

表S1 线性范围、加标回收率、决定系数 (R^2)、精密度和分离度 (R)Table S1 Linear ranges, spiked recoveries, precisions, correlation coefficients (R^2) and resolutions (R)

编号	组分	线性范围 (g/L)	R^2	回收率/(%)		RSD/%	R	编号	组分	线性范围 (g/L)	R^2	回收率/(%)		RSD/%	R
				高浓度	低浓度							高浓度	低浓度		
1	乙醛	0.0193~0.3861	0.942	88.4	87.1	4.55	/	28	乳酸乙酯	0.0458~0.9167	0.963	89.0	97.3	3.47	10.44
2	丙醛	0.0162~0.3242	0.944	87.3	90.0	3.90	8.14	29	正己醇	0.0186~0.3721	0.991	97.6	103.0	4.74	1.61
3	丙酮	0.0225~0.4506	0.967	97.1	101.2	2.39	3.51	30	庚酸乙酯	0.0184~0.3683	0.991	98.7	96.8	3.77	1.75
4	甲酸乙酯	0.0149~0.2982	0.971	93.9	98.4	3.75	1.12	31	乙酸	0.0202~0.4041	0.946	97.6	89.3	3.56	23.85
5	甲醇	0.0166~0.3324	0.946	89.4	86.5	2.40	13.2	32	三甲基吡嗪	0.0258~0.5161	0.995	103.5	112.4	6.81	2.73
6	乙酸乙酯	0.0580~1.1603	0.998	106.3	103.4	3.14	1.09	33	正庚醇	0.0199~0.3980	0.961	99.4	100.3	3.70	1.50
7	乙缩醛	0.0161~0.3225	0.991	102.3	110.5	5.33	2.42	34	辛酸乙酯	0.0212~0.4243	0.993	107.3	105.3	4.11	3.51
8	乙醇 [#]	/	/	/	/	/	/	35	糠醛	0.0270~0.5409	0.951	91.4	93.2	4.79	4.80
9	丙酸乙酯	0.0154~0.3087	0.976	97.7	102.4	3.07	3.06	36	己酸异戊酯	0.0196~0.3922	0.960	93.1	87.2	3.46	3.21
10	双乙酰	0.0206~0.4121	0.947	98.1	96.3	3.17	2.05	37	丙酸	0.0194~0.3884	0.959	86.1	88.2	4.81	6.97
11	异丁酸乙酯	0.0155~0.3108	0.956	95.5	97.4	3.04	1.28	38	异丁酸	0.0183~0.3664	0.950	91.2	87.0	3.72	8.16
12	2-戊酮	0.0183~0.3660	0.971	89.3	94.2	3.33	2.99	39	丁酸	0.0193~0.3861	0.960	92.3	94.1	5.40	14.04
13	叔戊醇	0.0170~0.3401	0.966	90.4	90.1	2.33	2.55	40	异戊酸	0.0186~0.3727	0.947	90.1	89.4	5.14	12.81
14	仲丁醇	0.0179~0.3584	0.947	94.6	93.0	4.61	3.51	41	糠醇	0.0243~0.4863	0.977	98.9	104.1	3.77	1.14
15	正丙醇	0.0181~0.3622	0.985	110.1	102.3	3.60	4.85	42	癸酸乙酯	0.0221~0.4422	0.983	103.2	110.1	3.13	3.47
16	丁酸乙酯	0.0163~0.3266	0.992	108.3	115.3	4.31	5.60	43	丁二酸二乙酯	0.0224~0.4486	0.985	99.9	97.5	4.44	2.37
17	乙酸正丁酯	0.0182~0.3640	0.967	103.5	98.9	3.37	13.67	44	戊酸	0.0198~0.3966	0.955	89.1	88.3	4.51	3.67
18	2-己酮	0.0176~0.3522	0.957	99.9	110.4	3.88	4.25	45	2-乙基正丁酸	0.0188~0.3763	0.961	93.1	91.7	4.70	5.08
19	仲戊醇	0.0165~0.3306	0.970	92.3	95.5	4.59	3.66	46	己酸	0.0195~0.3902	0.951	86.8	94.2	4.81	14.01
20	正丁醇	0.0193~0.3866	0.981	96.7	96.3	3.16	10.16	47	苯乙酸乙酯	0.0276~0.5524	0.981	96.3	100.4	4.54	1.53
21	戊酸乙酯	0.0187~0.3741	0.989	104.0	102.5	3.47	3.28	48	月桂酸乙酯	0.0214~0.4281	0.989	92.4	92.9	3.63	9.06
22	乙酸正戊酯	0.0208~0.4162	0.991	110.7	114.3	3.46	14.58	49	庚酸	0.0299~0.4581	0.955	90.2	88.6	4.57	10.07
23	异戊醇	0.0173~0.3463	0.981	103.1	97.2	3.81	2.50	50	β -苯乙醇	0.0272~0.5443	0.945	94.3	113.4	5.13	1.95
24	正戊醇	0.0197~0.3943	0.989	95.5	96.5	3.73	16.42	51	辛酸	0.0231~0.4620	0.952	92.4	91.1	5.27	11.17
25	己酸乙酯	0.1149~2.2980	0.974	98.9	98.9	3.03	4.31	52	十四酸乙酯	0.0214~0.4283	0.988	103.3	112.4	4.88	8.39
26	乙酸己酯	0.0192~0.3840	0.995	102.1	105.0	4.19	13.49	53	壬酸	0.0222~0.4442	0.962	87.6	86.9	6.11	7.59
27	2-庚醇	0.0181~0.3621	0.959	93.2	89.5	3.91	7.39	54	棕榈酸乙酯	0.0230~0.4604	0.993	99.8	102.5	3.91	22.19

注: #表示溶剂; /表示无数据.

表S2 市售5种白酒中微量组分含量测试结果 (g/L)

Table S2 Concentrations of quantity-tiny components of 5 liquors from market (g/L)

组分名称	1#	2#	3#	4#	5#	组分名称	1#	2#	3#	4#	5#
乙醛	0.174	0.187	0.020	0.257	0.236	正己醇	0.014	0.021	0.027	0.032	0.025
丙醛	0.009	0.008	0.031	0.014	0.015	庚酸乙酯	0.011	0.013	-	0.013	0.009
丙酮	0.002	0.002	0.014	0.003	0.004	乙酸	0.823	0.402	0.908	0.657	0.660
甲酸乙酯	0.013	0.009	0.010	0.023	0.020	三甲基吡嗪	0.008	0.016	-	0.010	0.014
甲醇	0.023	0.061	-	0.063	0.055	正庚醇	0.023	0.017	-	0.038	0.020
乙酸乙酯	0.972	0.841	0.772	1.103	1.086	辛酸乙酯	0.042	0.025	-	0.062	0.050
乙缩醛	0.132	0.098	0.051	0.147	0.154	糠醛	0.071	0.034	-	0.102	0.079
丙酸乙酯	0.974	0.524	-	1.002	1.277	己酸异戊酯	-	-	-	0.009	0.044
双乙酰	-	0.016	-	0.015	0.032	丙酸	0.012	0.017	0.008	0.022	0.023
异丁酸乙酯	0.114	0.078	-	0.142	0.144	异丁酸	0.009	0.014	-	0.014	0.010
2-戊酮	-	-	-	0.018	0.012	丁酸	0.140	0.112	0.094	0.142	0.158
仲丁醇	0.095	0.082	0.103	0.080	0.073	异戊酸	0.022	0.017	-	0.011	0.016
正丙醇	0.277	0.186	0.249	0.401	0.399	糠醇	0.015	0.015	-	0.007	0.024
丁酸乙酯	0.120	0.087	0.088	0.132	0.096	癸酸乙酯	0.007	0.013	0.016	0.046	0.039
2-己酮	-	-	-	0.022	0.008	丁二酸二乙酯	0.020	0.014	0.007	0.045	0.055
仲戊醇	0.087	0.033	0.103	0.087	0.111	戊酸	0.012	0.023	-	0.011	0.011
正丁醇	0.058	0.060	0.033	0.114	0.102	己酸	0.241	0.374	0.401	0.330	0.377
戊酸乙酯	0.032	0.023	0.003	0.088	0.082	苯乙酸乙酯	0.003	0.003	-	0.007	-
乙酸正戊酯	0.200	0.136	-	0.121	0.138	月桂酸乙酯	0.009	0.015	0.014	0.005	0.008
异戊醇	0.260	0.187	0.002	0.296	0.330	庚酸	0.003	-	-	0.002	0.002
正戊醇	0.221	0.240	0.005	0.190	0.204	β -苯乙醇	0.060	0.334	-	0.145	0.200
己酸乙酯	1.342	1.089	1.450	1.984	2.184	辛酸	0.013	0.009	-	0.003	0.004
乙酸己酯	0.245	0.108	-	0.336	0.272	十四酸乙酯	0.009	0.004	-	0.002	0.006
2-庚醇	-	-	-	0.025	0.033	壬酸	-	-	-	0.035	0.018
乳酸乙酯	1.354	1.345	1.279	1.200	1.231	棕榈酸乙酯	0.049	0.034	-	0.067	0.088

注: -表示未检出