



中华人民共和国国家标准

GB/T 45372—2025

煤基液相酚类化合物的测定 全二维气相色谱-质谱/氢火焰离子化 检测器联用

Determination of phenols in liquid products from coal chemical industry—
Comprehensive two dimensional gas chromatography-mass spectrometry/
hydrogen flame ionization detector

2025-02-28 发布

2025-09-01 实施

国家市场监督管理总局
国家标准化管理委员会 发布

目 次

前言.....Ⅲ

1 范围.....1

2 规范性引用文件.....1

3 术语和定义.....1

4 原理.....1

5 试剂与材料.....1

6 仪器与设备.....2

7 取样.....3

8 试验步骤.....3

9 结果表述.....4

10 精密度.....5

11 试验报告.....6

附录 A(资料性) 标准溶液的全二维质谱总离子流色谱图/氢火焰离子化检测器色谱图和保留时间...8

附录 B(资料性) 不同组分相对于 2,6-二氯苯酚的相对校正因子.....11

附录 C(资料性) 实验室间比对试验得到的统计结果.....12

前 言

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

请注意本文件的某些内容可能涉及专利。本文件的发布机构不承担识别专利的责任。

本文件由全国煤化工标准化技术委员会(SAC/TC 469)提出并归口。

本文件起草单位：太原理工大学、山西省检验检测中心、中国神华煤制油化工有限公司、国家能源集团宁夏煤业有限责任公司、天津先德科技有限责任公司、中科合成油技术股份有限公司、国能基石化工科技(上海)有限公司、雪景电子科技(上海)有限公司、北京低碳清洁能源研究院、中北大学、宁夏计量质量检验检测研究院、昌吉学院、上海究矿能源科技研发有限公司、怀柔实验室山西研究院(怀柔实验室山西基地)、华北科技学院、内蒙古伊泰煤炭股份有限公司。

本文件主要起草人：刘建伟、黄伟、姜兴剑、智红梅、张乾、李雁如、姜忠军、陈军、李艺、李盛胜、白雪梅、李群花、张旭瑞、孙永跃、李晓峰、于紫薇、盖青青、张琴清、李淑娟、郭福强、徐震、孙燕、李旺、张曼、高丹、赵佳颖、袁浩天。

煤基液相酚类化合物的测定

全二维气相色谱-质谱/氢火焰离子化 检测器联用

1 范围

本文件描述了全二维气相色谱-质谱/氢火焰离子化检测器测定煤基液相酚类化合物的试验方法。

本文件适用于下列沸点 $\leq 360\text{ }^{\circ}\text{C}$ 的煤焦油和煤焦化废水中苯酚、 C_1 -苯酚、 C_2 -苯酚、 C_3 -苯酚、苯二酚、茛醇、萘酚、 C_1 -萘酚类化合物的测定：

——煤焦油中苯酚的检出限为 0.015% ， C_1 -苯酚、 C_2 -苯酚的检出限为 0.035% ， C_3 -苯酚检出限为 0.15% ，苯二酚、茛醇、萘酚、 C_1 -萘酚的检出限为 0.35% ，且均为质量分数；

——煤焦化废水中苯酚的检出限为 1.5 mg/L ， C_1 -苯酚、 C_2 -苯酚的检出限为 2.5 mg/L ， C_3 -苯酚检出限为 5.0 mg/L ，苯二酚、茛醇、萘酚、 C_1 -萘酚的检出限为 15.0 mg/L 。

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 1999 焦化油类产品取样方法

GB/T 6682 分析实验室用水规格和试验方法

HJ 494 水质 采样技术指导

3 术语和定义

本文件没有需要界定的术语和定义。

4 原理

将试样导入配有一维非极性色谱柱和二维中等极性色谱柱的全二维气相色谱仪，利用分离器使经色谱柱分离的组分同步进入质谱检测器和氢火焰离子化检测器。根据质谱检测器产生信号的主要离子峰、特征离子峰及一维保留时间、二维保留时间共同定性；通过氢火焰离子化检测器进行检测，采用内标法定量。

5 试剂与材料

除非另有说明，在试验中仅使用确认为分析纯及以上试剂和符合 GB/T 6682 规定的二级以上蒸馏水或其纯度相当的水。

5.1 无水甲醇。

5.2 盐酸： 6 mol/L 。

- 5.3 内标物:2,6-二氯苯酚,纯度不低于 99%(质量分数)。
- 5.4 标准样品:苯酚、邻甲酚、间甲酚、对甲酚、2,6-二甲酚、2,4-二甲酚、3-乙基苯酚、2,3-二甲酚、3,4-二甲酚、2,3,5-三甲基酚、2,4,5-三甲酚、3,4,5-三甲酚、间异丙基酚、3-乙基-5-甲基酚、对苯二酚、5-茛醇、1-萘酚、2-萘酚、2-甲基-1-萘酚。
- 5.5 标准溶液:按照挥发性由低到高的次序精准称量 5 mg~10 mg 标准样品(5.4)和 10 mg 2,6-二氯苯酚,均称准至 0.1mg,用无水甲醇(5.1)溶解,转移至 50 mL 容量瓶中,定容,得到标准混合溶液。对苯二酚、5-茛醇、1-萘酚、2-萘酚、2-甲基-1-萘酚的响应值偏低,取样时应较其余标准样品的量偏多。
- 5.6 载气:氦气,纯度不低于 99.999%(体积分数)。
- 5.7 检测器燃气:氢气,纯度不低于 99.99%(体积分数)。
- 5.8 检测器助燃气:空气,不含干扰测定的污染物。
- 5.9 检测器尾吹气:氮气,纯度不低于 99.99%(体积分数)。

6 仪器与设备

6.1 气相色谱-质谱/氢火焰离子化检测器联用仪:配置有分流/不分流进样口和全二维调制器组件,能够在表 1 所给的典型操作条件下工作。

表 1 典型操作条件

项目		参数
气相系统	载气	He
	进样口温度	250 ℃
	分流比	20:1
	柱流量	1 mL/min
	升温程序	初始温度 60 ℃,以 3 ℃/min 升至 200 ℃,以 20 ℃/min 升至 300 ℃
	质谱传输线温度	300 ℃
	调制周期	8 s
质谱系统	离子化电压	EI, 70 eV
	离子源温度	230 ℃
	质量扫描范围	45 m/z ~200 m/z
	溶剂延迟	6 min
	扫描频率	25 Hz
氢火焰离子化检测系统	温度	300 ℃
	氢气流量	30 mL/min
	空气流量	400 mL/min
	尾吹流量	30 mL/min

6.2 色谱柱:一维色谱柱为非极性弹性石英毛细管柱,宜选用 30 m×0.25 mm×0.25 μm 的聚二甲基硅氧烷毛细管色谱柱;二维色谱柱为中等极性弹性石英毛细管柱,宜选用 1.2 m×0.1 mm×0.1 μm 的(50%-苯基)-甲基聚硅氧烷色谱柱。满足附录 A 所示分离效果的色谱柱均可使用。

- 6.3 固相萃取柱:3 mL,填充物为苯乙烯-二乙烯基苯聚物。
- 6.4 超声波溶解仪。
- 6.5 分析天平:感量为 0.000 1 g。
- 6.6 注射器:1 mL。
- 6.7 微量注射器:1 μ L。
- 6.8 聚四氟乙烯针头过滤器:0.45 μ m。
- 6.9 容量瓶:50 mL。
- 6.10 具塞锥形瓶:25 mL。
- 6.11 单标线移液管:10 mL、50 mL。

7 取样

7.1 煤焦油样品

按 GB/T 1999 的规定取样。

7.2 废水样品

按 HJ 494 的规定取样。

8 试验步骤

8.1 试样制备

8.1.1 煤焦油试样制备

称取 1 g(称准至 0.1 mg)煤焦油样品于 25 mL 具塞锥形瓶中,记录样品质量。准确加入 10 mL 无水甲醇(5.1),置于超声波溶解仪中常温超声溶解 1 min。然后准确加入 2 mg(称准至 0.1 mg)2,6-二氯苯酚(5.3)摇匀,获得煤焦油试样。

8.1.2 废水试样制备

8.1.2.1 取一支固相萃取柱,用 1 mL 甲醇润湿固定相。

8.1.2.2 准确量取 50 mL 废水样品,用 6 mol/L 盐酸调节 pH 为 1~2,通过调节流量控制阀以 5 s/滴的速度流经固相萃取柱,将酚类化合物富集在萃取柱上。

8.1.2.3 在固相萃取柱样品出口端放置 25 mL 锥形瓶,准确加入 10 mL 无水甲醇(5.1)以 5 s/滴的速度洗脱固定相,洗脱出其中吸附的酚类化合物组分。

8.1.2.4 称取 2 mg(称准至 0.1 mg)2,6-二氯苯酚(5.3),加入接收有酚类化合物洗脱液的锥形瓶中,摇匀,获得废水试样。

8.2 测定

8.2.1 定性分析

用微量注射器取 1 μ L 标准溶液(5.5)和待测试样,按照 6.1 规定的工作条件导入色谱仪进行分析。将试样与标准溶液的色谱图进行比较,根据保留时间和离子质荷比进行定性分析。此条件下得到的标准溶液色谱图及保留时间见附录 A。

8.2.2 定量分析

8.2.2.1 相对校正因子的测定

按照 6.1 规定的工作条件对标准溶液(5.5)进行分析,根据色谱图中峰面积,按 9.1 中式(1)计算试样中各组分的相对校正因子。

8.2.2.2 试样的测定

按照 6.1 规定的工作条件对试样进行分析,定性出被测组分,采用内标法进行定量分析。重复测定 2 次,取测定数值的平均值作为测定值。

9 结果表述

9.1 相对校正因子

9.1.1 各组分的相对校正因子(相对于 2,6-二氯苯酚)按式(1)计算:

$$f_i = \frac{A_s m_i}{A_i m_s} \dots\dots\dots (1)$$

式中:

f_i ——被测组分的相对校正因子;

A_s ——2,6-二氯苯酚的峰面积;

m_i ——被测组分的质量,单位为毫克(mg);

A_i ——被测组分的峰面积;

m_s ——2,6-二氯苯酚的质量,单位为毫克(mg)。

各组分 3 次测定结果的相对标准偏差(RSD)不应大于 10%,取其平均值作为该组分的相对校正因子,结果保留至小数点后三位。

注:各组分相对于 2,6-二氯苯酚的相对校正因子参考值见附录 B,因不同色谱仪和操作条件,相对校正因子测定值不同,以实测结果为准。

9.1.2 各组分类别的平均相对校正因子(相对于 2,6-二氯苯酚)按式(2)计算:

$$\bar{f} = \frac{\sum_{i=1}^n f_i}{n} \dots\dots\dots (2)$$

式中:

$\bar{f}$ ——被测组分所属类别的平均相对校正因子;

n ——被测组分所属类别包含组分的数量;

f_i ——被测组分的相对校正因子。

注:对于标准溶液中不含有的酚类化合物组分,采用其所属组分类别的平均相对校正因子计算。

9.2 结果计算

9.2.1 试样中被测组分的含量按式(3)计算:

$$C_x = f_i \times \frac{A_x C_s}{A_s} \dots\dots\dots (3)$$

式中:

C_x ——试样中被测组分的浓度,单位为毫克每毫升(mg/mL);

f_i ——被测组分的相对校正因子;

A_x ——被测组分的峰面积；
 C_s ——2,6-二氯苯酚的浓度,单位为毫克每毫升(mg/mL)；
 A_s ——2,6-二氯苯酚的峰面积。
计算结果以两次测定结果的平均值表示,结果保留到小数点后两位。

9.2.2 煤焦油样品中被测组分的含量按式(4)计算：

$$\omega = \frac{C_x V_x}{m} \times 100 \dots\dots\dots (4)$$

式中：
 ω ——煤焦油样品中被测组分的含量,％(质量分数)；
 C_x ——煤焦油试样中被测组分的浓度,单位为毫克每毫升(mg/mL)；
 V_x ——煤焦油试样的体积,单位为毫升(mL)；
 m ——初始煤焦油样品的质量,单位为毫克(mg)。
计算结果以两次测定结果的平均值表示,结果保留到小数点后两位。

9.2.3 废水样品中被测组分的含量按式(5)计算：

$$C = \frac{C_x V_x}{V} \dots\dots\dots (5)$$

式中：
 C ——废水样品中被测组分的浓度,单位为毫克每升(mg/L)；
 C_x ——废水试样中被测组分的浓度,单位为毫克每毫升(mg/mL)；
 V_x ——废水试样的体积,单位为毫升(mL)；
 V ——初始废水样品的体积,单位为升(L)。
计算结果以两次测定结果的平均值表示,结果保留到小数点后一位。

10 精密度

10.1 重复性:在同一实验室,由同一操作者使用相同设备,按相同的测试方法,在短时间内对同一煤焦油试样或废水试样进行测试,获得的 2 次独立测试结果的绝对差值不应超过表 2 和表 3 规定的重复性限(置信度 95%)。

10.2 再现性:在不同实验室,由不同操作者使用不同设备,按相同的测试方法,在短时间内对同一煤焦油试样或废水试样进行测试,获得的 2 次独立测试结果的绝对差值不应超过表 2 和表 3 规定的再现性限(置信度 95%)。实验室间比对试验得到的统计结果见附录 C。

表 2 煤焦油样品的重复性(*r*)与再现性(*R*)

以百分数(%)表示

组分类别	组分名称	重复性(<i>r</i>)	再现性(<i>R</i>)
苯酚	苯酚	0.030X ^{0.54}	0.094X ^{0.15}
C ₁ -苯酚	邻甲酚	0.075X ^{0.24}	0.121X ^{0.42}
	间甲酚+对甲酚	0.038X ^{0.62}	0.109X ^{0.26}
C ₂ -苯酚	2,6-二甲酚	0.056X	0.126X ^{0.35}
	2,4-二甲酚	0.079X ^{0.42}	0.095X ^{0.10}
	3-乙基苯酚	0.060X	0.065X ^{0.83}
	2,3-二甲酚	0.082X ^{0.49}	0.096X ^{0.51}
	3,4-二甲酚	0.057X ^{0.43}	0.060X ^{0.16}

表 2 煤焦油样品的重复性(*r*)与再现性(*R*) (续)

以百分数(%)表示

组分类别	组分名称	重复性(<i>r</i>)	再现性(<i>R</i>)
C ₃ -苯酚	间异丙基苯酚	0.054X ^{0.35}	0.085X ^{0.42}
	3,4,5-三甲酚	0.175X ^{0.76}	0.188X ^{0.75}
	2,3,5-三甲酚	0.012X ^{0.23}	0.027X ^{0.43}
	3-乙基-5-甲酚	0.053X	0.074X
苯二酚	对苯二酚	0.013X ^{0.29}	0.013X ^{0.07}
茛酚	5-茛醇	0.112X ^{0.65}	0.130X ^{0.65}
萘酚	1-萘酚	0.100X ^{0.66}	0.099X ^{0.64}
	2-萘酚	0.036X ^{0.25}	0.069X ^{0.44}
C ₁ -萘酚	2-甲基-1-萘酚	0.078X	0.028X ^{0.41}
注：“X”为组分重复测定结果的平均值。			

表 3 废水样品的重复性(*r*)与再现性(*R*)

单位为毫克每升

组分类别	组分名称	重复性(<i>r</i>)	再现性(<i>R</i>)
苯酚	苯酚	1.582X ^{0.35}	14.921X ^{0.08}
C ₁ -苯酚	邻甲酚	0.052X	0.128X
	间甲酚+对甲酚	0.027X	16.280X ^{0.06}
C ₂ -苯酚	2,6-二甲酚	0.078X	2.132X ^{0.30}
	2,4-二甲酚	0.080X ^{0.96}	0.176X ^{0.80}
	3-乙基苯酚	0.981X ^{0.37}	1.242X ^{0.38}
	2,3-二甲酚	0.380X ^{0.67}	0.279X ^{0.75}
	3,4-二甲酚	1.947X ^{0.24}	1.067X ^{0.41}
C ₃ -苯酚	间异丙基苯酚	0.078X	0.101X
	3,4,5-三甲基苯酚	0.276X ^{0.77}	0.303X ^{0.76}
苯二酚	对苯二酚	0.778X ^{0.57}	2.702X ^{0.34}
茛酚	5-茛醇	0.497X ^{0.50}	0.776X ^{0.48}
萘酚	1-萘酚	0.378X ^{0.69}	0.705X ^{0.57}
	2-萘酚	0.394X ^{0.70}	0.258X ^{0.89}
注：“X”为组分重复测定结果的平均值。			

11 试验报告

试验报告至少应包含以下信息：

- a) 所使用的标准(本文件编号及名称);
- b) 样品信息,如样品名称、批号、取样日期等;
- c) 方法编号;
- d) 试验结果;
- e) 试验中出现的异常现象;
- f) 试验人员的姓名及试验日期等。

附 录 A
(资料性)

标准溶液的全二维质谱总离子流色谱图/氢火焰离子化检测器色谱图和保留时间

图 A.1 和图 A.2 分别给出了标准溶液的全二维质谱总离子流色谱图和氢火焰离子化检测器色谱图,表 A.1 和表 A.2 分别给出了其对应的标准溶液中不同组分保留时间。

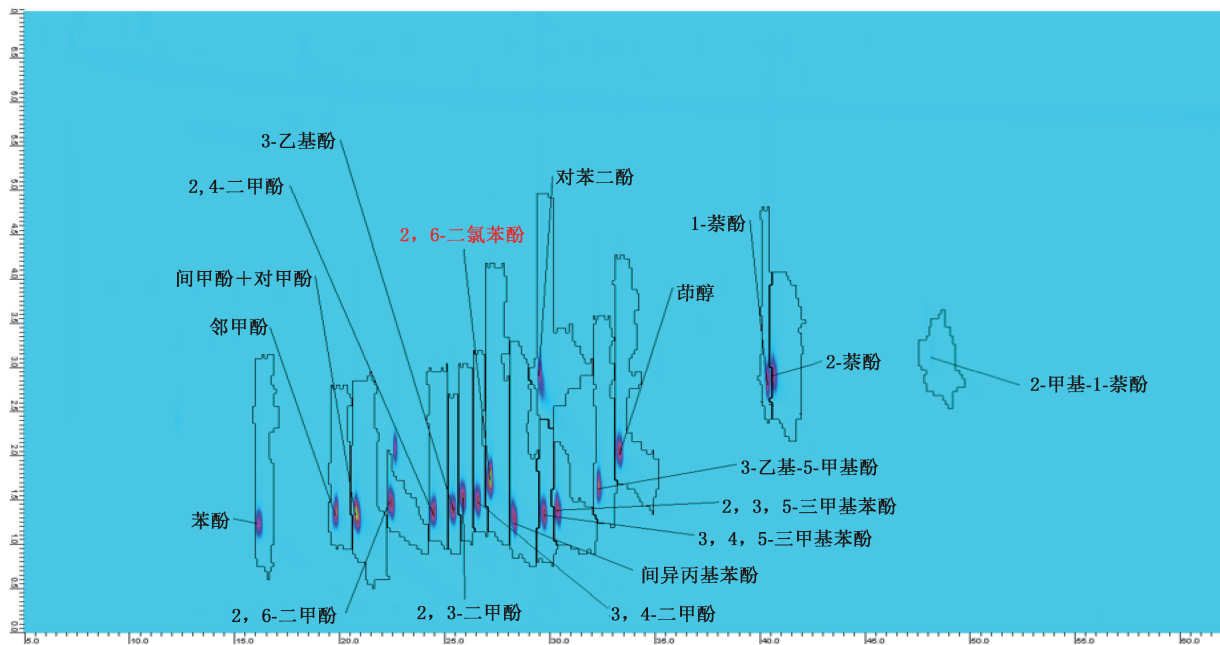


图 A.1 标准溶液的全二维质谱总离子流色谱图

表 A.1 标准溶液中不同组分的全二维质谱总离子流色谱图保留时间

序号	组分名称	一维保留时间/min	二维保留时间/s
1	苯酚	16.10	1.28
2	邻甲酚	19.72	1.43
3	间甲酚+对甲酚	20.77	1.56
4	2,6-二甲酚	22.40	1.46
5	2,4-二甲酚	24.38	1.41
6	3-乙基酚	25.32	1.47
7	2,3-二甲酚	25.78	1.64
8	3,4-二甲酚	26.48	1.66
9	2,6-二氯苯酚	27.07	1.69
10	间异丙基苯酚	28.23	1.37
11	对苯二酚	29.52	3.17

表 A.1 标准溶液中不同组分的全二维质谱总离子流色谱图保留时间 (续)

序号	组分名称	一维保留时间/min	二维保留时间/s
12	3,4,5-三甲基苯酚	29.63	1.46
13	2,3,5-三甲基苯酚	30.33	1.44
14	3-乙基-5-甲基酚	32.20	1.81
15	茚醇	33.25	2.16
16	1-萘酚	40.25	3.03
17	2-萘酚	40.60	3.06
18	2-甲基-1-萘酚	45.36	3.17

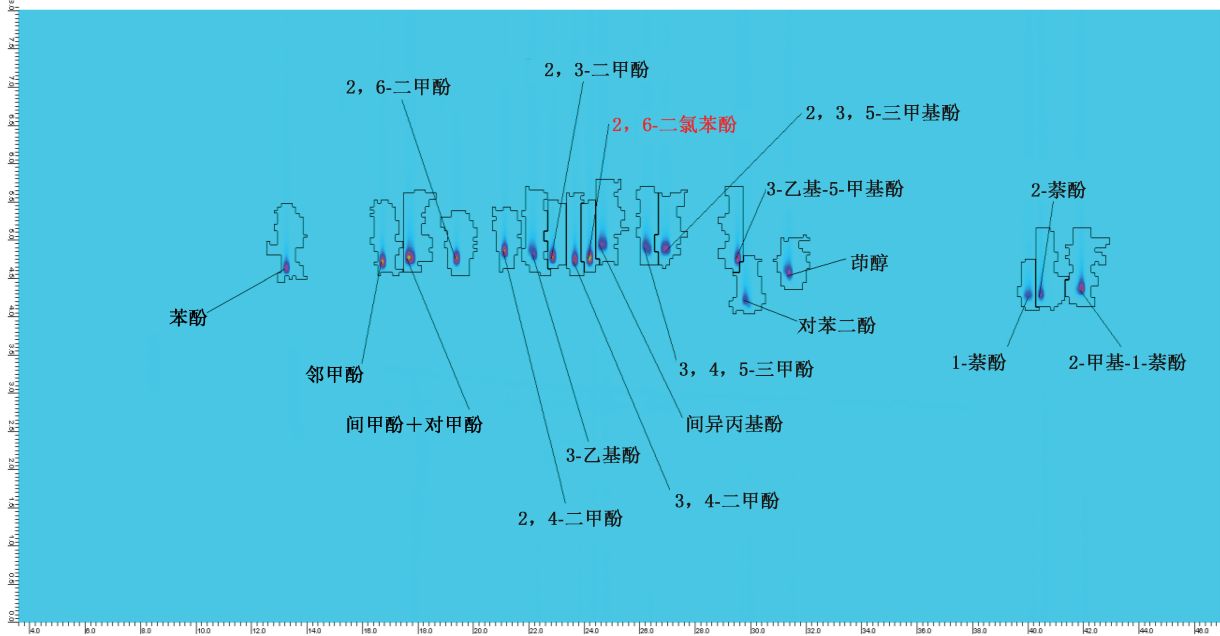


图 A.2 标准溶液的全二维氢火焰离子化检测器色谱图

表 A.2 标准溶液中不同组分的全二维氢火焰离子化检测器色谱图保留时间

序号	组分名称	一维保留时间/min	二维保留时间/s
1	苯酚	15.98	1.18
2	邻甲酚	19.72	1.29
3	间甲酚+对甲酚	20.65	1.31
4	2,6-二甲酚	22.28	1.39
5	2,4-二甲酚	24.38	1.28
6	3-乙基酚	25.32	1.30
7	2,3-二甲酚	25.78	1.47
8	3,4-二甲酚	26.48	1.44

表 A.2 标准溶液中不同组分的全二维氢火焰离子化检测器色谱图保留时间 (续)

序号	组分名称	一维保留时间/min	二维保留时间/s
9	2,6-二氯苯酚	27.07	1.67
10	间异丙基苯酚	28.23	1.22
11	对苯二酚	29.40	2.86
12	3,4,5-三甲基苯酚	29.63	1.28
13	2,3,5-三甲基苯酚	30.22	1.36
14	3-乙基-5-甲基酚	32.47	1.59
15	茚醇	33.38	1.94
16	1-萘酚	40.13	2.78
17	2-萘酚	40.48	2.86
18	2-甲基-1-萘酚	44.89	2.35

附 录 B

(资料性)

不同组分相对于 2,6-二氯苯酚的相对校正因子

表 B.1 给出了标准溶液中不同组分相对于 2,6-二氯苯酚的相对校正因子。

表 B.1 不同组分相对于 2,6-二氯苯酚的相对校正因子

组分类别	组分名称	相对校正因子(f_i)	平均相对校正因子($\bar{f}$)
苯酚	苯酚	0.612	0.612
C ₁ -苯酚	邻甲酚	0.459	0.494
	间甲酚+对甲酚	0.528	
C ₂ -苯酚	2,6-二甲酚	0.526	0.516
	2,4-二甲酚	0.501	
	3-乙基苯酚	0.515	
	2,3-二甲酚	0.509	
	3,4-二甲酚	0.528	
C ₃ -苯酚	间异丙基苯酚	0.490	0.518
	3,4,5-三甲基苯酚	0.534	
	2,3,5-三甲酚	0.527	
	3-乙基-5-甲基酚	0.521	
苯二酚	对苯二酚	0.606	0.606
茛醇	5-茛醇	1.328	1.328
萘酚	1-萘酚	0.608	0.608
	2-萘酚	0.618	
C ₁ -萘酚	2-甲基-1-萘酚	0.636	0.612

附 录 C

(资料性)

实验室间比对试验得到的统计结果

表 C.1 和表 C.2 给出了组织的 8 家实验室分别对 4 个煤焦油样品和 4 个废水样品进行实验室间比对试验得到的统计结果。

表 C.1 煤焦油样品的统计结果

组分名称	统计名称	样品编号			
		1#	2#	3#	4#
苯酚	可接受结果的数目	8	7	8	8
	平均值/%	2.05	2.41	1.04	3.58
	重复性标准差(s_r)	0.045	0.048	0.031	0.061
	重复性限(r)($2.8 \times s_r$)	0.126	0.134	0.087	0.171
	再现性标准差(s_R)	0.105	0.107	0.095	0.113
	再现性限(R)($2.8 \times s_R$)	0.316	0.24	0.31	0.341
邻甲酚	可接受结果的数目	8	8	8	8
	平均值/%	3.28	5.18	1.16	7.24
	重复性标准差(s_r)	0.094	0.111	0.078	0.121
	重复性限(r)($2.8 \times s_r$)	0.263	0.312	0.218	0.338
	再现性标准差(s_R)	0.199	0.241	0.129	0.278
	再现性限(R)($2.8 \times s_R$)	0.558	0.676	0.361	0.778
间甲酚+对甲酚	可接受结果的数目	8	8	8	8
	平均值/%	4.96	6.83	2.35	8.91
	重复性标准差(s_r)	0.103	0.125	0.065	0.147
	重复性限(r)($2.8 \times s_r$)	0.287	0.35	0.181	0.413
	再现性标准差(s_R)	0.165	0.18	0.136	0.192
	再现性限(R)($2.8 \times s_R$)	0.463	0.503	0.381	0.539
2,6-二甲酚	可接受结果的数目	8	7	8	8
	平均值/%	1.12	2.03	0.79	3.54
	重复性标准差(s_r)	0.068	0.114	0.044	0.196
	重复性限(r)($2.8 \times s_r$)	0.19	0.318	0.124	0.549
	再现性标准差(s_R)	0.135	0.161	0.116	0.198
	再现性限(R)($2.8 \times s_R$)	0.377	0.452	0.325	0.555
2,4-二甲酚	可接受结果的数目	8	8	7	8
	平均值/%	1	0.88	1.97	3.71
	重复性标准差(s_r)	0.079	0.075	0.102	0.108

表 C.1 煤焦油样品的统计结果 (续)

组分名称	统计名称	样品编号			
		1#	2#	3#	4#
2,4-二甲酚	重复性限(r)($2.8 \times s_r$)	0.221	0.21	0.285	0.303
	再现性标准差(s_R)	0.095	0.094	0.105	0.137
	再现性限(R)($2.8 \times s_R$)	0.266	0.263	0.294	0.384
3-乙基苯酚	可接受结果的数目	8	8	8	8
	平均值/%	0.89	0.78	0.35	1.28
	重复性标准差(s_r)	0.053	0.047	0.021	0.077
	重复性限(r)($2.8 \times s_r$)	0.15	0.131	0.059	0.215
	再现性标准差(s_R)	0.059	0.053	0.027	0.08
	再现性限(R)($2.8 \times s_R$)	0.165	0.148	0.076	0.223
2,3-二甲酚	可接受结果的数目	8	8	8	8
	平均值/%	0.21	0.031	0.093	0.61
	重复性标准差(s_r)	0.038	0.015	0.026	0.064
	重复性限(r)($2.8 \times s_r$)	0.107	0.042	0.072	0.18
	再现性标准差(s_R)	0.043	0.016	0.029	0.075
	再现性限(R)($2.8 \times s_R$)	0.121	0.046	0.08	0.209
3,4-二甲酚	可接受结果的数目	8	8	8	8
	平均值/%	0.39	0.28	0.17	0.79
	重复性标准差(s_r)	0.038	0.033	0.027	0.052
	重复性限(r)($2.8 \times s_r$)	0.106	0.092	0.074	0.144
	再现性标准差(s_R)	0.052	0.049	0.045	0.058
	再现性限(R)($2.8 \times s_R$)	0.145	0.137	0.127	0.162
间异丙基苯酚	可接受结果的数目	8	8	8	8
	平均值/%	0.18	0.081	0.083	0.56
	重复性标准差(s_r)	0.03	0.022	0.023	0.044
	重复性限(r)($2.8 \times s_r$)	0.083	0.063	0.063	0.123
	再现性标准差(s_R)	0.041	0.03	0.03	0.067
	再现性限(R)($2.8 \times s_R$)	0.116	0.083	0.084	0.187
3,4,5-三甲基苯酚	可接受结果的数目	8	8	8	8
	平均值/%	0.12	0.031	0.026	0.57
	重复性标准差(s_r)	0.018	0.017	0.011	0.151
	重复性限(r)($2.8 \times s_r$)	0.052	0.048	0.032	0.423
	再现性标准差(s_R)	0.02	0.018	0.012	0.154
	再现性限(R)($2.8 \times s_R$)	0.056	0.051	0.033	0.431

表 C.1 煤焦油样品的统计结果 (续)

组分名称	统计名称	样品编号			
		1#	2#	3#	4#
2,3,5-三甲酚	可接受结果的数目	8	8	7	8
	平均值/%	0.29	0.14	0.23	0.092
	重复性标准差(s_r)	0.012	0.008	0.009	0.006
	重复性限(r)($2.8 \times s_r$)	0.034	0.022	0.025	0.017
	再现性标准差(s_R)	0.016	0.012	0.014	0.01
	再现性限(R)($2.8 \times s_R$)	0.045	0.034	0.039	0.028
3-乙基-5-甲基酚	可接受结果的数目	8	8	8	8
	平均值/%	0.33	0.095	0.18	0.41
	重复性标准差(s_r)	0.017	0.005	0.01	0.022
	重复性限(r)($2.8 \times s_r$)	0.049	0.014	0.027	0.061
	再现性标准差(s_R)	0.024	0.007	0.013	0.03
	再现性限(R)($2.8 \times s_R$)	0.068	0.02	0.037	0.085
对苯二酚	可接受结果的数目	8	8	8	8
	平均值/%	0.19	0.21	0.083	0.48
	重复性标准差(s_r)	0.008	0.008	0.006	0.011
	重复性限(r)($2.8 \times s_r$)	0.022	0.023	0.018	0.029
	再现性标准差(s_R)	0.012	0.012	0.011	0.012
	再现性限(R)($2.8 \times s_R$)	0.032	0.033	0.031	0.035
5-茛醇	可接受结果的数目	7	8	8	8
	平均值/%	0.093	0.023	0.023	0.49
	重复性标准差(s_r)	0.019	0.01	0.01	0.078
	重复性限(r)($2.8 \times s_r$)	0.054	0.029	0.028	0.22
	再现性标准差(s_R)	0.029	0.012	0.011	0.081
	再现性限(R)($2.8 \times s_R$)	0.08	0.033	0.029	0.228
1-萘酚	可接受结果的数目	8	8	8	8
	平均值/%	0.12	0.025	0.026	0.52
	重复性标准差(s_r)	0.014	0.009	0.011	0.086
	重复性限(r)($2.8 \times s_r$)	0.039	0.026	0.031	0.24
	再现性标准差(s_R)	0.015	0.01	0.012	0.087
	再现性限(R)($2.8 \times s_R$)	0.042	0.028	0.033	0.242
2-萘酚	可接受结果的数目	8	7	8	8
	平均值/%	0.14	0.039	0.027	0.52
	重复性标准差(s_r)	0.016	0.021	0.013	0.035

表 C.1 煤焦油样品的统计结果 (续)

组分名称	统计名称	样品编号			
		1#	2#	3#	4#
2-萘酚	重复性限(r)($2.8 \times s_r$)	0.045	0.06	0.036	0.098
	再现性标准差(s_R)	0.019	0.022	0.014	0.063
	再现性限(R)($2.8 \times s_R$)	0.054	0.062	0.037	0.176
2-甲基-1-萘酚	可接受结果的数目	8	8	8	8
	平均值/%	0.11	0.19	0.09	0.087
	重复性标准差(s_r)	0.01	0.007	0.008	0.008
	重复性限(r)($2.8 \times s_r$)	0.027	0.019	0.024	0.022
	再现性标准差(s_R)	0.011	0.014	0.01	0.011
	再现性限(R)($2.8 \times s_R$)	0.032	0.039	0.027	0.031

表 C.2 废水样品的统计结果

组分名称	统计名称	样品编号			
		1#	2#	3#	4#
苯酚	可接受结果的数目	8	8	8	8
	平均值/%	229.6	180.4	165.4	76.7
	重复性标准差(s_r)	10.934	10.866	8.175	7.421
	重复性限(r)($2.8 \times s_r$)	30.617	30.423	22.891	20.78
	再现性标准差(s_R)	24.948	23.737	19.057	21.965
	再现性限(R)($2.8 \times s_R$)	69.854	66.463	53.36	61.502
邻甲酚	可接受结果的数目	7	8	8	8
	平均值/%	115.4	272.5	196.9	179.6
	重复性标准差(s_r)	6.001	14.17	10.239	9.339
	重复性限(r)($2.8 \times s_r$)	16.802	39.676	28.669	26.15
	再现性标准差(s_R)	14.771	34.88	25.203	22.989
	再现性限(R)($2.8 \times s_R$)	41.359	97.664	70.569	64.369
间甲酚+对甲酚	可接受结果的数目	7	8	8	8
	平均值/%	115.4	272.5	196.9	179.6
	重复性标准差(s_r)	6.001	14.17	10.239	9.339
	重复性限(r)($2.8 \times s_r$)	16.802	39.676	28.669	26.15
	再现性标准差(s_R)	14.771	34.88	25.203	22.989
	再现性限(R)($2.8 \times s_R$)	41.359	97.664	70.569	64.369

表 C.2 废水样品的统计结果 (续)

组分名称	统计名称	样品编号			
		1#	2#	3#	4#
2,6-二甲酚	可接受结果的数目	8	8	8	8
	平均值/%	323.5	581.8	477.1	373.6
	重复性标准差(s_r)	8.735	15.709	12.882	10.087
	重复性限(r)($2.8 \times s_r$)	24.457	43.984	36.069	28.244
	再现性标准差(s_R)	23.028	23.853	23.571	23.227
	再现性限(R)($2.8 \times s_R$)	64.477	66.788	65.998	65.036
2,4-二甲酚	可接受结果的数目	8	8	8	8
	平均值/%	113.4	84.8	150.1	—
	重复性标准差(s_r)	7.06	6.29	10.77	—
	重复性限(r)($2.8 \times s_r$)	19.78	17.61	30.16	—
	再现性标准差(s_R)	7.1	7.85	10.86	—
	再现性限(R)($2.8 \times s_R$)	19.89	21.97	30.41	—
3-乙基苯酚	可接受结果的数目	8	8	8	8
	平均值/%	87.1	102.3	125.2	95.2
	重复性标准差(s_r)	5.828	6.801	8.256	6.347
	重复性限(r)($2.8 \times s_r$)	16.318	19.043	23.118	17.772
	再现性标准差(s_R)	6.274	7.135	8.387	6.736
	再现性限(R)($2.8 \times s_R$)	17.566	19.979	23.483	18.862
2,3-二甲酚	可接受结果的数目	8	8	8	8
	平均值/%	42.2	128.2	86.2	106.6
	重复性标准差(s_r)	3.918	5.91	5.103	5.52
	重复性限(r)($2.8 \times s_r$)	10.97	16.548	14.288	15.456
	再现性标准差(s_R)	5.149	7.855	6.755	7.323
	再现性限(R)($2.8 \times s_R$)	14.418	21.993	18.914	20.503
3,4-二甲酚	可接受结果的数目	8	8	8	8
	平均值/%	50.9	72.1	—	63.1
	重复性标准差(s_r)	5.288	6.677	—	6.107
	重复性限(r)($2.8 \times s_r$)	14.806	18.696	—	17.099
	再现性标准差(s_R)	5.317	6.903	—	6.246
	再现性限(R)($2.8 \times s_R$)	14.887	19.329	—	17.49
间异丙基苯酚	可接受结果的数目	8	8	8	8
	平均值/%	38.1	83.9	103.7	76.3

表 C.2 废水样品的统计结果 (续)

组分名称	统计名称	样品编号			
		1#	2#	3#	4#
间异丙基苯酚	重复性标准差(s_r)	4.664	5.637	5.931	5.51
	重复性限(r)($2.8 \times s_r$)	13.06	15.784	16.608	15.429
	再现性标准差(s_R)	4.746	6.56	7.155	6.31
	再现性限(R)($2.8 \times s_R$)	13.289	18.368	20.035	17.667
3,4,5-三甲基苯酚	可接受结果的数目	8	8	8	8
	平均值/%	64.2	—	74.4	26.7
	重复性标准差(s_r)	5.008	—	5.806	2.083
	重复性限(r)($2.8 \times s_r$)	14.022	—	16.257	5.831
	再现性标准差(s_R)	6.485	—	7.518	2.697
	再现性限(R)($2.8 \times s_R$)	18.157	—	21.051	7.551
对苯二酚	可接受结果的数目	8	8	8	8
	平均值/%	32.4	63.2	83.9	—
	重复性标准差(s_r)	4.258	5.954	9.418	—
	重复性限(r)($2.8 \times s_r$)	11.921	16.671	26.371	—
	再现性标准差(s_R)	4.379	6.034	9.52	—
	再现性限(R)($2.8 \times s_R$)	12.26	16.895	26.656	—
5-茛醇	可接受结果的数目	8	8	8	7
	平均值/%	5.2	7.3	—	10.5
	重复性标准差(s_r)	14.7	20.4	—	29.5
	重复性限(r)($2.8 \times s_r$)	8.422	10.27	—	12.774
	再现性标准差(s_R)	23.581	28.755	—	35.768
	再现性限(R)($2.8 \times s_R$)	5.232	7.297	—	10.52
1-萘酚	可接受结果的数目	8	8	8	8
	平均值/%	8.5	25.3	72.1	—
	重复性标准差(s_r)	1.446	2.501	4.22	—
	重复性限(r)($2.8 \times s_r$)	4.048	7.003	11.816	—
	再现性标准差(s_R)	2.163	3.659	6.049	—
	再现性限(R)($2.8 \times s_R$)	6.056	10.245	16.937	—
2-萘酚	可接受结果的数目	8	8	8	8
	平均值/%	9.6	93.8	88.7	55.4
	重复性标准差(s_r)	1.8	8.676	8.348	6.033

表 C.2 废水样品的统计结果 (续)

组分名称	统计名称	样品编号			
		1#	2#	3#	4#
2-萘酚	重复性限(r)($2.8\times s_r$)	5.04	24.292	23.373	16.892
	再现性标准差(s_R)	2.559	9.383	9.089	6.95
	再现性限(R)($2.8\times s_R$)	7.165	26.273	25.449	19.46
注：“—”表示未检出。					

