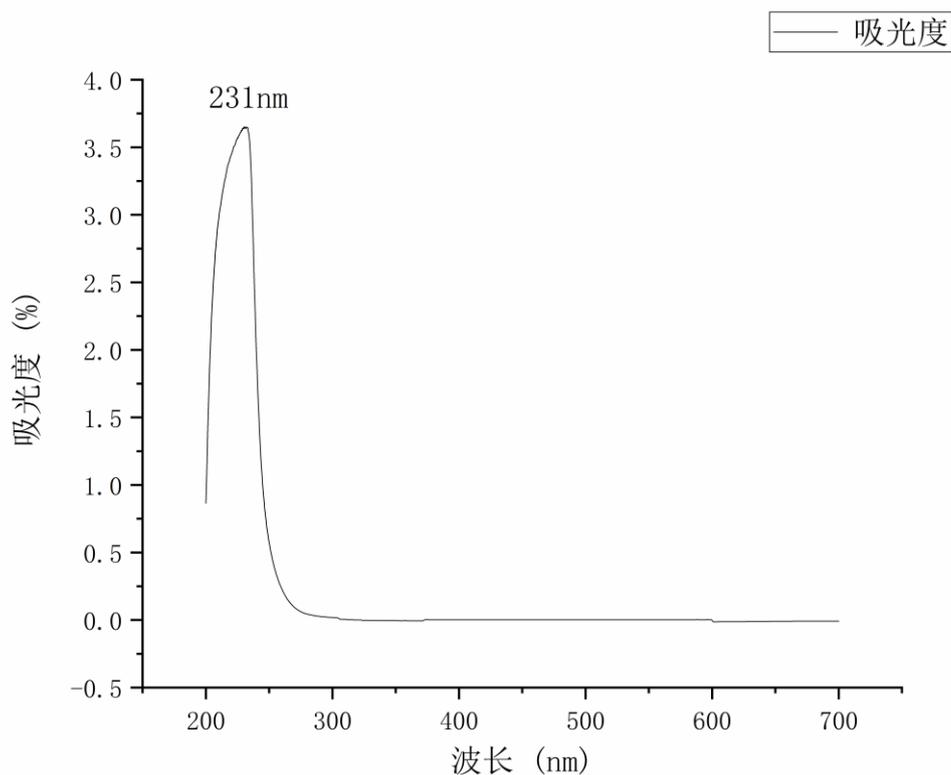


Supplementary documents

1. SA release

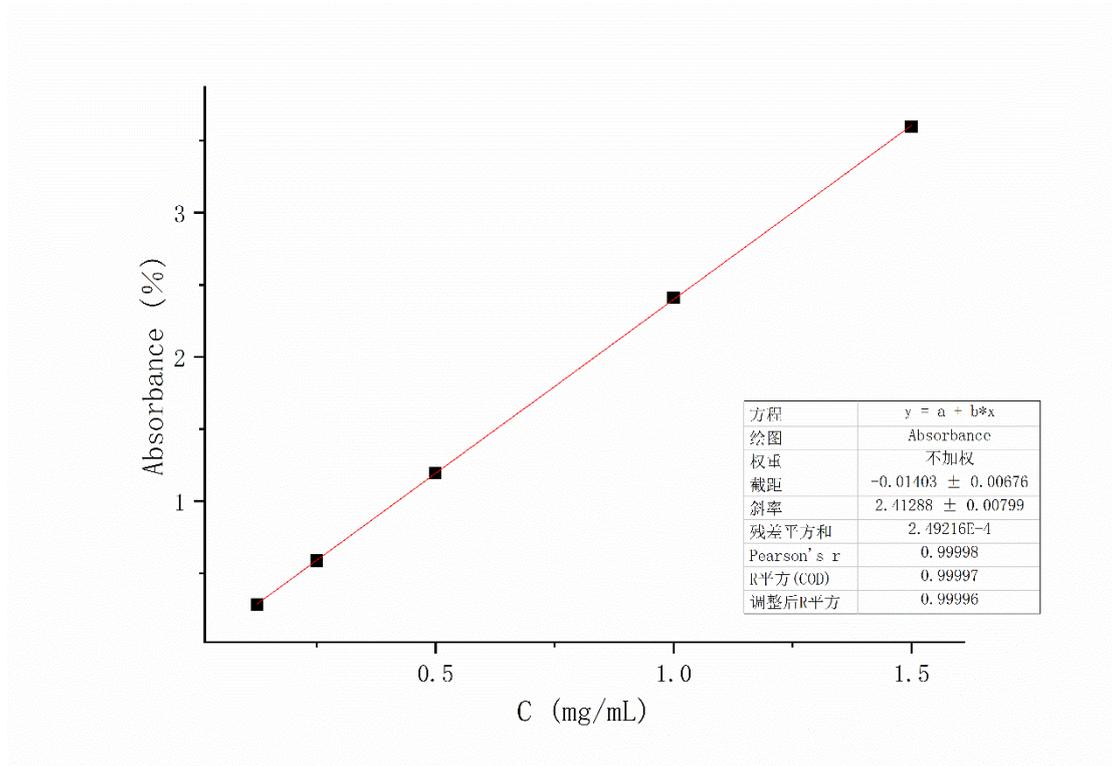
1.1 SA Maximum absorption wavelength



1.2 SA Standard curve

样品 ID	类型	Ex	浓度	WL230.0	注释
0	Unknown		****	0.028	
0	Unknown		****	0.00	
1.1	Unknown		****	0.28	
1.2	Unknown		****	0.275	
1.3	Unknown		****	0.291	
2.1	Unknown		****	0.589	
2.2	Unknown		****	0.576	
2.3	Unknown		****	0.59	
3.1	Unknown		****	1.195	
3.2	Unknown		****	1.206	

3.3	Unknown		****	1.182	
4.1	Unknown		****	2.406	
4.2	Unknown		****	2.421	
4.3	Unknown		****	2.427	
5.1	Unknown		****	3.600	
5.2	Unknown		****	3.594	
5.3	Unknown		****	3.598	



1.3 SA Concentration determination

SAtest1

样品 ID	类型	Ex	浓度	WL230.0	注释
0	Unknown		****	0.021	
0	Unknown		****	0.000	
1,1	Unknown		****	7.712	
1,2	Unknown		****	7.900	
1,3	Unknown		****	7.955	
1,4	Unknown		****	8.249	
1,5	Unknown		****	8.330	
2,1	Unknown		****	6.934	
2,2	Unknown		****	6.893	
2,3	Unknown		****	6.922	
2,4	Unknown		****	7.296	

2,5	Unknown		****	7.566	
3,1	Unknown		****	5.729	
3,2	Unknown		****	5.935	
3,3	Unknown		****	6.166	
3,4	Unknown		****	6.035	
3,5	Unknown		****	6.312	
4,1	Unknown		****	4.357	
4,2	Unknown		****	4.489	
4,3	Unknown		****	4.395	
4,4	Unknown		****	4.310	
4,5	Unknown		****	4.980	
5,1	Unknown		****	4.108	
5,2	Unknown		****	3.957	
5,3	Unknown		****	4.041	
5,4	Unknown		****	3.964	
5,5	Unknown		****	3.777	
6,1	Unknown		****	3.181	
6,2	Unknown		****	3.497	
6,3	Unknown		****	3.480	
6,4	Unknown		****	3.372	
6,5	Unknown		****	3.023	
7,1	Unknown		****	2.573	
7,2	Unknown		****	2.693	
7,3	Unknown		****	2.654	
7,4	Unknown		****	2.863	
7,5	Unknown		****	2.756	

样品 ID	类型	Ex	浓度	WL230.0	注释
0	Unknown		****	0.030	
0	Unknown		****	0.000	
1, 1	Unknown		****	2.219	
1, 2	Unknown		****	2.347	
1, 3	Unknown		****	2.407	
1, 4	Unknown		****	2.629	
1, 5	Unknown		****	2.445	
2, 1	Unknown		****	1.811	
2, 2	Unknown		****	1.579	
2, 3	Unknown		****	2.163	
2, 4	Unknown		****	2.150	
2, 5	Unknown		****	2.018	

3, 1	Unknown		****	1.261	
3, 2	Unknown		****	1.558	
3, 3	Unknown		****	1.279	
3, 4	Unknown		****	1.470	
3, 5	Unknown		****	1.741	
4, 1	Unknown		****	0.830	
4, 2	Unknown		****	0.975	
4, 3	Unknown		****	1.117	
4, 4	Unknown		****	0.881	
4, 5	Unknown		****	1.219	
5, 1	Unknown		****	0.762	
5, 2	Unknown		****	0.435	
5, 3	Unknown		****	0.428	
5, 4	Unknown		****	0.606	
5, 5	Unknown		****	0.862	
6, 1	Unknown		****	0.127	
6, 2	Unknown		****	0.542	
6, 3	Unknown		****	0.292	
6, 4	Unknown		****	0.668	
6, 5	Unknown		****	0.309	
7, 1	Unknown		****	0.463	
7, 2	Unknown		****	0.171	
7, 3	Unknown		****	0.350	
7, 4	Unknown		****	0.003	
7, 5	Unknown		****	0.706	

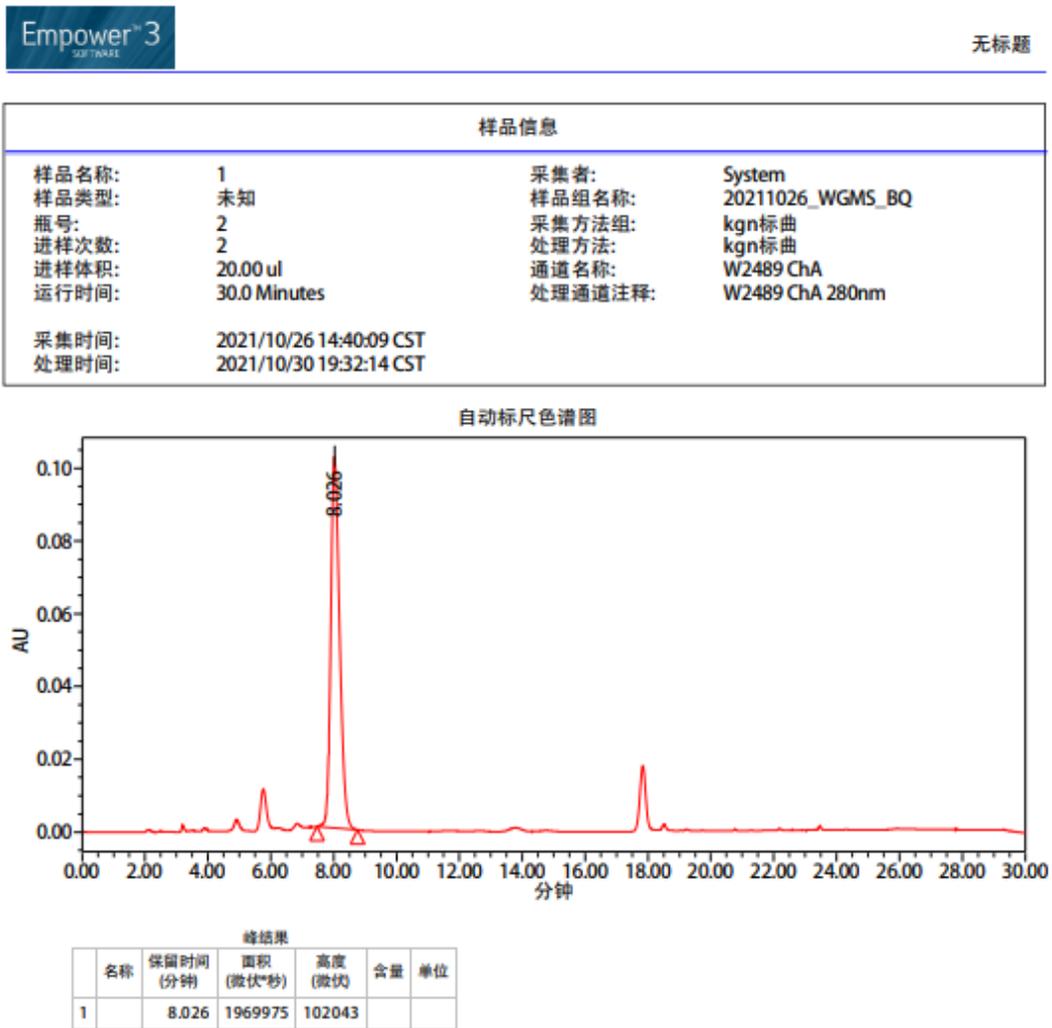
表 test

样品 ID	类型	Ex	浓度	WL230.0	注释
0	Unknown		****	0.033	
0	Unknown		****	0.000	
1, 1	Unknown		****	0.326	
1, 2	Unknown		****	0.078	
1, 3	Unknown		****	0.171	
1, 4	Unknown		****	0.540	
1, 5	Unknown		****	0.253	
2, 1	Unknown		****	0.139	
2, 2	Unknown		****	0.045	
2, 3	Unknown		****	0.410	
2, 4	Unknown		****	0.359	
2, 5	Unknown		****	0.043	
3, 1	Unknown		****	0.215	

3, 2	Unknown		****	0.477	
3, 3	Unknown		****	0.163	
3, 4	Unknown		****	0.130	
3, 5	Unknown		****	0.030	

2. KGN test

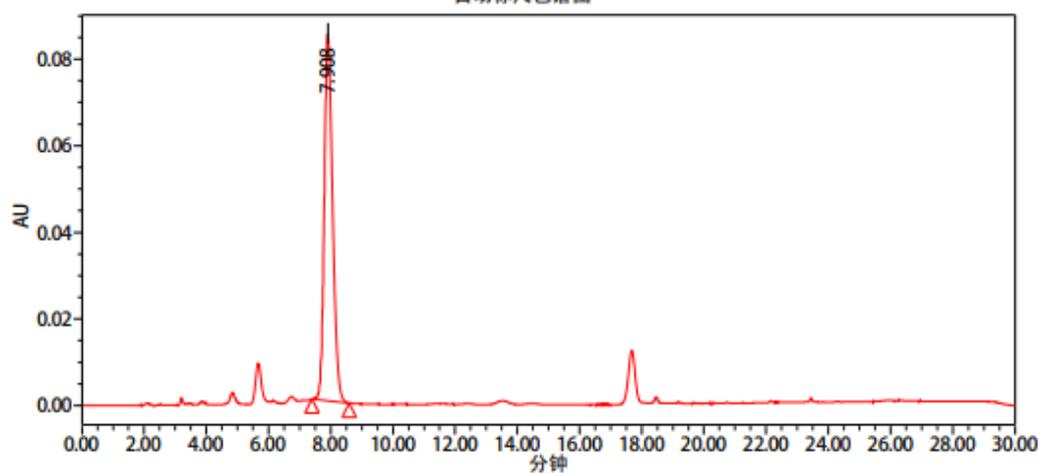
2.1 KGN Standard curve



样品信息

样品名称:	2	采集者:	System
样品类型:	未知	样品组名称:	20211026_WGMS_BQ
瓶号:	3	采集方法组:	kgm标曲
进样次数:	2	处理方法:	kgm标曲
进样体积:	20.00 ul	通道名称:	W2489 ChA
运行时间:	30.0 Minutes	处理通道注释:	W2489 ChA 280nm
采集时间:	2021/10/26 15:41:49 CST		
处理时间:	2021/10/30 19:36:45 CST		

自动标尺色谱图



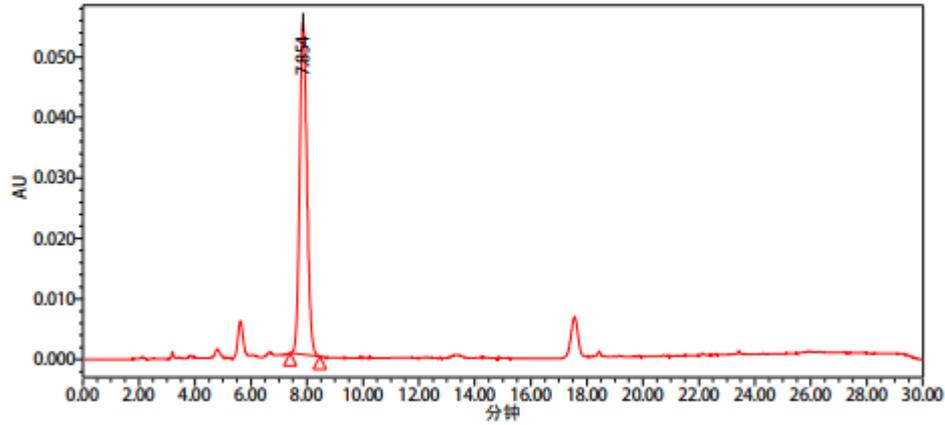
峰结果

名称	保留时间 (分钟)	面积 (微伏*秒)	高度 (微伏)	含量	单位
1	7.908	1579281	84764		

样品信息

样品名称:	3	采集者:	System
样品类型:	未知	样品组名称:	20211026_WGMS_BQ
瓶号:	4	采集方法组:	kgn标曲
进样次数:	2	处理方法:	kgn标曲
进样体积:	20.00 ul	通道名称:	W2489 ChA
运行时间:	30.0 Minutes	处理通道注释:	W2489 ChA 280nm
采集时间:	2021/10/26 16:43:25 CST		
处理时间:	2021/10/30 19:41:04 CST		

自动标尺色谱图



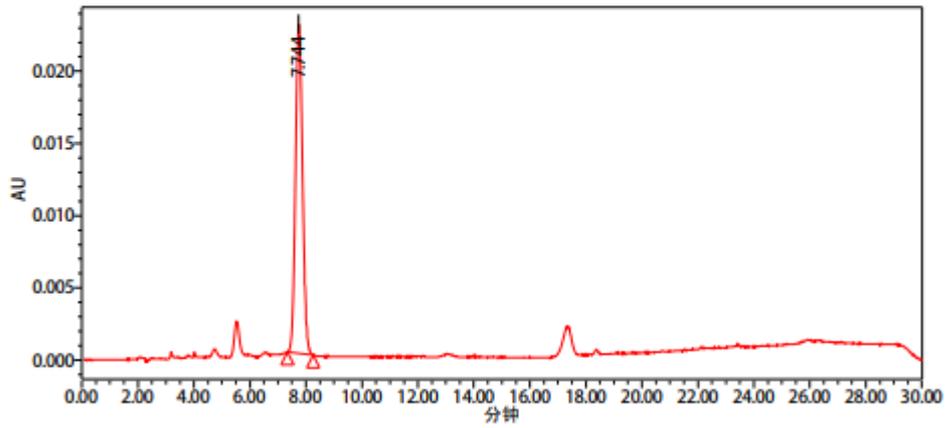
峰结果

名称	保留时间 (分钟)	面积 (微伏*秒)	高度 (微伏)	含量	单位
1	7.854	989106	54915		

样品信息

样品名称:	4	采集者:	System
样品类型:	未知	样品组名称:	20211026_WGMS_BQ
瓶号:	5	采集方法组:	kgn标曲
进样次数:	2	处理方法:	kgn标曲
进样体积:	20.00 ul	通道名称:	W2489 ChA
运行时间:	30.0 Minutes	处理通道注释:	W2489 ChA 280nm
采集时间:	2021/10/26 17:45:02 CST		
处理时间:	2021/10/30 19:47:17 CST		

自动标尺色谱图



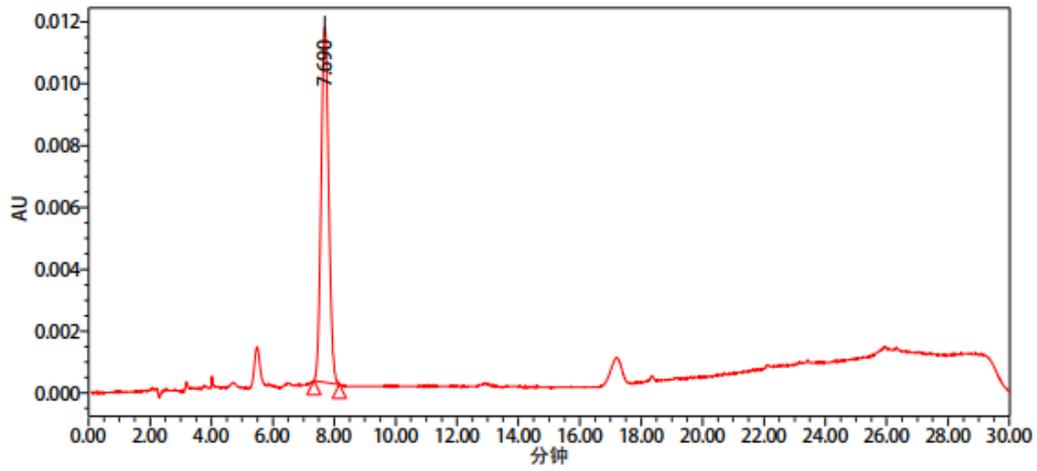
峰结果

名称	保留时间 (分钟)	面积 (微伏*秒)	高度 (微伏)	含量	单位
1	7.744	392613	22802		

样品信息

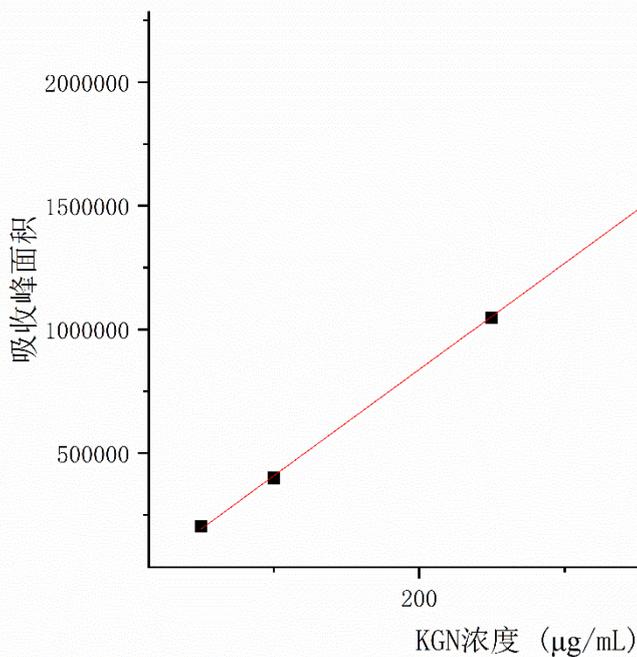
样品名称:	5	采集者:	System
样品类型:	未知	样品组名称:	20211026_WGMS_BQ
瓶号:	6	采集方法组:	kgn标曲
进样次数:	2	处理方法:	kgn标曲
进样体积:	20.00 ul	通道名称:	W2489 ChA
运行时间:	30.0 Minutes	处理通道注释:	W2489 ChA 280nm
采集时间:	2021/10/26 18:46:35 CST		
处理时间:	2021/10/30 19:50:19 CST		

自动标尺色谱图



峰结果

名称	保留时间 (分钟)	面积 (微伏*秒)	高度 (微伏)	含量	单位
1	7.690	192817	11507		



方程	$y = a + b * x$
绘图	吸收峰面积
权重	不加权
截距	21336.26803 ± 8520.36099
斜率	4298.39965 ± 27.35723
残差平方和	3.30052E8
Pearson's r	0.99994
R平方(COD)	0.99988
调整后R平方	0.99981

2.2 kgn data

表 day 1

	名称	保留时间 (分钟)	面积 (微伏*秒)	高度 (微伏)	含量	单位
1		7.694	188753	11103		
2		7.703	231531	13619		
3		7.706	267262	15721		
4		7.707	289052	17003		
5		7.713	206122	12125		

表 day1

	名称	保留时间 (分钟)	面积 (微伏*秒)	高度 (微伏)	含量	单位
1		7.789	210657	12392		
2		7.791	324753	19103		
3		7.795	962403	50653		
4		7.8	924713	48669		
5		7.804	658220	38719		

表 day-2

	名称	保留时间 (分钟)	面积 (微伏*秒)	高度 (微伏)	含量	单位
1		7.835	2386994	119350		
2		7.844	1298768	68356		
3		7.848	1499832	78939		
4		7.776	909788	47884		
5		7.848	1402583	73820		

表 day-3

	名称	保留时间 (分钟)	面积 (微伏*秒)	高度 (微伏)	含量	单位
1		7.865	4440396	222020		
2		7.875	5120927	256046		
3		7.889	5469361	273468		
4		7.899	4630995	231550		
5		7.905	4677964	233898		

表 day-6

	名称	保留时间 (分钟)	面积 (微伏*秒)	高度 (微伏)	含量	单位
1		7.949	6306224	274184		
2		7.954	7596148	330267		
3		7.957	8746707	380292		
4		7.927	6823099	296656		
5		7.949	7814451	339759		

表 day 8

	名称	保留时间 (分钟)	面积 (微伏*秒)	高度 (微伏)	含量	单位
1		8.065	10748542	467328		
2		8.102	11383085	494917		
3		8.13	10754473	467586		
4		8.017	10008733	435162		
5		7.905	9756653	424202		

表 day 10

	名称	保留时间 (分钟)	面积 (微伏*秒)	高度 (微伏)	含量	单位
1		8.139	13080842	568732		
2		8.165	10043452	436672		
3		8.021	10578531	459936		
4		8.065	11599233	504314		
5		8.102	11575465	503281		

表 day 13

	名称	保留时间 (分钟)	面积 (微伏*秒)	高度 (微伏)	含量	单位
1		8.021	10002172	434877		
2		7.954	8981688	390508		
3		7.957	10267106	446396		
4		7.969	11434075	497134		
5		8.17	10127309	440318		

表 day 16

	名称	保留时间 (分钟)	面积 (微伏*秒)	高度 (微伏)	含量	单位

1		7.859	7692936	334475		
2		7.863	7178704	312118		
3		7.905	8568733	372554		
4		7.927	9199951	399998		
5		7.949	7538309	327753		

表 day 19

	名称	保留时间 (分钟)	面积 (微伏*秒)	高度 (微伏)	含量	单位
1		7.732	5369558	244071		
2		7.713	5270324	239560		
3		7.721	6279767	285444		
4		7.699	6704214	304737		
5		7.703	6170492	280477		