Analysis of synthetic route and case correlation of methamphetamine crystals seized by ultra-high-performance liquid chromatography-mass spectrometry (UPLC-MS/MS) and Pearson correlation coefficient method

Shan Liu[a,b,c,d], Yuemeng Chen[a,b*], Fang Wang[c*], Song Bai[c*], JingJie Wu[b]

[a]Guiyang Municipal Public Security Bureau, Guiyang, 550081, China;

[b]Guizhou Police College, Guiyang, 550000, China；

[c]Guizhou Industry Polytechnic College, Guiyang, 550008, China;

[d]State Key Laboratory Breeding Base of Green Pesticide and Agricultural Bioengineering, Key Laboratory of Green Pesticide and Agricultural Bioengineering, Ministry of Education, Guizhou University, Guiyang, 550025, China.

*Corresponding Author: Yuemeng Chen, Fang Wang and Song Bai

Email address: cym13984091203@163.com; wf19970908@163.com; basonmail@163.com

Tel.: (+86)851 86797762 (CYM); (+86)851 84705541 (WF and BS)

Figure captions

Fig S1. Correlation discriminant diagram for samples with synthetic route E

Table captions

Table S1. Acceptable maximum relative standard deviation of ratios of characteristic ions abundance

Table S2. The relative error in t_R for 22 target substances in the QC sample and samples from real cases to be tested

Table S3. The relative error in peak area ratio for 22 target substances in the QC sample and samples from real cases to be tested

Figure

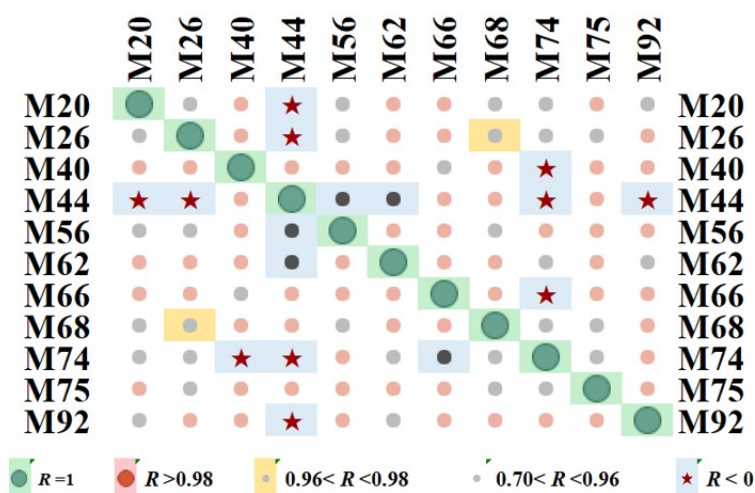Fig S1. Correlation discriminant diagram for samples with synthetic route E

Tables

Table S1. Acceptable maximum relative standard deviation of ratios of characteristic ions abundance

Peak area ratio range	≥50%	20%–50%	10%–20%,	≤10%
Maximum tolerance	±20%	±25%	±30%	±50%

These discrimination factor refer to standard methods (JD/Y JY03.02-2017) [14] and (GA/T 2053-2023)

Table S2. The relative error in t_R for 22 target substances in the QC sample and samples from real cases to be tested

Samples	IM 01	IM 02	IM 03	IM 04	IM 05	IM 06	IM 07	IM 08	IM 09	IM 10	IM 11	IM 12	IM 13	IM 14	IM 15	IM 16	IM 17	IM 18	IM 19	IM 20	IM 21	IM 22
M1	-1.20	-1.07	-0.03	-0.45	—	0.11	—	-0.51	-0.58	-0.30	-0.40	—	—	—	-0.03	—	—	-0.08	-0.22	-0.06	-0.06	—
M2	-1.09	-0.23	-0.03	-0.15	—	0.33	—	-0.28	-	-0.26	0.24	—	—	—	-0.05	—	—	-0.31	-0.02	-0.02	-0.03	-0.07
M3	-0.49	-0.59	0.21	-0.03	—	-0.34	—	0.12	-0.13	—	-0.04	—	—	0.06	-0.02	0.12	—	0.30	-0.05	-0.01	-0.02	-0.07
M4	-0.49	-0.18	-1.35	0.30	—	-0.22	—	-0.05	0.03	0.08	—.07	—	—	—	-0.08	0.02	—	-0.26	-0.05	-0.03	-0.05	-0.20
M5	-0.29	-0.18	0.66	0.12	—	-0.04	—	-0.08	-0.16	-0.16	-0.49	—	—	-0.27	-0.15	-0.08	0.17	-0.29	-0.07	-0.05	-0.04	0.20
M6	-1.77	-1.27	-0.32	-0.85	—	-0.71	—	-0.24	-0.40	—	-0.41	—	1.78	-0.24	-0.18	-0.09	—	-1.73	0.16	0.17	0.13	—
M7	-1.37	-0.44	-0.43	0.05	—	0.14	—	-0.53	-0.34	—	-0.37	—	—	—	-0.15	-0.08	—	-1.25	-0.08	-0.11	-0.11	-0.14
M8	-1.28	-0.36	-1.51	-0.13	—	-0.29	—	0.08	-0.14	—	-0.29	1.01	0.52	0.15	-0.12	-0.20	—	-0.09	-0.17	-0.10	-0.11	-0.22
M9	-0.57	-0.54	-0.41	-0.30	—	0.12	—	0.16	-0.10	—	0.24	—	—	—	-0.12	-0.31	—	0.27	-0.09	-0.09	-0.09	0.02
M10	-0.76	-0.44	-0.49	-0.19	—	-0.44	—	0.07	-0.10	0.23	0.05	—	—	-0.27	-0.15	0.02	-0.08	0.74	-0.11	-0.08	-0.10	-0.16
M11	-1.58	-1.12	-0.07	-0.58	—	-0.34	—	-	-0.32	—	-0.94	—	0.21	-0.24	-0.18	-0.24	—	-0.38	-0.08	-0.08	-0.09	-0.18
M12	-1.44	-1.12	-0.13	-0.45	—	—	—	-0.19	-0.09	—	-0.43	—	—	0.03	-0.18	-0.05	—	-0.82	-0.17	-0.08	-0.09	-0.16
M13	-1.10	-0.62	0.08	0.14	—	—	—	—	-0.27	—	-0.55	—	—	-0.27	-0.12	0.09	—	-0.82	-0.08	—	-0.08	-0.04
M14	-0.76	-0.54	-0.03	-0.52	-0.87	0.68	—	-0.79	0.10	—	-0.46	0.16	—	-0.27	-0.05	-0.12	-0.12	-0.35	-0.09	-0.08	-0.09	0.02
M15	1.77	-0.26	-1.41	2.68	—	-0.54	—	-0.77	1.29	—	0.74	—	—	—	-0.77	0.21	—	0.17	0.03	0.15	0.11	0.27
M16	-1.03	-0.46	-1.34	-0.76	—	—	1.47	—	-1.33	1.01	0.65	—	0.63	-0.17	-0.84	0.21	0.09	0.11	-0.14	—	0.08	0.25
M17	1.97	-0.61	-1.41	-0.88	—	—	1.40	—	-0.94	0.98	0.77	1.17	0.63	—	-0.84	0.24	0.08	—	-0.35	—	0.05	—
M18	1.90	-0.49	-1.28	2.80	—	0.16	-1.76	—	1.18	1.04	-1.59	—	0.67	—	-0.84	0.20	0.06	0.07	-0.27	—	0.09	0.11
M19	1.86	-	-1.21	2.80	—	—	1.50	—	1.23	1.01	0.52	—	-0.71	-0.87	-0.12	-0.14	-0.17	0.06	0.03	—	0.07	—
M20	1.16	-0.42	-1.87	2.23	—	0.03	-0.30	—	-0.87	1.01	0.77	—	-0.48	—	-0.85	0.28	-0.26	0.04	-0.28	—	—	—
M21	-1.98	-1.05	-0.16	-1.85	—	—	-0.83	—	1.26	-0.36	0.81	—	-1.00	0..41	-0.84	-0.28	-0.13	-0.06	-1.23	—	—	—
M22	1.77	1.88	-0.21	-1.35	—	—	-1.09	0.97	1.43	0.73	-0.74	—	-0.37	-0.17	-0.87	-0.12	-0.15	-0.08	0.09	—	-0.36	-0.22
M23	-1.36	1.57	-0.21	-1.05	—	—	0.63	0.81	-1.13	-0.05	-0.52	—	-1.91	0.07	-0.87	-0.41	0.21	-0.08	-0.49	—	-0.22	-0.08
M24	1.86	1.94	-0.34	2.87	0.60	—	1.15	0.97	-1.02	1.05	0.21	—	0.44	—	-0.87	-0.09	0.05	-0.08	-0.30	—	0.03	—
M25	1.07	0.02	-1.90	3.35	—	—	-0.50	—	-0.70	-0.86	-0.07	—	-1.34	-1.57	-0.77	-125	-0.09	-0.37	-0.12	—	-1.26	—
M26	0.86	0.42	-0.16	2.87	—	-1.45	1.16	—	-0.90	0.93	-0.96	—	0.39	-0.63	-0.92	-	0.08	-0.27	-0.14	—	-0.17	—
M27	-1.17	-0.24	-1.47	—	-	-0.58	—	1.36	1.28	0.97	0.94	—	—	—	-0.87	—	—	0.10	-0.03	-1.57	0.07	-0.22
M28	0.83	—	-0.45	1.12	1.16	-0.06	—	1.20	0.72	0.81	0.66	—	—	0.35	-0.17	-0.25	—	-1.05	-0.39	-0.63	-0.33	-0.08
M29	0.93	—	-1.29	—	-0.49	—	—	1.34	1.29	0.84	—	0.82	—	0.36	-0.17	-0.34	—	0.30	—	—	—	—
M30	0.88	—	-1.29	—	0.79	—	—	1.30	0.96	—	—	—	0.38	0.57	-0.19	-0.37	—	0.65	—	—	—	-1.45
M31	-0.65	—	-0.42	—	-0.49	—	—	1.06	1.24	—	—	—	—	0.02	-0.20	—	—	0.18	1.21	—	—	-0.58
M32	-0.34	—	-1.52	0.59	-0.84	—	—	-1.43	0.99	0.76	—	—	1.03	0.17	-0.22	—	—	—	—	—	—	-0.06
M33	-0.29	—	-0.36	0.58	1.51	—	—	1.29	—	0.84	—	—	—	-0.08	—	—	—	—	—	-0.14	—	—
M34	-1.88	-0.11	-0.32	0.63	—	-0.22	-1.76	—	0.95	0.84	—	—	1.01	-0.06	-0.19	—	—	—	-0.82	—	—	—
M35	0.93	—	-0.34	0.21	—	-0.08	1.31	-1.38	0.83	0.84	0.66	—	—	-0.18	-0.18	—	—	0.47	-0.35	0.66	0.94	—
M36	-0.20	-0.19	-1.35	0.66	0.78	—	-1.79	-1.29	0.96	0.77	—	—	—	-0.19	-0.19	0.47	—	0.69	-0.81	—	0.66	—
M37	-1.10	-0.22	-1.42	0.57	—	—	1.22	0.64	0.82	0.84	—	-	-0.12	-0.08	-0.22	0.69	—	—	-0.88	—	—	—
M38	-0.34	—	-1.45	0.28	—	-1.19	1.04	1.40	1.29	0.84	-0.72	—	—	-0.07	-0.22	—	—	-0.22	-0.48	-1.57	-0.72	—
M39	0.88	—	-1.29	—	—	0.75	0.69	1.10	1.15	0.87	-0.43	—	—	0.09	-0.20	1.07	—	-0.08	-0.77	-0.63	-1.43	—
M40	-1.47	1.16	-1.22	-0.70	0.26	0.67	0.71	1.25	1.03	—	-0.64	—	—	0.06	0.21	1.15	0.87	—	-0.09	—	-0.64	0.47
M41	-1.35	—	-1.35	-0.40	—	0.54	—	1.25	1.06	0.84	-1.12	—	—	—	-0.13	—	—	0.21	-1.57	—	-1.12	0.69

Samples	IM 01	IM 02	IM 03	IM 04	IM 05	IM 06	IM 07	IM 08	IM 09	IM 10	IM 11	IM 12	IM 13	IM 14	IM 15	IM 16	IM 17	IM 18	IM 19	IM 20	IM 21	IM 22
M42	1.88	—	-1.22	-0.19	—	-1.28	—	1.36	0.89	-0.35	0.23	—	-0.25	0.14	0.32	—	—	0.12	-0.63	—	-	0.97
M43	-1.87	0.4	-1.29	-0.19	—	0.66	—	—	0.91	-0.24	—	-	—	0.11	0.27	-1.64	—	0.42	-1.45	-1.28	-0.15	—
M44	1.77	0.2	-0.17	-0.19	—	0.61	0.35	1.20	-1.16	—	-0.25	—	-0.25	0.11	0.40	-1.56	-1.27	—	-0.58	0.66	—	—
M45	-1.50	—	-0.14	—	—	—	—	—	0.87	0.52	0.15	—	—	0.11	0.39	—	—	—	—	-1.28	-0.36	—
M46	-1.42	-0.15	-1.79	—	—	-0.96	—	0.85	0.57	0.35	—	—	—	—	0.09	-0.16	—	0.62	0.62	0.66	-0.20	—
M47	1.93	-0.96	-0.04	-0.19	—	—	—	0.79	0.75	—	—	—	—	0.20	-0.19	—	—	-0.22	-0.22	—	-0.21	—
M48	1.93	—	-1.35	-0.19	-0.92	—	—	1.25	0.08	1.09	—	—	—	0.06	-0.18	—	—	-0.08	-0.08	—	-0.36	—
M49	-1.91	0.32	-1.34	-0.19	—	-0.96	1.20	-1.20	1.02	1.25	1.29	—	-0.25	0.25	-0.16	0.35	—	-0.76	-0.76	—	-0.36	—
M50	-1.91	—	-1.35	-0.19	1.24	—	-1.10	1.06	1.08	—	—	—	—	0.39	-0.19	—	—	0.08	0.08	—	-0.34	—
M51	-1.67	—	-1.17	-0.19	-0.15	—	-1.87	1.08	0.97	—	—	—	-0.34	-0.01	-0.08	—	—	-0.16	-0.16	—	-0.32	—
M52	-1.01	0.21	-0.22	-0.19	-0.96	—	1.28	0.74	0.98	0.52	0.15	—	-0.52	0.10	0.22	-0.16	—	-0.72	-0.72	—	-0.36	—
M53	-1.67	—	-0.27	-0.19	-1.04	—	—	1.15	0.77	—	—	—	—	-0.17	-0.19	—	—	-0.43	-0.43	—	—	—
M54	-1.43	-1.10	-0.42	-0.19	1.04	—	—	1.25	1.02	—	—	—	—	0.01	-0.08	—	—	-0.64	—	—	-0.36	—
M55	-1.61	-0.45	-0.34	-0.19	-0.92	—	—	1.03	1.06	—	-0.34	-	—	—	-0.13	1.02	—	-1.12	-0.94	—	-0.38	0.98
M56	-1.37	-0.01	-0.34	-0.38	—	0.34	0.63	1.17	1.02	0.85	-0.52	—	-0.16	-0.32	-0.19	-0.22		0.34	-0.25	—	-0.34	—
M57	1.64	-1.73	-0.29	-0.19	—	-0.55	0.69	1.25	0.80	-0.37	—	—	—	-0.29	-0.24	-0.28	—	-0.55	-0.58	—	-0.26	—
M58	0.93	-1.56	-0.27	-0.19	—	-0.94	-0.68	1.25	1.29	0.91	—	—	—	0.06	-0.12	-	—	-0.94	-0.53	-0.35	-0.32	—
M59	-1.56	-1.64	-0.10	-0.19	—	-1.21	—	0.97	-1.36	0.63	—	—	—	0.12	-0.16	-0.18	—	-1.10	-0.94	-0.41	-0.33	-1.10
M60	—	-0.56	-1.45	-0.19	—	0.22	-0.06	-1.48	1.06	1.24	—	—	—	0.42	-0.19	-0.28	—	0.22	—	-0.41	-0.36	0.22
M61	-0.87	-1.00	-1.33	-0.19	—	-1.24	0.85	1.15	1.02	1.02	—	—	—	—	-0.19	0.20	—	-1.02	-0.20	-0.37	-0.36	-1.10
M62	-0.86	-0.91	-0.29	-0.49	—	-0.94	0.35	1.29	0.84	0.84	-0.52	—	-0.18	0.12	-0.20	-0.28	-1.64	—	—	—	-0.36	—
M63	-1.04	—	-1.40	-0.19	1.13	-0.25	0.69	1.25	—	0.85	—	—	-0.28	0.24	-0.22	—	-1.56	-0.25	-0.38	-0.38	-0.36	0.78
M64	-0.74	—	-0.45	-0.19	—	-0.58	-0.96	—	1.11	0.78	-0.13	—	0.20	0.21	-0.23	-0.82	—	-0.58	-0.40	-0.40	-0.36	—
M65	0.83	—	-0.48	-0.19	—	-0.53	—	-0.13	0.77	0.78	-1.51	—	—	0.28	-0.23	—	—	-0.53	-0.11	-0.11	-0.38	—
M66	-1.13	-1.13	-0.45	-1.13	—	0.15	0.35	-1.51	1.24	—	-0.46	—	-0.38	0.20	-0.20	0.28	-0.23	—	-0.53	—	—	—
M67	0.93	—	-0.45	—	-1.13	—	—	-0.46	1.02	—	—	—	—	—	0.24	-0.20	—	—	—	—	—	—
M68	-0.62	0.77	-1.48	-1.17	—	-1.21	-0.34	—	1.13	-0.87	-0.41	0.21	-0.08	—	-0.23	-0.87	-0.41	0.21	-0.08	—	—	—
M69	-0.31	1.24	-0.36	—	-0.34	-0.82	-0.52	-1.25	1.20	—	—	0.82	—	0.15	-0.25	—	—	-0.38	-0.38	—	—	—
M70	-1.83	—	—	—	-0.52	—	—	1.25	0.80	0.87	-0.20	—	—	-0.09	-0.14	-1.64	—	—	—	—	—	—
M71	1.97	-1.13	-0.10	-0.19	—	0.94	0.35	1.20	1.06	0.90	-0.23	—	—	-0.06	-0.10	-1.56	—	-0.08	-0.49	-0.11	-0.22	—
M72	-0.36	—	-1.21	—	-0.20	—	—	1.43	-1.13	-0.05	—	—	—	0.49	-0.87	—	—	-0.34	—	—	-0.10	-1.56
M73	1.86	—	-1.34	—	-0.23	—	—	-1.25	-1.02	1.05	—	—	—	0.49	-0.87	—	—	-0.52	—	—	—	—
M74	-1.98	-0.10	-1.16	0.77	—	0.52	0.15	—	1.26	-0.36	0.81	—	-1.64	—	-0.84	-0.96	-0.29	—	-0.13	—	—	—
M75	1.77	-0.09	-1.21	1.24	—	0.52	0.15	-1.15	1.43	0.73	-0.74	—	-1.56	0.49	-0.87	0.05	-0.52	—	-1.51	—	—	0.23
M76	0.07	-0.10	-1.90	—	—	-0.38	—	1.30	-0.20	-0.86	-0.07	—	—	0.53	-0.77	-0.38	—	—	-0.46	0.49	-0.87	0.23
M77	1.86	—	-1.16	—	—	—	-1.13	—	-0.90	0.93	-0.96	-	—	0.54	-0.92	—	—	-0.16	—	—	—	0.23
M78	-0.76	0.77	0.30	-0.19	—	-0.96	-0.29	0.07	-0.10	-1.98	0.05	—	—	—	-0.15	-0.34	—	-0.07	-0.11	-0.08	-0.10	—
M79	-1.58	1.24	-0.07	-0.19	—	0.05	-0.52	-1.13	-0.32	-1.13	-0.94	—	-1.13	—	-0.18	-0.52	—	-0.07	-0.08	-0.08	-0.09	—

Samples	IM 01	IM 02	IM 03	IM 04	IM 05	IM 06	IM 07	IM 08	IM 09	IM 10	IM 11	IM 12	IM 13	IM 14	IM 15	IM 16	IM 17	IM 18	IM 19	IM 20	IM 21	IM 22
M80	1.86	-0.83	-1.21	-0.87	0.8	—	1.50	-1.04	1.23	1.06	0.52	—	0.26	-0.08	-0.92	-0.86	—	—	-0.86	—	—	—
M81	0.16	-0.40	-1.87	-0.19	—	-0.08	-1.06	-1.20	-0.87	1.01	0.77	—	—	-0.26	-0.85	—	—	0.04	-0.28	0.08	0.05	0.23
M82	-1.09	-0.04	-0.03	-0.19	—	-0.26	—	-0.28	-0.08	1.01	0.24	—	—	—	-0.05	—	—	0.02	-0.02	-0.02	—	-0.07
M83	-0.10	—	0.04	-0.19	—	—	0.92	—	-0.27	-0.26	-0.55	—	-0.27	—	-0.12	—	—	-0.07	-0.05	—	-0.08	—
M84	-0.76	-0.86	-0.03	-0.19	0.48	—	-1.00	—	0.10	-0.94	-0.46	—	-0.39	—	-0.05	-0.47	—	-0.06	—	—	-0.26	0.78
M85	-0.29	—	0.34	-0.19	—	—	0.32	-0.08	-0.16	-0.25	-0.49	—	0.03	—	-0.05	-1.21	—	-0.02	—	—	-0.08	—
M86	-1.44	-0.86	-0.13	-0.19	—	—	-1.24	-0.19	-0.09	-0.58	-0.43	—	-0.35	—	-0.18	-0.82	—	-0.09	-0.87	—	—	0.66
M87	1.77	—	-2.41	-0.19	—	1.10	—	1.43	1.29	0.20	0.74	—	—	—	-0.77	—	—	0.17	—	-0.05	—	—
M88	-0.87	—	-2.30	-0.19	—	0.86	-1.34	1.15	-0.83	0.90	0.52	—	-0.83	—	-0.77	—	—	0.18	-0.06	—	0.63	-1.18
M89	-1.77	—	-0.32	-0.19	—	—	0.13	-0.24	-0.40	0.97	-0.41	—	1.69	-0.05	0.03	0.63	-1.18	0.15	0.16	—	—	—
M90	-1.37	—	0.26	-0.19	—	0.14	-0.57	-0.53	-0.04	-0.53	-0.37	—	—	—	-0.15	-0.05	—	-0.09	-0.08	—	0.59	-0.05
M91	-1.28	-0.83	0.87	-0.16	—	-0.29	-0.86	0.08	-0.14	0.15	-0.29	—	—	-0.87	-0.12	—	—	—	-0.17	-0.10	—	—
M92	-0.57	1.69	0.96	-0.86	—	0.12	0.10	—	-0.10	-0.47	0.24	—	0.59	—	-0.12	———	—	-0.07	-0.09	—	—	0.02
M93	0.86	-0.25	-1.34	-0.16	-0.94	0.87	1.29	-0.94	1.52	-0.02	0.48	0.63	-1.18	0.37	—	—	—	—	-0.19	0.09	—	0.21
M94	-0.05	-0.58	-1.34	—	-1.21	0.96	-1.01	-1.21	-0.71	1.01	—	—	—	-0.19	—	—	—	-0.87	-0.13	0.09	—	0.18
M95	-0.49	-0.53	0.77	—	0.12	—	-0.47	0.12	-0.13	1.01	—	—	—	-0.16	-0.02	0.12	—	—	-0.05	-0.01	—	-0.07
M96	-0.49	—	1.58	—	-0.05	—	—	-0.05	0.03	-	—	—	—	-0.27	-0.08	0.02	—	—	-0.05	-0.03		—
M97	-1.87	—	-1.30	—	1.15	—	—	1.15	-0.83	0.08	—	—	-0.87	-0.27	—	0.13	—	—	-0.06	0.12	—	0.23
M98	0.77	-1.02	-1.34	—	0.81	—	—	0.81	1.11	0.97	—	—	—	-0.24	-0.79	0.27	—	—	—	0.12	—	0.25
M99	0.77	—	-1.47	—	0.90	—	—	0.90	-0.77	0.97	—	—	-0.47	0.03	-0.79	0.16	—	—	0.02	0.11	-0.86	0.06
M100	1.58	—	-2.53	—	1.39	—	-0.08	1.39	-1.10	0.97	—	—	-1.21	0.21	-0.84	0.14	—	—	-0.07	0.09	—	—
M101	-1.83	-1.02	-0.47	—	0.66	0.66	-0.26	0.66	-0.91	0.94	—	—	-0.82	0.57	-0.82	0.15	—	—	-0.02	0.11	—	0.11
M102	-1.64	-0.09	-0.13	—	0.98	—	—	0.98	1.11	1.01	—	—	—	-0.62	-0.20	-0.19	—	—	-0.07	0.12	-0.86	-0.48
M103	1.86	0.89	-1.34	—	0.59	-0.08	0.12	0.59	-1.29	0.39	—	—	—	-0.30	-0.84	—	—	-0.83	-0.06	0.06	1.06	0.07
M104	-0.84	0.39	-1.21	—	2.01	-0.26	—	2.01	1.03	0.97	—	—	—	-0.24	-0.86	—	—	1.69	-0.11	0.42	-0.30	—
M105	0.71	-0.49	-0.82	—	—	—	—	1.89	-0.41	1.85	—	—	—	-0.13	1.06	0.11	-0.87	—	—	0.10	-0.86	—
M106	0.55	—	-1.18	—	-0.87	—	—	-0.87	1.02	1.92	-0.79	—	-0.08	0.35	-0.30	0.06	—	—	0.09	0.20	—	0.35
M107	1.17	—	0.76	—	1.72	—	—	1.72	-0.75	1.71	—	—	-0.26	0.60	—	—	—	—	-0.08	-0.04	—	0.60
M108	1.74	—	-0.44	—	1.93	0.63	-1.18	1.93	0.15	1.89	—	—	—	-0.21	—	-0.58	—	—	-0.03	-0.39	—	—
M109	1.44	-0.83	2.00	—	1.01	0.63	-1.18	0.01	1.20	-0.47	—	—	—	-0.14	-0.86	0.68	—	—	-0.10	-0.67	—	—
M110	1.50	—	1.95	—	0.10	—	—	0.10	1.07	-0.83	—	0.63	-1.18	0.57	—	-0.77	—	—	—	0.43	-0.08	0.23
M111	1.17	—	0.75	—	4.53	—	—	1.53	1.42	1.69	—	—	—	0.62	9.58	—	—	-0.83	1.06	0.24	-0.26	0.19
M112	-1.17	-1.02	-1.02	—	-0.75	—	—	-0.75	0.02	-1.02	—	—	-0.86	0.16	-0.79	-0.35	—	1.69	0.27	0.42	—	0.29
M113	-0.64	—	0.70	—	-0.44	—	0.66	-0.44	-0.02	1.90	—	—	—	0.37	-0.26	0.02	—	—	-1.02	-0.03	-0.08	-0.09
M114	1.50	—	1.56	—	2.00	—	—	1.00	-0.06	-1.19	—	—	1.71	0.59	1.08	-0.26	—	—	-0.09	0.52	—	-0.77
M115	1.17	-0.25	-0.78	—	1.95	—	0.59	1.95	-1.68	1.71	—	—	1.89	0.11	—	-0.15	—	—	-0.06	0.24	-0.25	0.28
M116	0.60	-0.58	1.56	—	1.85	—	—	1.85	1.07	1.84	—	—	—	0.40	—	0.12	—	—	-0.15	-0.73	-0.58	0.23

Samples	IM 01	IM 02	IM 03	IM 04	IM 05	IM 06	IM 07	IM 08	IM 09	IM 10	IM 11	IM 12	IM 13	IM 14	IM 15	IM 16	IM 17	IM 18	IM 19	IM 20	IM 21	IM 22
M117	1.55	-0.53	-1.19	—	1.76	—	—	1.76	0.22	1.65	—	—	—	-0.41	0.66	—	—	0.66	-0.09	-0.59	-0.53	—
M118	1.77	—	1.58	—	1.04	-0.54	—	1.04	-0.48	-0.91	—	—	-0.55	-0.49	1.07	0.09	—	—	-0.35	0.43	0.31	0.32
M119	0.44	-0.58	-0.34	—	-0.72	—	—	-0.72	-1.11	10	—	—	—	0.27	1.07	—	—	-0.58	-0.37	0.48	—	0.32
M120	0.69	—	-1.13	—	-0.67	—	—	-0.67	1.04	1.96	—	—	—	-0.35	1.04	-0.13	—	—	-0.26	-0.70	0.01	0.24
M121	0.01	—	-1.29	—	-1.26	-0.43	-0.26	-1.26	-1.07	1.93	—	—	—	-0.41	1.06	-0.03	—	—	-0.24	0.48	-0.71	—
M122	1.50	—	-0.46	—	-1.84	—	—	-1.84	-0.36	1.86	—	—	—	-0.08	—	-0.64	—	1.50	-0.09	0.34	—	-0.11
M123	0.74	—	-0.74	—	-1.03	—	—	-1.03	1.02	1.88	—	—	-0.58	-0.70	—	-1.15	—	—	-0.17	-0.73	—	0.32
M124	-0.63	-0.55	-0.30	—	1.89	—	-0.26	1.89	1.02	1.76	—	—	—	-0.49	—	-1.10	—	—	-0.09	-0.71	0.42	0.58
M125	1.36	—	1.54	—	1.05	—	-1.46	1.05	1.95	-0.54	—	—	—	-0.52	1.03	-0.02	—	—	-0.12	0.42	-0.69	—
M126	1.55	—	-1.20	—	1.60	—	-0.44	1.60	0.18	1.80	—	—	—	-0.38	-0.78	-0.69	—	—	-0.50	0.44	0.68	—_
M127	1.46	—	1.58	—	-0.73	1.98	1.82	-0.73	0.38	1.83	—	—	-0.61	-0.38	—	-0.05	—	—	-0.37	-0.71	-0.71	-0.08
M128	1.55	—	0.24	—	1.94	—	-0.20	1.94	-0.02	1.75	—	—	-0.23	-0.81	1.07	0.18	—	—	-0.18	0.25	0.07	0.28
M129	-1.47	—	1.54	—	1.94	-0.61	-1.56	1.94	1.07	1.75	—	—	—	0.08	1.06	0.12	—	-0.62	-0.12	-0.74	-0.10	-1.01
M130	0.38	1.66	-0.91	—	-0.12	-0.23	—	-0.12	1.02	1.80	—	—	—	0.02	0.08	0.16	—	—	-0.19	0.47	0.22	-0.76
M131	0.65	-1.76	1.42	—	—	—	—	1.02	1.98	1.71	—	—	—	-0.04	—	0.55	—	—	-0.01	0.42	-0.71	-0.05
M132	0.50	1.21	-1.23	—	1.99	—	-0.35	1.99	1.98	1.75	—	—	1.50	-0.49	—	-0.11	—	-0.68	-0.62	0.41	—	—
M133	0.58	1.48	0.07	—	1.79	-0.58	—	1.79	-0.79	1.71	—	—	—	-0.52	-0.59	0.22	—	—	-0.28	-0.73	0.02	—
M134	1.69	-1.18	-0.38	—	-0.25	—	—	-0.25	1.98	1.60	-0.55	—	—	0.12	—	—	—	-0.08	-0.39	0.23	-0.73	-0.59
M135	0.34	-1.19	1.53	—	1.93	—	—	1.93	0.01	1.72	—	—	—	-0.26	1.04	-0.11	—	-0.26	-0.04	0.41	—	—
M136	0.44	0.66	-1.60	—	-0.19	—	—	-0.19	-0.23	1.75	—	—	—	-0.05	1.04	-0.07	—	-0.29	-0.37	—	—	—
M137	1.31	—	-1.00	—	-0.05	—	—	-0.05	0.07	1.61	—	—	—	-0.88	1.04	0.55	—	-0.08	0.23	—	—	—
M138	1.50	—	-1.16	—	-0.62	—	—	-0.62	1.98	-	—	—	-0.73	-0.68	—	0.02	—	—	-0.17	-0.72	-0.43	-0.26
M139	1.31	—	1.39	—	0.05	-0.55	—	0.05	-1.24	-0.81	—	—	—	-0.76	-0.61	-0.55	—	-0.87	0.68	0.45	—	—
M140	-1.25	—	-0.50	-0.16	0.01	—	1.88	0.01	-0.58	1.71	—	—	-0.59	-0.74	-0.23	-1.26	—	0.27	-0.16	—	—	1.68
M141	1.55	-0.73	-0.39	—	-1.01	1.50	—	-1.01	-0.03	1.92	—	—	—	0.07	—	-1.24	—	—	-0.34	-0.04	—	—
M142	0.31	—	1.56	—	-0.32	—	1.88	-0.32	-0.35	0.01	—	—	—	-0.77	-	-0.29	—	—	-0.34	0.55	—	-0.59
M143	1.64	—	-0.78	—	1.82	—	—	—	-0.65	1.88	—	—	—	-1.27	—	-0.62	—	-0.62	0.10	0.42	0.31	-0.02
M144	0.74	—	1.56	—	1.10	—	-0.08	1.10	-0.18	1.74	—	—	—	-0.44	-0.87	-0.29	—	—	0.06	—	0.34	-0.01
M145	1.12	—	-1.19	—	1.93	-0.55	-0.26	1.93	-1.31	1.63	—	0.35	—	-0.13	0.27	0.30	—	—	-0.80	0.01	0.29	0.34
M146	-0.01	—	1.58	—	1.86	—	-0.29	1.86	-0.58	1.68	—	—	-0.29	-1.29	—	-0.19	—	-0.18	-0.32	0.44	0.44	—
M147	-0..55	—	-0.34	—	0.14	-0.43	-0.26	0.14	-0.69	1.71	0.35	—	—	-0.49	-0.83	-0.30	—	—	-0.15	0.46	—	—
M148	-0..36	—	-1.13	—	1.08	—	—	1.08	0.40	1.04	—	—	—	-0.52	-0.97	-0.10	—	-0.59	0.05	—	1.68	-0.65
M149	-0..52	—	-1.29	—	-0.34	—	—	-0.34	1.05	1.11	—	—	—	-0.05	-0.57	-1.10	—	—	-0.11	-0.69	—	-0.80
M150	-1.46	—	-0.46	—	-0.57	—	—	-0.57	0.32	1.76	—	—	-1.08	-0.08	—	-1.47	—	-0.59	0.07	-0.32	0.24	0.35
M151	-1..64	—	-0.74	—	0.43	—	—	5.43	0.41	1.75	—	—	—	0.37	-0.58	1.45	—	—	-0.18	0.25	1.81	1.23
M152	-1.88	—	-0.30	—	-1.08	—	—	-1.08	0.24	0.20	—	—	—	-0.06	—	-0.27	—	-0.62	—	-0.64	-0.64	0.32
M153	0.55	—	1.54	—	-0.71	1.64	—	-0.71	0.31	1.86	—	—	—	-0.02	1.11	-0.10	—	—	-0.09	-0.64	-0.64	—
M154	0.83	-0.55	-1.20	—	2.00	—	-0.62	2.00	1.01	1.67	—	—	—	0.21	-0.72	0.24	—	-0.62	-0.15	—	0.48	0.29

Samples	IM01	IM02	IM03	IM04	IM05	IM06	IM07	IM08	IM09	IM10	IM11	IM12	IM13	IM14	IM15	IM16	IM17	IM18	IM19	IM20	IM21	IM22
M155	-1.98	—	1.58	—	-0.29	—	-0.75	-0.29	1.08	1.67	—	—	-0.48	0.11	1.14	-0.20	—	-0.75	-0.10	—	0.47	0.31
M156	0.65	—	0.24	—	0.21	—	-0.71	0.21	-0.79	—	—	—	—	-0.69	-0.65	-0.18	—	-0.71	-0.33	-0.62	—	0.30
M157	0.79	—	1.54	—	-0.46	0.26	—	-0.46	0.08	1.67	—	—	—	1.80	—	-0.08	—	—	-0.17	0.56	—	0.31
M158	1.98	—	-0.91	—	-0.22	—	—	-0.22	0.15	1.66	—	—	—	0.82	-0.52	-0.17	—	-0.48	—	-0.63	—	—
M159	-1.79	—	1.42	-0.16	-1.08	1.75	—	-1.08	1.97	1.16	—	—	-0.07	-0.17	-0.26	-0.45	—	-0.43	-0.30	-0.60	0.50	—
M160	-1.64	-0.78	-1.23	—	0.12	0.01	—	0.12	-0.36	-1.14	—	—	0.57	-0.04	0.26	1.62	—	-1.09	-0.08	0.53	0.45	-0.34
M161	-0.88	-0.10	0.07	—	1.03	-0.71	—	1.03	1.05	-1.46	—	1.68	—	-0.69	1.13	0.23	—	—	-0.11	0.44	0.42	—
M162	-0.55	0.48	-0.38	—	1.05	—	-0.90	1.05	1.05	1.81	—	—	-0.75	-0.80	1.11	-0.32	—	-0.90	-0.11	-0.62	0.46	—
M163	-0.88	-0.67	1.53	—	1.99	—	—	1.99	1.95	1.96	—	—	-0.71	0.38	-0.72	-0.99	—	—	-0.34	-0.14	0.18	—
M164	0.93	0.66	-1.60	—	0.08	—	-0.72	0.08	0.32	1.83	—	1.39	—	0.50	-0.70	0.02	—	—	-0.68	0.38	0.38	-1.08
M165	0.64	0.17	-1.00	-0.16	-0.08	—	—	-0.08	0.28	1.69	—	—	—	0.17	-0.60	0.23	—	—	0.13	-0.66	-0.66	—
M166	1.79	-1.14	-1.16	—	-1.93	—	-0.76	-1.93	1.05	1.67	—	—	—	-0.04	-0.72	-1.30	—	-1.08	0.40	0.46	—	1.39
M167	1.74	-1.51	1.39	—	1.03	-1.05	—	1.03	-0.31	1.92	—	—	—	0.04	-0.76	1.03	—	—	0.05	-0.63	0.37	—
M168	1.84	-1.12	-0.50	—	1.06	-0.25	—	0.06	0.19	1.63	—	—	—	0.06	—	0.06	—	1.68	0.29	-0.62	-0.64	—
M169	1.83	1.20	-0.39	—	1.00	-0.71	-0.90	2.00	1.01	1.60	—	—	-1.08	-0.70	-0.72	0.24	—	—	-0.15	-0.64	0.48	-0.63

IM: Target; "—", unpeaked; when the relative error value is 0, it is indicated by "/".

Table S3. The relative error in peak area ratio for 22 target substances in the QC sample and samples from real cases to be tested

Samples	IM01	IM02	IM03	IM04	IM05	IM06	IM07	IM08	IM09	IM10	IM11	IM12	IM13	IM14	IM15	IM16	IM17	IM18	IM19	IM20	IM21	IM22
M1	-1.73	-1.89	-0.55	-0.14	—	3.07	—	3.39	0.28	1.91	0.11	—	—	—	-2.11	—	—	3.83	-2.91	-0.06	1.06	—
M2	-0.96	4.58	0.36	-0.35	—	-3.32	—	9.11	-8.10	5.65	-0.02	—	—	—	-2.00	—	—	3.19	-9.82	2.84	-0.56	-2.54
M3	-1.69	0.21	0.05	1.13	—	5.86	—	-0.71	-4.62	—	17.90	—	—	1.91	3.20	-	—	-1.29	1.14	11.90	-	-9.11
M4	-0.11	-2.55	-1.00	-0.83	—	-	—	-1.46	-2.08	6.00	—2	—	—	—	1.66	-3.21	—	4.49	-0.91	7.69	-	0.55
M5	-1.27	-1.21	-0.61	2.38	—	-	—	15.6	0.58	3.82	-0.29	—	—	1.91	2.20	6.54	9.78	2.38	2.80	9.94	-	11.1
M6	1.43	0.25	1.01	-0.74	—	-1.85	—	7.41	-1.82	—	3.24	—	6.22	5.65	0.05	-6.87	—	0.34	3.11	11.59	-7.43	0.08
M7	-1.79	0.56	0.88	13.0	—	-2.44	—	2.82	5.17	—	-2.85	—	—	—	-1.31	-9.37	—	3.34	-0.94	12.65	-9.38	—
M8	-2.24	0.94	0.49	4.10	—	-0.19	—	1.00	-9.39	—	8.08	3.7	-	4.13	4.30	-2.86	—	1.98	0.45	11.87	-	10.6
M9	-2.18	-0.67	-0.10	-1.22	—	3.53	—	4.89	6.46	—	-1.50	—	—	—	4.00	-2.65	—	0.32	1.35	14.58	-	-
M10	-1.21	-0.94	-1.90	1.18	—	-	—	13.3	-0.53	1.84	-1.13	—	—	3.04	2.28	0.86	—	3.07	3.85	12.03	-	3.35
M11	-2.22	0.82	-0.23	1.33	—	8.95	—	-3.77	1.60	—	-4.40	—	9.78	3.54	4.81	-5.49	—	4.24	0.55	13.83	-	3.32
M12	-1.60	-1.55	-1.36	3.20	—	—	—	3.39	1.58	—	-6.37	—	—	-6.30	-0.32	14.3	—	2.70	2.97	10.10	-	-0.83
M13	-1.00	-3.72	-1.88	1.60	—	—	—	—	-0.30	—	-4.50	—	—	-4.27	0.84	-2.42	—	5.59	4.78	—	-4.47	2.68
M14	-3.15	-1.54	-0.08	2.99	3.77	-2.22	—	-	3.91	—	3.37	9.7	—	3.45	-3.97	13.8	9.78	4.32	0.21	10.58	-9.61	-5.04
M15	-4.90	-2.19	1.80	2.02	—	-1.60	—	-	1.25	—	5.42	—	—	—	10.86	-1.11	—	3.01	-1.01	10.25	-8.28	18.9
M16	-1.78	-0.83	-6.21	7220	—	—	8.99	—	1.31	5.39	-1.45	—	4.28	6.00	-	0.43	0.91	-18.70	4.34	—	-5.71	-9.23
M17	-2.33	2.68	-1.15	-3.30	—	—	-4.19	—	0.01	6.20	-3.59	1.9	3.72	—	4.13	2.62	1.01	—	-1.46	—	-5.27	—
M18	1.31	16.8	4.09	-1.83	—	4.66	9.17	—	4.51	5.38	-0.46	—	3.25	—	-	-4.68	3.27	-20.39	3.43	—	-5.04	-8.02

Samples	IM01	IM02	IM03	IM04	IM05	IM06	IM07	IM08	IM09	IM10	IM11	IM12	IM13	IM14	IM15	IM16	IM17	IM18	IM19	IM20	IM21	IM22
M19	-0.77	-2.54	-5.55	-6.06	—	—	-2.31	—	8.62	3.71	1.38	—	-	5.76	-1.26	1.43	-6.05	4.30	7.34	—	-6.85	—
M20	-1.46	-9.11	5.59	11.0	—	1.77	-6.35	—	6.73	6.10	-0.87	—	0.70	—	-	1.15	7.13	5.45	4.45	—	—	—
M21	-0.68	0.55	15.84	2.32	—	—	-1.91	—	-0.35	4.42	-0.94	—	5.25	19.24	-6.66	-1.82	-4.94	-0.12	3.18	—	—	—
M22	-	13.9	7.90	2.86	—	—	2.30	0.05	-5.06	5.38	-3.37	5.5	10.4	-0.41	-1.17	-	-0.23	-2.10	5.07	—	6.77	0.38
M23	0.63	-	8.63	9.56	—	—	-5.61	-2.24	-9.15	4.04	-4.27	—	3.33	20.40	-7.12	1.91	-1.82	-14.64	6.00	—	5.59	-
M24	5.42	0.86	9.78	6.90	10.7	—	-1.12	3.73	-6.78	3.69	-1.84	—	0.10	—	-3.17	5.65	17.9	17.06	14.28	—	11.92	—
M25	-0.43	-5.49	-5.06	7.36	—	—	-4.64	—	-9.47	2.35	-5.85	—	1.65	7.98	-9.03	-	23.8	7.25	-0.93	—	5.02	—
M26	0.51	-1.00	-1.95	-0.13	—	19.2	3.44	—	0.04	6.03	10.44	—	-	0.77	-9.33	-	4.64	23.34	-2.76	—	6.08	—
M27	0.84	—	—	—	5.61	-0.41	—	2.61	-0.51	4.05	-0.41	—	—	—	-2.91	—	—	4.15	8.17	6.14	-4.37	8.63
M28	7.13	2.65	5.01	13.3	-7.16	20.4	—	6.37	-2.19	4.62	-6.84	—	—	2.98	-3.09	-0.77	—	-1.23	-1.27	0.70	6.77	9.78
M29	6.55	—	12.31	—	-8.18	—	—	10.7	9.23	7.23	—	3.6	—	3.74	-4.48	-2.37	—	7.93	—	—	—	—
M30	0.41	—	-1.19	—	-5.47	—	—	13.7	0.77	—	—	—	9.16	3.80	-3.90	-1.24	—	0.20	—	—	—	10.2
M31	2.98	—	4.13	—	-1.90	—	—	-2.12	10.5	—	—	—	—	2.73	-3.98	—	—	5.11	-2.24	—	—	19.2
M32	0.31	—	-0.48	4.15	0.30	—	—	3.98	18.0	5.79	—	—	10.2	-1.01	-0.64	—	—	—	—	—	—	-0.41
M33	-2.40	—	12.63	-6.62	3.84	—	—	—	—	4.57	—	—	—	-3.14	—	—	—	—	—	7.88	—	—
M34	2.06	7.13	13.85	-1.19	—	8.95	-1.26	—	21.9	-1.51	—	—	2.11	-0.33	-3.92	—	—	—	-2.76	—	—	—
M35	3.48	—	-2.93	-0.30	—	7.48	-3.66	16.8	20.2	3.65	10.76	—	—	1.22	-0.99	—	—	8.95	8.17	13.3	3.50	—
M36	-5.25	3.50	-3.53	2.93	-2.24	—	-4.98	2.61	-1.89	2.99	—	—	—	-0.66	8.24	7.98	—	7.48	-1.27	—	4.14	—
M37	-4.13	4.14	-7.49	-1.00	—	—	2.82	6.37	-0.34	2.72	—	-	-	-	11.78	0.77	—	—	10.76	—	—	—
M38	-3.93	—	-6.56	-2.61	—	3.65	-2.24	10.7	-1.37	-31.56	4.15	—	—	1.78	0.60	—	—	7.97	13.74	0.38	-6.86	—
M39	3.19	—	-5.77	—	—	2.99	14.93	13.7	-0.77	5.79	-6.62	—	—	-	-2.42	4.15	—	4.50	9.42	-	-	—
M40	-7.82	3.60	-3.96	6.16	11.0	2.72	8.73	-2.12	-2.37	—	-1.19	—	6.37	11.52	1.61	7.63	-2.24	—	16.11	—	7.56	5.94
M41	-6.67	—	-8.00	-9.07	-	—	—	3.98	-1.24	3.81	-0.30	—	—	—	1.31	—	—	0.05	-6.12	—	4.08	9.23
M42	-4.95	—	-3.78	4.15	—	3.81	—	12.8	-1.64	2.17	2.93	—	11.0	-9.68	-0.42	—	—	-2.24	2.44	—	3.60	-5.00
M43	9.17	7.97	-4.92	-6.62	—	2.17	—	—	-3.59	-1.13	—	-	—	-	2.05	6.14	—	3.73	13.21	8.95	13.02	—
M44	-3.09	4.50	-6.76	-1.19	—	-1.13	5.59	3.50	—	—	7.97	—	12.3	-	6.90	0.70	-6.62	—	-2.76	7.48	—	—
M45	-2.53	—	-3.07	—	—	—	—	4.14	1.97	-7.52	4.50	—	—	-1.24	-3.42	—	—	—	—	-7.52	13.02	—
M46	2.85	0.38	-3.09	—	—	6.37	—	—	4.13	-16.40	—	—	—	—	3.30	6.37	—	23.34	-2.76	-	-	—
M47	-1.22	-	-4.19	-	—	—	—	8.92	-1.90	—	—	—	—	-7.85	2.66	—	—	4.15	8.17	—	-0.61	—
M48	1.69	—	-	11.5	4.15	—	—	4.94	-1.43	7.98	—	—	—	-4.38	4.16	—	—	-1.23	-1.27	—	5.33	—
M49	2.08	4.15	-6.57	-9.68	—	4.52	0.05	1.65	2.02	0.77	7.36	—	6.33	0.06	4.15	7.59	—	7.93	-3.14	—	8.83	—
M50	-6.54	—	-4.23	-	-0.77	—	-2.24	11.4	-0.81	—	—	—	—	-7.22	2.58	—	—	0.20	-	—	7.66	—
M51	-3.47	—	-9.34	-	9.15	—	3.73	9.69	-2.81	—	—	—	0.38	-1.76	4.08	—	—	5.11	9.42	—	7.63	—
M52	-1.08	13.3	-8.07	-1.24	-	—	10.76	2.86	-2.39	3.60	-6.62	—	-	0.10	3.88	7.13	—	8.99	16.11	—	5.59	—
M53	-3.32	—	-6.43	18.0	4.57	—	—	9.88	-1.42	—	—	—	—	-4.11	5.06	—	—	-9.70	-6.12	—	—	—
M54	-0.34	2.61	-	-7.85	-	—	—	-1.90	2.06	—	—	—	—	-1.97	3.85	—	—	7.60	—	—	8.55	—
M55	-5.91	6.37	-	-4.38	-1.25	—	—	0.22	-3.68	—	3.50	7.1	—	—	3.87	5.24	—	3.39	13.21	—	6.91	3.60
M56	1.18	10.7	-	0.06	—	-1.90	-0.81	-1.92	-0.43	1.67	4.14	—	11.0	1.12	5.43	-2.48	4.23	23.34	-2.76	—	1.60	—
M57	-1.66	13.7	-1.35	-7.22	—	0.22	-2.81	-3.49	-0.38	4.44	—	—	—	-0.82	2.16	-7.94	—	4.15	8.17	—	3.10	—
M58	-3.89	-2.12	6.90	-1.76	—	-1.92	-2.39	-2.96	2.58	0.43	—	—	—	0.86	3.50	-6.43	—	-1.23	-1.27	5.61	1.62	—

Samples	IM01	IM02	IM03	IM04	IM05	IM06	IM07	IM08	IM09	IM10	IM11	IM12	IM13	IM14	IM15	IM16	IM17	IM18	IM19	IM20	IM21	IM22
M59	1.07	3.98	-7.82	0.10	—	-1.02	—	-2.28	10.3	-3.24	—	—	—	1.54	3.30	-1.52	—	7.93	-1.02	-	5.67	-
M60	5.54	8.92	-2.65	-4.11	—	2.75	4.70	14.5	-0.34	2.01	—	—	—	-4.66	2.08	-3.19	—	0.20	—	-	-	-8.81
M61	0.30	4.94	11.18	-1.97	—	-3.74	3.29	-0.58	-1.75	-1.13	—	—	—	—	-3.15	-2.75	—	5.11	2.13	1.91	-	3.03
M62	-0.89	1.65	-6.37	-2.05	—	10.1	2.72	4.60	13.8	13.66	9.26	—	4.62	11.03	-5.50	-1.60	2.36	—	—	—	-	—
M63	-0.08	—	-0.02	1.12	7.81	7.50	16.20	0.50	—	14.61	—	—	8.46	4.88	3.62	—	22.1	7.98	-1.10	-2.12	1.91	-5.79
M64	0.40	—	-7.80	-0.82	—	8.44	7.00	—	-5.40	2.80	7.98	—	23.7	-7.94	-	2.09	—	0.77	-3.22	10.74	2.00	—
M65	0.42	—	1.18	0.86	—	3.51	—	-	-0.91	-6.40	0.77	—	—	-8.31	-	—	—	23.00	-	-3.71	-2.12	—
M66	-0.88	-0.71	10.22	-	—	4.51	-2.83	-2.15	20.8	—	23.00	—	11.0	0.04	0.38	2.71	-6.04	—	4.08	—	—	—
M67	13.30	—	19.24	—	11.0	—	—	9.33	-0.33	—	—	—	—	-1.00	-	—	—	—	—	—	—	—
M68	-1.97	67.4	-0.41	-0.71	—	4.33	-1.81	—	-1.57	-0.33	5.53	-	5.69	—	-7.42	0.38	6.64	-1.19	4.59	—	—	—
M69	-1.30	9.85	20.40	—	-7.76	-2.08	5.96	-	-0.04	—	—	2.4	—	-0.09	-1.10	—	—	-3.36	7.72	—	—	—
M70	-7.81	—	—	—	0.19	—	—	-7.52	-0.06	3.08	7.98	—	—	-0.61	-3.22	17.7	—	—	—	—	—	—
M71	-1.44	2.44	4.87	7.81	—	-5.90	5.66	-	4.05	3.24	0.77	—	—	-6.21	-	2.90	—	23.32	7.72	-6.31	22.67	—
M72	3.06	—	-5.28	—	-7.24	—	—	0.30	0.05	5.59	—	—	—	10.52	4.08	—	—	12.03	—	—	5.62	-
M73	11.24	—	6.14	—	1.71	—	—	-8.59	-2.24	-15.67	—	—	—	-0.70	-6.74	—	—	8.15	—	—	—	—
M74	-8.38	1.47	0.70	1.61	—	7.98	4.38	—	3.73	5.44	-1.19	—	1.88	—	7.51	-8.79	10.7	—	3.24	—	—	—
M75	-7.46	12.0	2.65	-3.62	—	0.77	5.59	-0.34	-2.04	5.25	-3.36	—	-	-7.73	4.86	-0.35	10.9	—	-	—	—	-
M76	-0.78	8.25	3.49	—	—	23.0	—	2.32	3.50	1.86	4.37	—	—	-9.94	2.65	-4.45	—	—	7.24	5.40	-7.80	-
M77	3.61	—	5.54	—	—	—	2.17	—	2.48	8.02	9.75	7.8	—	-4.26	-	—	—	-4.25	—	—	—	-9.59
M78	-8.09	9.85	-	-4.25	—	9.04	2.33	5.07	1.84	7.93	6.58	—	—	—	-7.52	1.28	—	7.32	12.55	-	-	—
M79	-0.91	20.8	3.73	-5.25	—	-	-4.07	6.12	-3.64	8.92	11.78	—	-	—	-	0.22	—	-7.58	7.68	-8.60	11.03	—
M80	11.04	14.4	11.50	-7.58	6.12	—	-1.95	20.0	-0.65	0.37	11.74	—	-	-2.69	0.30	-2.80	—	—	7.97	—	—	—
M81	-0.70	12.0	12.90	14.2	—	-8.77	7.51	19.5	2.46	1.51	5.03	—	—	-5.90	-8.59	—	—	14.24	4.50	-	9.59	16.9
M82	21.65	4.25	-	19.8	—	-9.06	—	4.37	65.1	6.29	10.57	—	—	—	-6.00	—	—	19.86	22.29	1.89	—	13.5
M83	-0.28	—	7.33	3.50	—	—	4.99	—	5.20	-0.06	9.91	—	-	—	12.27	—	—	21.50	9.03	—	4.14	—
M84	-0.75	-5.90	5.71	4.14	2.44	—	-3.91	—	16.9	4.77	19.09	—	6.21	—	1.38	-	—	4.14	—	—	1.41	-
M85	-0.34	—	4.37	3.41	—	—	4.59	-6.01	13.5	-3.66	24.50	—	6.43	—	-	-5.48	—	3.41	—	—	1.97	—
M86	-0.17	5.66	-6.01	5.97	—	—	3.65	-2.05	4.12	8.95	-4.24	—	-	—	-	-4.04	—	7.97	-8.67	—	—	5.66
M87	-7.54	—	-2.05	12.7	—	-	—	0.33	-1.22	7.48	9.68	—	—	—	-7.78	—	—	16.76	—	-	—	—
M88	5.52	—	0.33	12.0	—	7.81	-	-1.02	4.47	3.51	8.51	—	10.7	—	-9.66	—	—	18.05	3.68	—	-7.13	6.24
M89	-3.02	—	-6.34	10.3	—	—	-7.52	3.24	4.41	3.42	5.37	—	10.9	1.77	-7.54	-0.06	-	10.39	8.51	—	—	—
M90	-1.30	—	-5.06	7.96	—	-1.10	-	-2.43	-2.21	10.24	9.75	—	—	—	-	1.21	—	7.96	2.37	—	-8.12	8.14
M91	-8.44	7.32	19.58	8.58	—	-3.22	0.30	3.54	3.98	1.55	-0.73	—	—	-0.71	-8.84	—	—	—	5.75	7.94	—	—
M92	3.65	25.4	6.52	5.94	—	-	-8.59	—	-3.69	8.84	0.36	—	3.67	—	2.57	———	—	7.72	-0.73	—	—	-8.84
M93	-6.73	-4.71	21.63	7.96	0.07	4.08	-	1.37	-7.26	-13.77	-	5.6	5.62	-	—	—	—	—	0.36	12.17	0.15	-
M94	-7.43	6.12	7.75	—	-1.52	-1.10	-7.52	6.24	-0.28	2.52	—	—	—	-	—	—	—	9.72	-1.59	17.54	—	-1.77
M95	-5.13	20.1	68.47	—	9.44	—	5.66	19.3	-4.09	-14.94	—	—	—	7.04	-8.84	1.35	—	—	10.02	5.41	—	-0.75
M96	-7.45	—	9.42	—	-	—	—	-	-3.72	-4.84	—	—	—	-	7.57	23.1	—	—	23.90	20.51	2.38	—

Samples	IM 01	IM 02	IM 03	IM 04	IM 05	IM 06	IM 07	IM 08	IM 09	IM 10	IM 11	IM 12	IM 13	IM 14	IM 15	IM 16	IM 17	IM 18	IM 19	IM 20	IM 21	IM 22
M97	-7.77	—	2-	—	8.63	—	—	-8.59	-6.10	-24.73	—	—	-	-	—	13.2	—	—	21.02	17.43	—	7.08
M98	-6.40	12.1	23.12	—	9.61	—	—	-	-0.72	-13.72	—	—	—	14.30	7.90	4.31	—	—	—	8.90	—	2.58
M99	-	—	12.25	—	6.10	—	—	-	-2.90	14.40	—	—	9.10	-	4.21	7.45	—	—	6.50	10.02	-8.68	6.44
M100	-6.50	—	2.76	—	-	—	12.09	-	-3.57	-12.87	—	—	-	3.25	5.50	3.22	—	—	3.43	3.29	—	—
M101	-5.98	9.50	-1.02	—	22.9	-6.70	12.65	-	20.1	-17.67	—	—	4.45	13.29	6.43	-4.04	—	—	9.69	-	—	8.41
M102	-6.35	2.29	4.04	—	-5.44	—	—	-0.93	-4.01	-18.65	—	—	—	-9.78	9.69	-	—	—	6.50	20.73	9.10	3.80
M103	-4.41	9.03	5.86	—	9.47	1.17	12.13	-	-3.06	-20.61	—	—	—	-	6.50	—	—	5.86	9.37	14.19	-4.90	8.28
M104	-5.69	10.7	8.39	—	20.0	16.3	—	-	-3.63	22.57	—	—	—	1.26	9.37	—	—	8.39	-1.02	13.29	2.45	—
M105	-5.03	7.24	8.57	—	—	—	—	-	-2.13	8.97	—	—	—	-3.67	-	-9.44	814.	—	—	16.59	4.06	—
M106	-4.21	—	13.09	—	-	—	—	-	-3.61	11.60	1.90	—	-	-3.56	8.90	-	—	—	8.55	3.54	—	3.86
M107	-3.98	—	-	—	-	—	—	-	-2.24	-16.03	—	—	-	14.61	—	—	—	—	15.87	-7.75	—	8.39
M108	-3.80	—	-7.22	—	17.8	8.85	7.33	-	-4.81	-22.42	—	—	—	-	—	-1.02	—	—	6.58	10.21	—	—
M109	-2.92	8.81	-	—	-8.75	3.93	5.90	-	-2.50	-17.03	—	—	—	-	14.56	-6.21	—	—	6.34	22.62	—	—
M110	-3.44	—	-	—	11.7	—	—	-	-7.79	14.48	—	-	12.3	-	—	14.7	—	—	—	20.75	-	17.7
M111	-2.75	—	14.23	—	5.50	—	—	-	-3.68	-18.10	—	—	—	-4.00	-3.62	—	—	15.17	8.17	13.84	-9.07	6.86
M112	-1.88	8.18	6.09	—	-	—	—	-	-	-18.06	—	—	3.18	6.87	11.43	12.9	—	16.35	16.35	8.80	—	4.04
M113	-1.55	—	-9.28	—	23.5	—	7.18	-9.07	-2.79	-21.49	—	—	—	18.46	7.94	20.3	—	—	6.05	-3.64	12.33	13.1
M114	-1.06	—	13.61	—	-	—	—	-8.11	-4.02	-19.08	—	—	12.0	4.13	3.88	7.22	—	—	18.50	4.02	—	-1.01
M115	0.55	-8.68	-	—	9.82	—	-9.09	-	-	-21.89	—	—	4.06	5.01	—	7.36	—	—	-4.04	6.26	17.48	-
M116	-0.95	-	19.33	—	-2.56	—	—	-	-7.55	-22.07	—	—	—	-1.02	—	10.1	—	—	22.30	-	7.70	6.93
M117	-0.51	-	13.93	—	-	—	—	-	-6.48	-15.12	—	—	—	-3.25	1.30	—	—	4.26	8.87	5.78	21.75	—
M118	1.27	—	15.68	—	1.11	1.98	—	-	18.9	-20.60	—	—	6.22	4.57	7.73	5.90	—	—	4.10	8.83	17.48	9.77
M119	-0.28	-9.09	-	—	-	—	—	-	-	19.86	—	—	—	3.10	-3.00	—	—	8.18	-4.90	9.77	—	11.6
M120	-0.48	—	-	—	-	—	—	0.83	-7.25	6.69	—	—	—	8.27	1.51	-	—	—	4.45	6.20	6.54	3.60
M121	0.59	—	-4.04	—	11.6	-6.70	1.65	-	-3.88	-8.45	—	—	—	4.60	-	4.02	—	—	14.54	-3.25	—	—
M122	0.94	—	-3.68	—	18.8	—	—	9.90	-7.52	13.75	—	—	—	-7.45	—	5.82	—	12.13	7.33	9.21	—	5.28
M123	1.24	—	-6.58	—	7.32	—	—	-	-4.16	-20.88	—	—	-	6.68	—	6.43	—	—	5.71	15.08	—	18.1
M124	1.34	7.33	2.83	—	20.6	—	4.59	-	-2.04	2.42	—	—	—	3.47	—	-1.27	—	—	6.99	13.25	7.84	6.15
M125	1.74	—	22.33	—	8.72	—	6.24	-	-6.87	-16.46	—	—	—	-2.06	20.01	-7.46	—	—	3.44	5.81	—	—
M126	-0.45	—	10.71	—	-	—	5.86	-	-6.85	-19.48	—	—	—	7.17	-5.33	5.18	—	—	-1.02	3.44	—	6.22
M127	0.85	—	3.07	—	7.64	2.18	8.40	-	-7.42	4.72	—	—	15.1	6.77	—	5.01	—	—	5.08	9.74	7.17	4.23
M128	1.49	—	16.40	—	8.36	—	12.02	-	-	-5.47	—	—	14.3	9.49	3.71	15.9	—	—	12.65	5.04	0.60	6.50
M129	2.69	—	19.33	—	22.5	5.86	18.56	-	-9.92	-21.17	—	—	—	-	3.03	3.50	—	-9.09	12.25	16.91	11.63	12.7
M130	1.59	5.86	13.93	—	8.33	5.39	—	-	-6.72	-13.57	—	—	—	-0.48	-0.62	-7.16	—	—	-9.69	14.86	14.57	9.78
M131	1.66	8.39	-4.00	—	—	—	—	-	-	-4.96	—	—	—	1.94	—	4.52	—	—	4.49	8.87	-7.78	2.72
M132	-2.18	—	-5.38	—	-0.14	—	12.33	-	-7.94	-10.91	—	—	5.47	-7.76	—	10.2	—	7.52	1.23	5.35	7.17	—
M133	6.44	-	12.33	—	-5.50	12.1	—	-	-7.11	-10.26	—	—	—	-	14.81	-1.66	—	—	6.09	-	—	—
M134	1.99	-9.07	8.18	—	-	—	—	-	-8.61	-11.33	5.90	—	—	10.72	—	—	—	22.18	1.94	-4.65	-6.70	12.6

Samples	IM 01	IM 02	IM 03	IM 04	IM 05	IM 06	IM 07	IM 08	IM 09	IM 10	IM 11	IM 12	IM 13	IM 14	IM 15	IM 16	IM 17	IM 18	IM 19	IM 20	IM 21	IM 22
M135	1.53	-9.05	3.21	—	17.5	—	—	-	-9.64	-16.23	—	—	—	-3.59	-	-9.19	—	7.49	12.54	4.76	—	—
M136	-0.09	1.03	-9.05	—	-9.39	—	—	-	1.08	-22.53	—	—	—	-4.04	-5.06	-6.06	—	11.23	6.77	—	—	—
M137	-1.60	—	1.03	—	-	—	—	-	-4.89	-16.49	—	—	—	-	1.67	-	—	6.09	7.59	—	—	—
M138	-6.57	—	-7.17	—	-	—	—	-	-7.71	2.69	—	—	4.71	-	—	-6.19	—	—	7.72	2.80	4.11	16.2
M139	4.16	—	-9.26	—	-9.88	-	—	-	-5.98	-11.94	—	—	—	-	-5.74	-3.07	—	7.72	5.58	6.04	—	—
M140	1.90	—	-	3.17	-5.23	—	-9.00	-	-	-4.42	—	—	0.83	-	7.16	-4.52	—	8.58	4.03	—	—	15.6
M141	2.68	3.67	-	—	-	-	—	-	-	-4.03	—	—	—	1.88	—	-6.30	—	—	9.17	1.85	—	—
M142	1.60	—	0.86	—	-5.85	—	2.47	-	-3.37	-3.54	—	—	—	-8.31	8.80	12.2	—	—	6.35	4.23	—	20.5
M143	-1.10	—	3.15	—	-	—	—	—	-5.85	-12.29	—	—	—	-	—	12.1	—	4.03	6.05	1.72	10.07	2.88
M144	2.63	—	-4.55	—	-	—	4.43	-	-4.94	-17.62	—	—	—	-6.75	4.25	5.51	—	—	11.50	—	-1.36	8.27
M145	-4.81	—	-	—	-	2.67	5.95	-	0.26	-12.08	—	2.4	—	-	16.51	23.5	—	—	-	5.81	-9.72	-0.18
M146	1.82	—	-6.07	—	-5.66	—	2.47	-	-	-3.96	—	—	-	7.78	—	-9.61	—	9.33	-2.30	11.68	0.07	—
M147	6.74	—	-0.93	—	-	-3.93	-0.02	-	-6.64	-3.94	-9.00	—	—	6.58	17.82	-2.75	—	—	-4.87	7.18	—	—
M148	-0.38	—	-2.98	—	-7.55	—	—	-	11.8	-6.46	—	—	—	7.83	4.67	-9.24	—	13.93	-2.10	—	8.14	2.43
M149	7.21	—	-7.61	—	7.31	—	—	-	0.32	-23.16	—	—	—	-	10.02	-3.50	—	—	-4.90	4.60	—	5.34
M150	5.31	—	2.31	—	-3.21	—	—	-	-7.74	-12.13	—	—	6.38	-	—	-6.34	—	15.68	2.45	5.95	9.87	10.6
M151	8.24	—	-	—	15.4	—	—	-	3.74	-21.91	—	—	—	-	9.10	-7.27	—	—	4.54	8.38	-4.44	-4.81
M152	-4.37	—	-6.06	—	-	—	—	-	-	17.71	—	—	—	2.44	—	-1.73	—	5.71	—	7.60	-7.00	-7.87
M153	2.99	—	-	—	-7.11	6.22	—	-	-	-22.34	—	—	—	-9.09	-3.60	-2.71	—	—	3.93	5.95	1.28	—
M154	5.42	2.47	19.86	—	-8.89	—	-1.10	-	-	-8.68	—	—	—	-	-	5.93	—	8.38	5.03	—	-5.89	5.91
M155	5.91	—	20.50	—	-3.05	—	2.33	-7.61	-	-19.90	—	—	24.9	-	-6.06	-0.69	—	12.47	9.89	—	0.41	6.41
M156	6.35	—	14.14	—	-	—	5.71	-	-	—	—	—	—	-	-4.06	0.84	—	2.59	19.73	12.47	—	4.08
M157	5.15	—	1.41	—	-	-	—	-	-9.00	-23.04	—	—	—	-3.55	—	-1.26	—	—	15.72	7.59	—	1.39
M158	2.88	—	5.97	—	-9.79	—	—	-	-2.06	-0.52	—	—	—	-	9.10	-1.00	—	4.43	—	9.79	—	—
M159	4.33	—	12.76	1.69	3.21	-8.88	—	-	-	-22.34	—	—	0.23	-1.73	3.36	-3.22	—	15.95	13.93	14.10	1.67	—
M160	6.56	-3.28	10.05	—	-8.94	-	—	-	-	-25.10	—	—	1.24	-2.71	-9.50	-2.21	—	9.47	5.68	10.47	2.19	5.91
M161	5.63	1.71	12.39	—	-6.62	-2.18	—	-	-7.48	-25.13	—	1.9	—	-	-	3.94	—	—	13.72	-4.88	6.22	—
M162	5.94	-5.19	7.96	—	-	—	11.37	-	-	-21.56	—	—	4.21	-6.19	-	6.65	—	11.88	9.33	3.54	6.67	—
M163	5.26	-0.92	15.58	—	-	—	—	-	-	-23.70	—	—	-	-	-	3.12	—	—	2.33	3.00	5.19	—
M164	6.16	3.21	5.94	—	-8.63	—	6.27	-	-8.15	19.03	—	-	—	14.15	3.73	7.45	—	—	5.71	1.35	3.67	1.71
M165	7.87	5.76	7.96	-9.83	-8.68	—	—	-	-	-26.28	—	—	—	-7.02	8.66	12.4	—	—	-3.00	-3.00	6.67	—
M166	6.19	-6.91	5.63	—	-9.83	—	4.60	-	-	-24.15	—	—	—	-	-3.59	15.0	—	5.90	6.52	6.52	—	2.75
M167	7.50	-5.08	6.06	—	-	1.56	—	-	-8.27	-26.26	—	—	—	-	-5.15	3.05	—	—	1.88	5.87	-5.19	—
M168	8.05	-4.25	7.92	—	-7.24	1.90	—	-	-	-24.41	—	—	—	-	—	-5.05	—	4.81	5.93	5.26	-0.92	—
M169	5.98	-6.18	-7.61	—	-8.02	-1.00	-2.07	-	-5.40	-24.25	—	—	1.04	-	2.69	-3.74	—	—	5.68	2.67	7.76	-3.33

IM: Target; "—", unpeaked; when the relative error value is 0, it is indicated by "/".