 C_7H_8 质谱峰，每次按式 (3) 分别计算偏差，取多次测试中计算结果绝对值最大的数值作为质谱仪的质量稳定性。

$$D_{si} = M_i - M_0 \tag{3}$$

式中：

D_{si} ——第 i 次测量的质量偏差，单位为原子质量单位 (u)；

M_i ——第 i 次测量 C_7H_8 质谱峰的质荷比，单位为原子质量单位 (u)；

M_0 —— C_7H_8 的理论质荷比，单位为原子质量单位 (u)。

2.1.3.4 质量范围

质量范围是指一台质谱仪能够测量的离子质量下限与上限之间的一个范围，是质谱仪一个非常重要的参数，它决定了可测量样品的分子量。

在 GB/T32267-2015《分析仪器性能测定术语》、GB/T33864-2017《质谱仪通用规范》、GB/T6041-2020《质谱分析方法通则》、GB/T37849-2019《液相色谱飞行时间质谱联用仪性能测试方法》中，都对质量范围进行了定义，详见表 13；在 T/CIMA0019-2019《质子转移反应质谱仪》、GB/T33864-2017《质谱仪通用规范》、GB/T37849-2019《液相色谱飞行时间质谱联用仪性能测试方法》中质量范围的测试方法列于表 14。

表 13 质量范围定义

标准	GB/T32267-2015	GB/T33864-2017	GB/T6041-2020	GB/T37849-2019
----	----------------	----------------	---------------	----------------

名称	分析仪器性能测定术语	质谱仪通用规范	质谱分析方法通则	液相色谱飞行时间质谱联用仪性能测试方法
章节	4.7 质量范围	3.3 质量范围	2.4 质量范围	3.3 质量范围
内容	质谱仪所能测量的质荷比下限和质荷比上限之间的范围。	质谱仪能够测定的最低到最高质荷比的范围，表示为“最低质荷比~最高质荷比”。	质谱仪能测量的质荷比下限与上限之间的一个范围。	在正常状态下可测定的离子的质荷比范围。

表 14 质量范围测试方法

标准名称	T/CIMA0019-2019 质子转移反应质谱仪	GB/T33864-2017 质谱仪通用规范	GB/T37849-2019 液相色谱飞行时间质谱联用仪性能测试方法
章节	6.4.1 质量范围(19u~260u)	6.3.1 质量范围	6.4 质量范围
内容	质谱仪按操作说明运行，使用 H ₂ O 作为反应试剂。待质谱仪稳定后，使用浓度不小于 1 μ mol/mol 的六氯-1,3-丁二烯标准气体对质谱仪进行测试，获得并记录质谱图。在质谱图中可观察到 H ₃ O ⁺ 的峰和 C ₄ Cl ₆ H ⁺ 质量数大于 260u 的同位素峰。	质谱仪按操作说明运行，待稳定后，使用相关标准或制造商确定的标准物质进行测试，获得并记录质谱图。在质谱图中可检测到的质荷比的最大值和最小值区间为质量范围。最大值允许外延 10%以内取整。 注：最大值和最小值可分别测试获得。	将质量数设在仪器可测范围（m/z 50~1250），进行全质量范围扫描，观察是否出现特定质谱峰，离子出峰的质荷比最小值和最大值之间，为质量范围。 示例：例如用聚丙二醇校准仪器需要观察如下特征峰是否出现：m/z59.0491，m/z175.1329，m/z233.1747，m/z326.2537，m/z442.3374，m/z500.3793，m/z616.4630，m/z674.5048，m/z906.6729，m/z1196.8816。可根据不同实际情况选择不同样品。

本标准中质量范围的测试方法为：

质谱仪按操作说明运行，待稳定后，使用相关标准物质/试剂进行测试，获得并记录质谱图。在质谱图中可检测到的质荷比的最大值和最小值区间为质量范围。最大值允许外延 10%以内取整，最大值和最小值可分别测试获得。

示例：质谱仪（质量范围：28 u~700 u）按操作说明运行，待稳定后，使用空气为样品进行测试，在质谱图中可观察到质荷比为 28 的质谱峰；使用浓度约为 50 nmol/mol 的全氟三正丁胺为样品进行测试，在质谱图中可观察到质荷比为 671 的质谱峰。

2.1.3.5 检出限/检测限

在 GB/T32267-2015《分析仪器性能测定术语》、GB/T33864-2017《质谱仪通用规范》中，都对检出限/检测限进行了定义，详见表 15；在 T/CIMA0019-2019《质子转移反应质谱仪》、GB/T33864-2017《质谱仪通用规范》中检测限的测试及计算方法列于表 16。

表 15 检出限/检测限定义

标准名称	GB/T32267-2015 分析仪器性能测定术语	GB/T33864-2017 质谱仪通用规范
章节	2.1 检出限	3.5 检测限

内容	<p>在一定的置信度下由特定的分析方法能够检出的可分辨的最小分析信号 x_L 求得的最低浓度 c_L 或质量 q_L。</p> $c_L (\text{或者 } q_L) = (\bar{x}_L - \bar{x}_b) / m = \frac{k \times s_b}{m}$ <p>式中： \bar{x}_L —最小分析信号平均值； \bar{x}_b —空白信号平均值； m—标准曲线在低浓度范围内的斜率； k—与置信度有关的因子； s_b —空白信号值的标准偏差。</p> <p>注：国际理论和应用化学联合会（IUPAC）规定，\bar{x}_b 和 s_b 通过实验以足够多的测量次数 $n \geq 10$ 求出。推荐 $k=3$，在测定值遵从正态分布的条件下，置信度为 99.73%，3 倍空白信号值的标准偏差所对应的浓度（或质量）即为检出限。</p>	在信噪比不低于 3 时，可测定样品的最小量值。
----	------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	-------------------------

表 16 检出限/检测限测试及计算方法

标准名称 章节	T/CIMA0019-2019 质子转移反应质谱仪 6.4.6 检测限	GB/T33864-2017 质谱仪通用规范 6.3.5 检测限
内容	<p>使用苯标准气体，取 1nmol/mol、2nmol/mol、5nmol/mol、10nmol/mol、20nmol/mol 共 5 个浓度点分别进样，测量并记录 $C_6H_7^+$ 质谱峰的峰高或者峰面积，并以此计算拟合标准曲线的斜率。在同样的质谱条件下，使用高纯氮气连续进样 11 次，测量并记录 $C_6H_7^+$ 质谱峰的峰高或者峰面积作为空白，并以此计算空白标准偏差。按公式（1）计算检测限。</p> $D_L = \frac{3s_B}{C} \dots\dots\dots (1)$ <p>式中： D_L —检测限； s_B —连续 11 次测量的空白标准偏差； C—拟合标准曲线的斜率。</p>	质谱仪按操作说明运行，待稳定后，使用相关标准或制造商确定的标准物质进行测试，调整进样量使得信噪比不低于 3: 1，该最小量值为检测限。

本标准中检测限的测试方法为：

质谱仪按操作说明运行，待稳定后，分别对浓度为 1 nmol/mol、5 nmol/mol、10 nmol/mol、20 nmol/mol、50 nmol/mol 的甲苯气体标准物质进行测试，积分时间 60 s，每个浓度点分别进行 3 次 C_7H_8 质谱峰信号强度重复测试，取三次测试的平均值后，按线性回归法求出工作曲线的斜率（ b ），即为仪器测定甲苯的灵敏度（ S ）。对高纯氮气进行 11 次重复测试，积分时间 60 s，记录 C_7H_8 质谱峰信号强度，按式（4）计算单次测量的标准偏差，按式（5）计算仪器测定甲苯的检测限。

$$s = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{11} (I_i - \bar{I})^2}{11-1}} \quad (4)$$

$$D_L = \frac{3s}{b} \quad (5)$$

式中：

s ——单次测量的标准偏差；

I_i ——第 i 次测量 C_7H_8 质谱峰的信号强度；

\bar{I} ——11 次测量 C_7H_8 质谱峰信号强度的算术平均值；

D_L ——检测限，单位为 $nmol/mol$ ；

b ——工作曲线的斜率。

2.1.3.6 线性范围

在 GB/T13966-2013《分析仪器术语》、GB/T37849-2019《液相色谱飞行时间质谱联用仪性能测试方法》中，都对线性范围进行了定义，详见表 17；在 T/CIMA0019-2019《质子转移反应质谱仪》、GB/T37849-2019《液相色谱飞行时间质谱联用仪性能测试方法》中线性范围的测试及计算方法列于表 18。

表 17 线性范围定义

标准名称	GB/T13966-2013 分析仪器术语	GB/T37849-2019 液相色谱飞行时间质谱联用仪性能测试方法
章节	2.90 线性范围	3.4 线性范围
内容	仪器的输出与输入保持线性的输入量的范围。也可以用该范围的最大值与最小值之比来表示。	响应值与待测物浓度呈线性关系的浓度范围

表 18 线性范围测试及计算方法

标准名称	T/CIMA0019-2019 质子转移反应质谱仪	GB/T37849-2019 液相色谱飞行时间质谱联用仪性能测试方法
章节	6.4.5 线性范围	6.5 线性范围
内容	使用苯标准气体，在测量范围内取至少 5 个浓度点分别进样，测量并记录 $C_6H_7^+$ 质谱峰的峰高或者峰面积，计算线性相关系数 r 。 r 不小于 0.98 时，最大浓度与最小浓度的比值即为线性范围。	宜采用选择离子检测方式，参照附录 A 色谱条件，从低到高依次注入不同浓度的利血平溶液，一级质谱取 m/z 609.2807，二级质谱取 m/z 195.0652 的离子峰，计算测试浓度范围内，峰高或者峰面积与浓度间的线性相关系数 R^2 ，并得到 $R^2=0.9$ 、0.99、0.999 或 0.9999 的浓度范围。

本标准中线性范围的测试方法为：

质谱仪按操作说明运行，待稳定后，在仪器测量范围内取至少 5 个浓度点的甲苯气体标准物质进行测试，积分时间 60 s，每个浓度点分别进行 3 次 C_7H_8 质谱峰信号强度重复测试，按式 (6) 计算线性相关系数 r 。当 r 不小于 0.99 时，最大浓度与最小浓度的比值即为线性范围。

$$r = \frac{S_{CI}}{\sqrt{S_{CC}S_{II}}} \quad (6)$$

$$S_{CC} = \sum_{i=1}^n c_i^2 - \frac{\left(\sum_{i=1}^n c_i\right)^2}{n} \quad (7)$$

$$S_{II} = \sum_{i=1}^n \bar{I}_i^2 - \frac{\left(\sum_{i=1}^n \bar{I}_i\right)^2}{n} \quad (8)$$

$$S_{CI} = \sum_{i=1}^n c_i \bar{I}_i - \frac{\sum_{i=1}^n c_i \sum_{i=1}^n \bar{I}_i}{n} \quad (9)$$

式中：

\bar{I}_i —第 i 个浓度点 3 次测量 C_7H_8 质谱峰信号强度算术平均值；

c_i —第 i 个浓度点的浓度；

n —浓度点个数。

2.1.3.7 重复性

在 GB/T13966-2013《分析仪器术语》、GB/T33864-2017《质谱仪通用规范》中，都对重复性进行了定义，详见表 19；在 T/CIMA0019-2019《质子转移反应质谱仪》、GB/T37849-2019《液相色谱飞行时间质谱联用仪性能测试方法》中**线性范围**的测试及计算方法列于表 20。

表 19 重复性定义

标准名称 章节	GB/T13966-2013 分析仪器术语 2.83 重复性	GB/T33864-2017 质谱仪通用规范 3.6 重复性
内容	用相同的方法、相同的试样，在相同的条件下测得的一系列结果之间的一致程度。通常用相对标准偏差表示。相同的条件指同一操作者、同一仪器、同一实验室和短暂的时间间隔。	在相同的测试条件下，对相同进样量的待测物进行连续或间隔多次重复测量，得到质谱图中指定峰的峰高或峰面积的一致性。

表 20 重复性测试及计算方法

标准名称 章节	T/CIMA0019-2019 质子转移反应质谱仪 6.4.7 重复性	GB/T37849-2019 液相色谱飞行时间质谱联用仪性能测试方法 6.8 定量重复性
内容	使用浓度为 $1 \mu\text{mol/mol}$ 的苯标准气体进行测试，单次进样方式，连续重复进样 7 次，记录 $C_6H_7^+$ 质谱峰	仪器稳定后，根据实际灵敏度，注入 $1.0 \mu\text{L}$ 适当浓度的利血平溶液，连续 6 次以上，提取相应特征离子，再现

<p>的峰高或者峰面积，按公式（1）计算相对标准偏差 RSD，有效数值保留到小数点后 1 位作为重复性。</p> $RSD = \frac{1}{\bar{H}} \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^7 (H_i - \bar{H})^2}{6}} \times 100\% \dots\dots\dots (1)$ <p>式中： RSD — 相对标准偏差； H_i — 第 i 次峰高或峰面积； \bar{H} — 连续 7 次峰高或峰面积的平均值。</p>	<p>质量色谱图，按质量色谱峰高（峰面积）进行面积积分，根据公式（1）计算相对标准偏差 (RSD)，得到定量重复性。</p> $RSD = \frac{1}{\bar{x}} \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n-1}} \times 100\% \dots\dots\dots (1)$ <p>式中： RSD — 相对标准偏差； x_i — 相应化合物第 i 次测量峰面积； \bar{x} — 相应化合物 n 次测量峰面积算术平均值； i — 测量序号； n — 测量次数。</p>
-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

本标准中重复性的测试方法为：

质谱仪按操作说明运行，待稳定后，使用浓度为 100 nmol/mol 的甲苯气体标准物质进行测试，积分时间 60 s，获得并记录质谱图。重复测试 7 次，按式（10）计算相对标准偏差 RSD 作为重复性。

$$RSD = \frac{1}{\bar{I}} \times \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^7 (I_i - \bar{I})^2}{7-1}} \times 100\% \quad (10)$$

式中：

I_i —— 第 i 次测量 C_7H_8 质谱峰的信号强度；

\bar{I} —— 7 次测量 C_7H_8 质谱峰信号强度的算术平均值。

2.2 标准制修订的基本过程

2.2.1 成立标准编制组

2023 年 4 月，该项目任务下达后，中国测试技术研究院化学研究所作为项目承担单位，召集协作单位四川大学、成都艾立本科技有限公司、中国计量科学研究院、成都市环境保护科学研究院相关人员，成立了标准编制组，拟定了标准制订的基本原则和技术路线。

2.2.2 调研及资料查询

2023 年 5 月，编制组查询和收集了国内外相关标准和文献资料，并召开讨论会，制定了相关测试项目及测试方法基本方案。

2.2.3 初稿的确定

2023年6月，编制组根据5月召开的讨论会会议意见形成标准初稿，并对标准初稿征求意见；2023年9月，根据反馈的意见对标准初稿修改完善。

2.2.4 试验验证

2023年10月~2024年4月，编制组开展了验证试验，根据试验结果确定标准中测试方法的可行性，在积累了充分试验数据的基础上，完成了标准征求意见稿和编制说明。

2.3 解决的主要问题

本标准围绕 UVP-TOF-MS 仪器制定一套性能测试方法。仪器性能指标主要包括质量范围、质量分辨力、质量准确性、质量稳定性、线性范围、检测限、重复性等。

该标准制定完成之后，可以对 UVP-TOF-MS 仪器的性能测试提供规范的方法，推动仪器开发应用。

3 主要试验（或验证）情况分析

为了验证本标准所规定的测试项目和测试方法的可操作性和适用性，编制组选择 3 种型号的 UVP-TOF-MS 进行验证，验证结果表明，本标准规定的测试项目和测试方法具有可操作性和适用性。

实验验证结论汇总如下，部分原始记录见附件 1。

a) 质量范围

型号	编号	质量范围
UVP2.B01	2023-08-0003	28 u~ 360 u
UVL.A01	2024-02-0004	28 u~ 280 u
UVL.A01	2024-03-0035	28 u~ 280 u

b) 质量分辨力

型号	编号	质量分辨力
UVP2.B01	2023-08-0003	2663
UVL.A01	2024-02-0004	1881
UVL.A01	2024-03-0035	2153

c) 质量准确性

型号	编号	质量准确性
UVP2.B01	2023-08-0003	-0.001u
UVL.A01	2024-02-0004	-0.049 u
UVL.A01	2024-03-0035	-0.039 u

d) 质量稳定性

型号	编号	质量稳定性
UVP2.B01	2023-08-0003	0.003 u
UVL.A01	2024-02-0004	0.074 u
UVL.A01	2024-03-0035	0.074 u

e) 线性范围

型号	编号	线性范围
UVP2.B01	2023-08-0003	1000
UVL.A01	2024-02-0004	1000
UVL.A01	2024-03-0035	1000

f) 检测限

型号	编号	检测限
UVP2.B01	2023-08-0003	20 pmol/mol
UVL.A01	2024-02-0004	25 pmol/mol
UVL.A01	2024-03-0035	68 pmol/mol

g) 重复性

型号	编号	重复性
UVP2.B01	2023-08-0003	0.34%
UVL.A01	2024-02-0004	0.97%
UVL.A01	2024-03-0035	2.51%

4 标准中涉及的专利

本标准未涉及到专利内容。

5 预期达到的社会效益

光电复合电离源飞行时间质谱仪（UVP-TOF-MS）是一种快速高灵敏分析仪器，可在数秒内对 ppt 量级的挥发性有机物（VOCs）等化合物进行定性定量分析，具有响应速度快、灵敏度高和检出限低、可实时在线监测等显著优势。

随着我国对生态环境日益关注，挥发性有机物（VOCs）成为十四五期间重点监测和减排的污染物种之一。近几年来，国家和各地方政府都将“VOCs 走航监测”作为挥发性有机物（VOCs）污染问题排查的重要技术和监察手段。光电复合电离源飞行时间质谱仪（UVP-TOF-MS）具有灵敏度高、选择性好、可在线分析监测等显著优势，非常适用于该类监测。

目前光电复合电离源飞行时间质谱仪（UVP-TOF-MS）在环境监测、临床医学、原产地判别、食品检验等领域都有着广泛应用，该标准制定完成后，能够规范对 UVP-TOF-MS 的性能测试方法，促进行业的发展，社会效益显著。

6 采用国际标准和国外先进标准情况

本标准未采用国际标准或国外先进标准。

7 与现行有关法律、法规、规章及相关标准，特别是强制性标准的协调性

本标准严格按照GB/T 1.1-2020给出的规则起草，相关测试项目及测试方法符合我国现行相关法律、法规、规章及相关标准要求，与国内现有相关标准方法不冲突。

8 重大分歧意见的处理经过和依据

本标准的相关测试项目及测试方法参考了我国现行相关标准，满足国内当前和今后一段时间内的需要，没有重大分歧意见。

9 标准性质的建议说明

本标准属性定义为推荐性标准。

10 贯彻标准的要求和措施建议（包括组织措施、技术措施、过渡方法、实施日期等）

建议在本标准正式实施时保证文本的充足供应，让相关行业的使用者及时得到文本，这是保证新标准贯彻实施的基础。并对标准的使用对象重点地进行培训和宣传。

11 废止现行相关标准的建议

无。

12 其他应予说明的事项

无。

附件 1

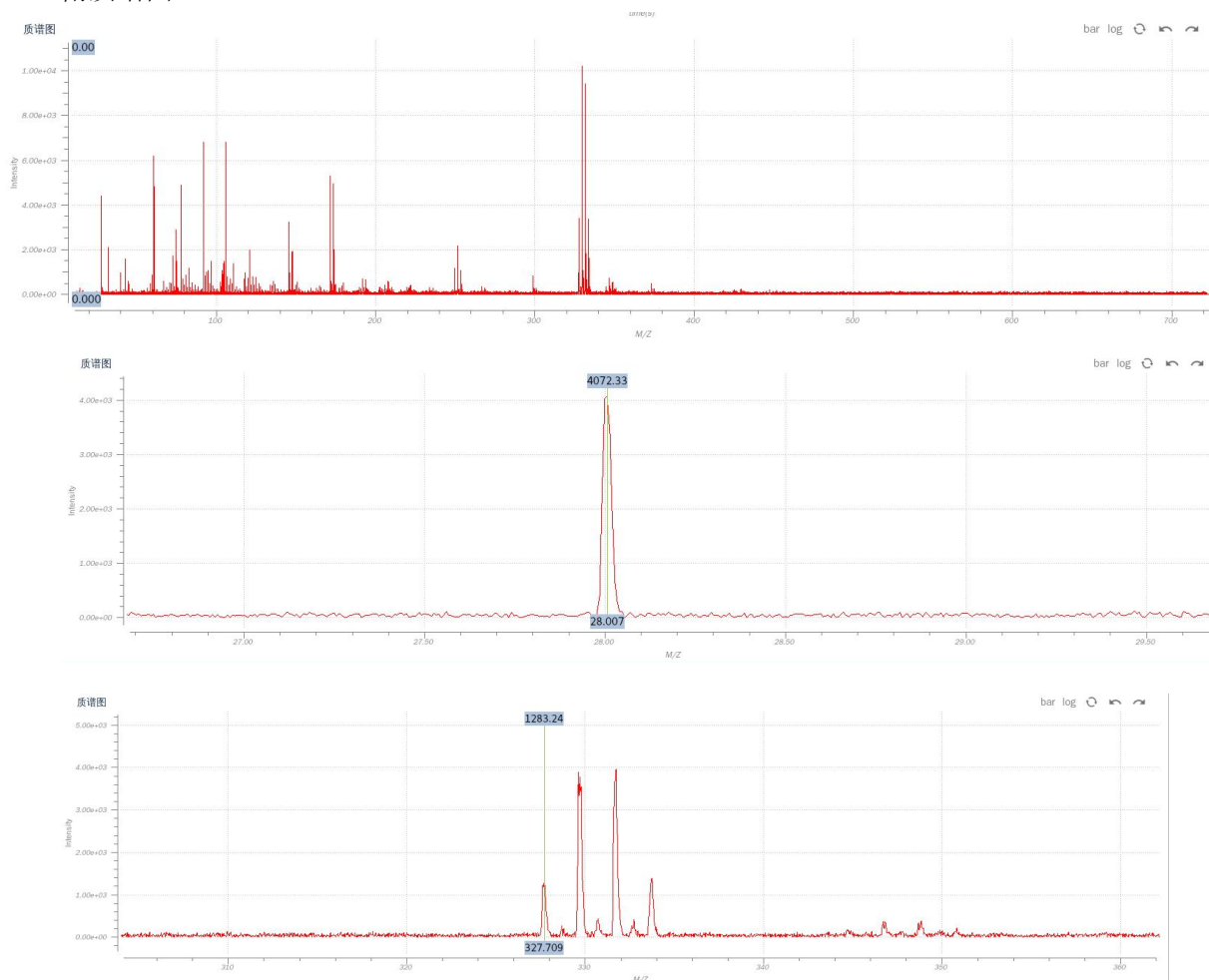
光电复合电离源飞行时间质谱仪性能测试原始记录

仪器名称	光电复合电离源飞行时间质谱仪
仪器型号	UVP2.B01
制造单位	成都艾立本科技有限公司
出厂编号	2023-08-0003
环境条件	地点： 成都艾立本科技有限公司 温度： 20 °C 相对湿度 40 %

1. 质量范围

质谱仪（质量范围：28 u~360 u）按操作说明运行，使用 N₂ 作为稀释气。待质谱仪稳定后，对 2,4,6-三溴苯酚 进行测试，获得并记录质谱图。在质谱图中可观察到 N₂ 的峰和 2,4,6-三溴苯酚 的峰。

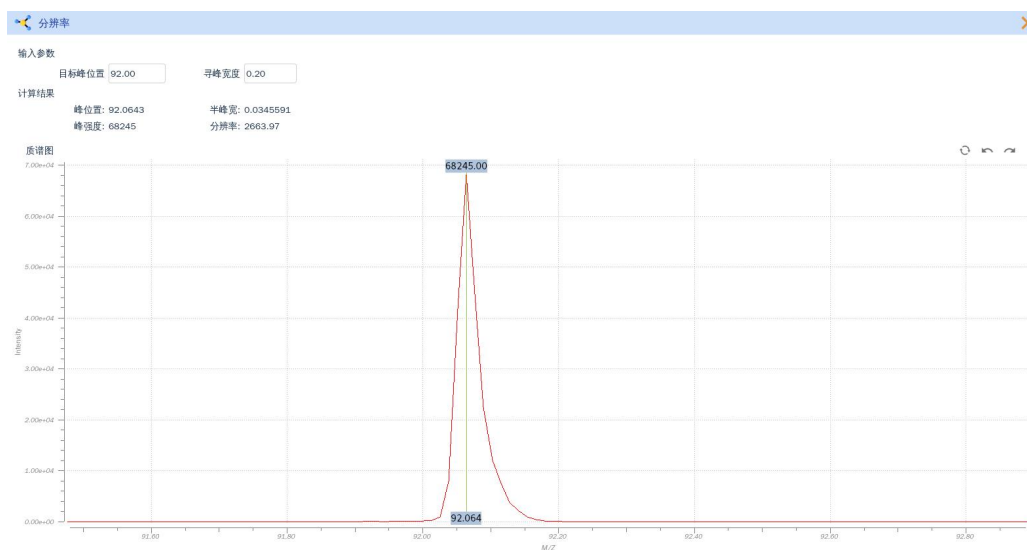
附质谱图：



2. 质量分辨率

M	$W_{1/2}$	R
92.064 u	0.035 u	2663

附质谱图：



3. 质量准确性

M_i	\bar{M}	M_0	D_A
92.064 u	92.064 u	93.063 u	-0.001 u
92.064 u			
92.064 u			

4. 质量稳定性

M_i	M_0	D_{si}
92.060 u	92.063 u	0.003 u
92.060 u	92.063 u	0.003 u
92.060 u	92.063 u	0.003 u
92.060 u	92.063 u	0.003 u
92.060 u	92.063 u	0.003 u
92.060 u	92.063 u	0.003 u
92.060 u	92.063 u	0.003 u
92.060 u	92.063 u	0.003 u

5. 检测限

甲苯气体标准物质浓度	C ₇ H ₈ 质谱峰信号强度			平均值	斜率
	55090	54582	53108		
1 nmol/mol	107886	109272	116945	111367	21868
5 nmol/mol	194312	197738	190400	194150	
10 nmol/mol	389125	394480	388241	390616	
20 nmol/mol	1088197	1114939	1123182	1108773	
50 nmol/mol					

高纯氮气 C ₇ H ₈ 质谱峰信号强度				标准偏差	检测限
1805	2037	1946	1962	143	20 pmol/mol
1737	1853	1986	1687		
2080	1784	1669	/		

6. 线性范围

甲苯气体标准物质浓度	C ₇ H ₈ 质谱峰信号强度			相关系数	线性范围
0.2 nmol/mol	47969	45267	45231	r=0.999	1000
5 nmol/mol	107886	109272	116945		
10 nmol/mol	194312	197738	190400		
50 nmol/mol	1088197	1114939	1123182		
100nmol/mol	2378578	2396814	2425333		
200nmol/mol	4749760	4731202	4688613		

7. 重复性

甲苯气体标准物质浓度	C ₇ H ₈ 质谱峰信号强度				平均值	相对标准偏差
100 nmol/mol	2464562	2450541	2473273	2462443	2459535	0.34%
	2452554	2451539	2461834	/		

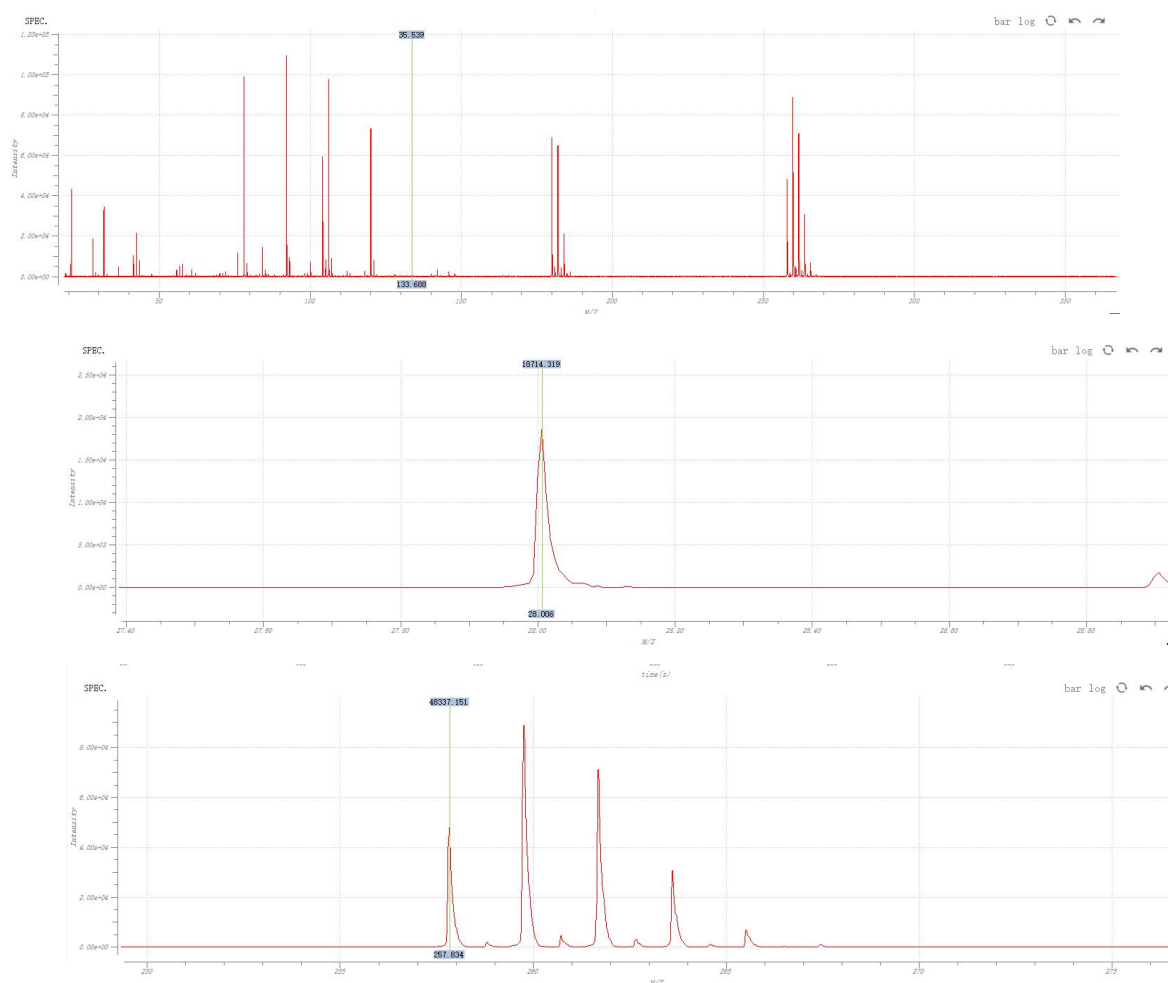
光电复合电离源飞行时间质谱仪性能测试原始记录

仪器名称	光电复合电离源飞行时间质谱仪
仪器型号	UVL.A01
制造单位	成都艾立本科技有限公司
出厂编号	2024-02-0004
环境条件	地点： 成都艾立本科技有限公司 温度： 24 °C 相对湿度 46 %

1. 质量范围

质谱仪（质量范围：28 u~ 280 u）按操作说明运行，使用 N_2 作为稀释气。待质谱仪稳定后，对 1,3-丁二烯 进行测试，获得并记录质谱图。在质谱图中可观察到 N_2 的峰和 1,3-丁二烯 的峰。

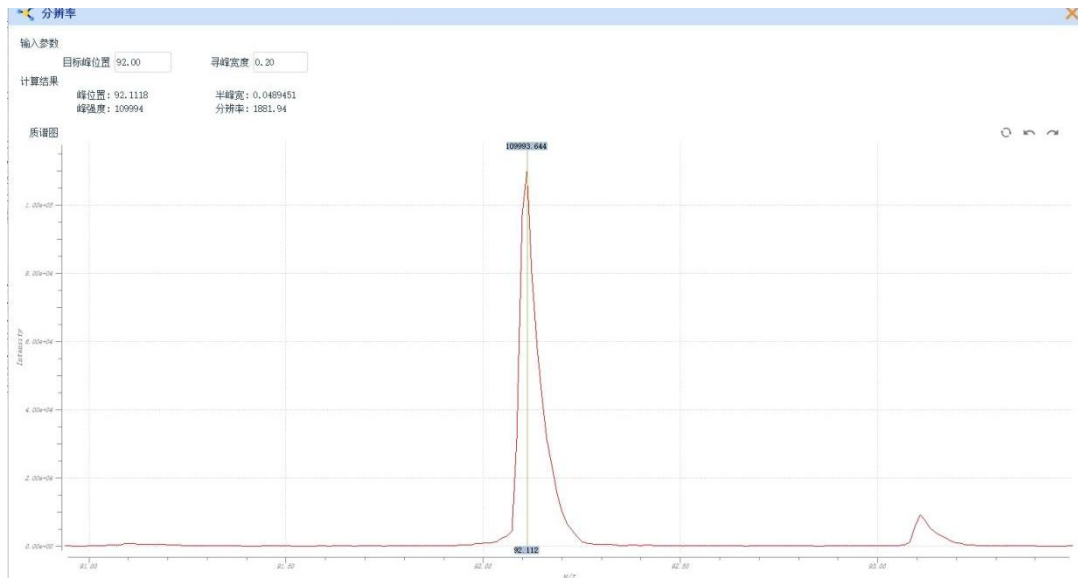
附质谱图：



2. 质量分辨率

M	$W_{1/2}$	R
92.112 u	0.049 u	1881

附质谱图：



3.质量准确性

M_i	\bar{M}	M_0	D_A
92.112 u	92.112 u	93.063 u	-0.049 u
92.112 u			
92.112 u			

4.质量稳定性

M_i	M_0	D_{si}
92.112 u	92.063 u	0.049 u
92.125 u	92.063 u	0.062 u
92.125 u	92.063 u	0.062 u
92.137 u	92.063 u	0.074 u
92.137 u	92.063 u	0.074 u
92.137 u	92.063 u	0.074 u
92.137 u	92.063 u	0.074 u
92.137 u	92.063 u	0.074 u

5.检测限

甲苯气体标准物质浓度	C_7H_8 质谱峰信号强度			平均值	斜率
	1567	1578	1526		
1 nmol/mol	1567	1578	1526	1557	2178.6
5 nmol/mol	10649	10555	10990	10731	
10 nmol/mol	19320	19347	18029	18899	
20 nmol/mol	43412	41046	40972	41810	
50 nmol/mol	108725	107260	108256	108080	

高纯氮气 C ₇ H ₈ 质谱峰信号强度				标准偏差	检测限
35	45	39	21	17.7	25 pmol/mol
22	67	71	47		
33	19	53	/		

6. 线性范围

甲苯气体标准物质浓度	C ₇ H ₈ 质谱峰信号强度			相关系数	线性范围
0.2 nmol/mol	412	456	458	r=0.999	1000
5 nmol/mol	10840	11066	11627		
10 nmol/mol	22460	22556	21768		
50 nmol/mol	111298	107372	109381		
100nmol/mol	214556	214759	217674		
200nmol/mol	397862	397670	398298		

7. 重复性

甲苯气体标准物质浓度	C ₇ H ₈ 质谱峰信号强度				平均值	相对标准偏差
100 nmol/mol	221388	215681	216636	220878	218540	0.97%
	217374	218962	218865	/		

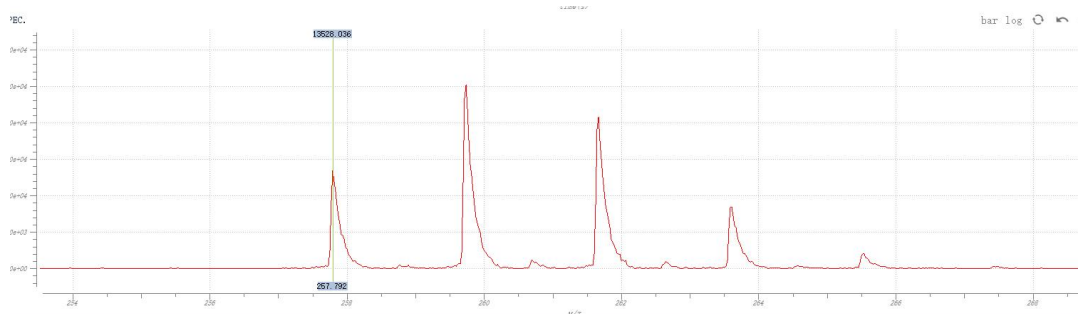
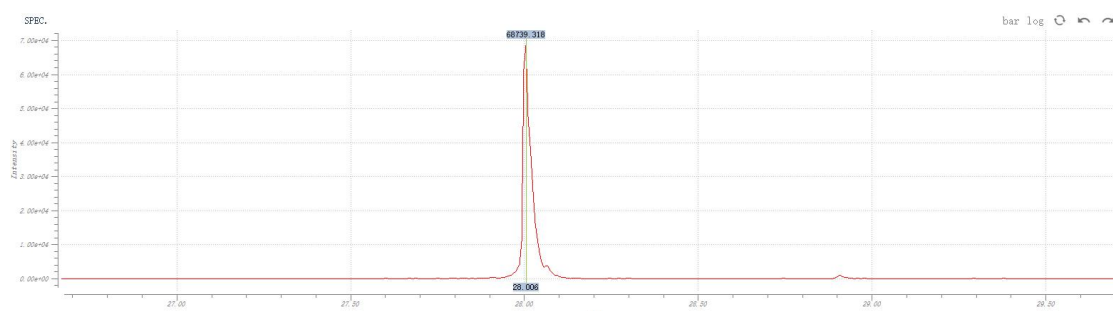
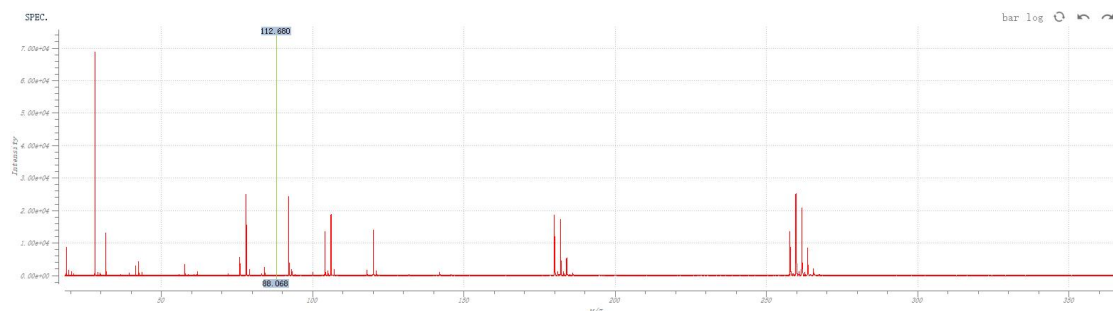
光电复合电离源飞行时间质谱仪性能测试原始记录

仪器名称	光电复合电离源飞行时间质谱仪
仪器型号	UVL.A01
制造单位	成都艾立本科技有限公司
出厂编号	2024-03-0035
环境条件	地点： 成都艾立本科技有限公司 温度： 24 °C 相对湿度 48 %

1. 质量范围

质谱仪（质量范围：28 u~280 u）按操作说明运行，使用 N_2 作为稀释气。待质谱仪稳定后，对 1,3-丁二烯 进行测试，获得并记录质谱图。在质谱图中可观察到 N_2 的峰和 1,3-丁二烯 的峰。

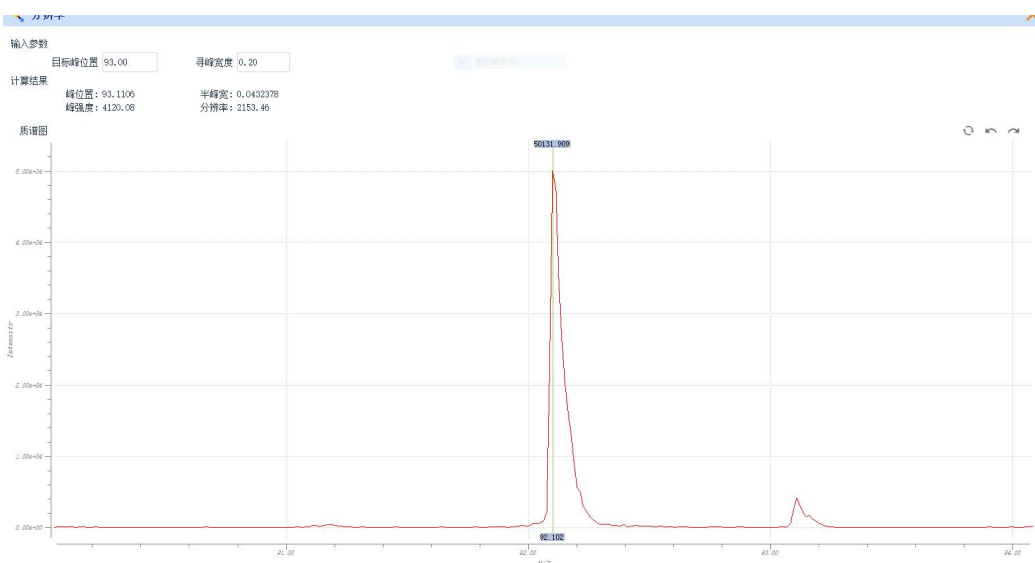
附质谱图：



2.质量分辨率

M	$W_{1/2}$	R
92.102 u	0.043 u	2153

附质谱图：



3.质量准确性

M_i	\bar{M}	M_0	D_A
92.102 u	92.102 u	93.063 u	-0.039 u
92.102 u			
92.102 u			

4.质量稳定性

M_i	M_0	D_{si}
92.115 u	92.063 u	0.052 u
92.102 u	92.063 u	0.039 u
92.102 u	92.063 u	0.039 u
92.102 u	92.063 u	0.039 u
92.102 u	92.063 u	0.039 u
92.137 u	92.063 u	0.074 u
92.137 u	92.063 u	0.074 u
92.137 u	92.063 u	0.074 u

5.检测限

甲苯气体标准物质浓度	C_7H_8 质谱峰信号强度			平均值	斜率
	672	788	797		
1 nmol/mol	672	788	797	752	510.5
5 nmol/mol	1659	1446	1651	1585	
10 nmol/mol	4495	4680	4599	4591	
20 nmol/mol	9217	9590	9912	9573	
50 nmol/mol	24523	25649	25501	25224	

高纯氮气 C ₇ H ₈ 质谱峰信号强度				标准偏差	检测限
20	43	33	21	11.6	68 pmol/mol
31	41	27	23		
27	12	53	/		

6. 线性范围

甲苯气体标准物质浓度	C ₇ H ₈ 质谱峰信号强度			相关系数	线性范围
0.2 nmol/mol	219	155	272	r=0.997	1000
5 nmol/mol	1458	1700	1596		
10 nmol/mol	4495	4680	4599		
50 nmol/mol	25109	25695	23215		
100nmol/mol	50131	53554	53630		
200nmol/mol	93125	91151	90449		

7. 重复性

甲苯气体标准物质浓度	C ₇ H ₈ 质谱峰信号强度				平均值	相对标准偏差
100 nmol/mol	51492	55373	54684	53799	54354	2.51%
	55167	55095	54871	/		

