

































## BIJLAGE 1 : SPECIFIEKE IONEN VOOR DE FENYLACETAATTESTERS

Komponent	m/z(1)	m/z(2)	m/z(3)	Overeenkomstige IS	m/z(1)	m/z(2)
fenol	<b>94</b>	66		<sup>13</sup> C <sub>6</sub> -fenol	<b>100</b>	70
2-methylfenol	<b>107</b>	108		D <sub>8</sub> -2-methylfenol	<b>113</b>	115
3-methylfenol	<b>107</b>	108		"	"	"
4-methylfenol	<b>107</b>	108		"	"	"
2,3-dimethylfenol	<b>107</b>	108		D <sub>3</sub> -2,4-dimethylfenol	<b>109</b>	110
2,4-dimethylfenol	<b>107</b>	108		"	"	"
2,5-dimethylfenol	<b>107</b>	108		"	"	"
2,6-dimethylfenol	<b>107</b>	108		"	"	"
3,4-dimethylfenol	<b>107</b>	108		"	"	"
3,5-dimethylfenol	<b>107</b>	108		"	"	"
2-ethylfenol	<b>107</b>	108		"	"	"
3-ethylfenol	<b>107</b>	108		"	"	"
4-ethylfenol	<b>107</b>	108		"	"	"
4-chloor-3-methylfenol	<b>142</b>	<b>144</b>	<b>107</b>	"	"	"
2-isopropylfenol	<b>121</b>	<b>136</b>		"	"	"
2,3,5-trimethylfenol	<b>121</b>	<b>136</b>		"	"	"
2-Chloorfenol	<b>128</b>	130	<b>64</b>	13C-4-Chloorfenol	<b>134</b>	136
3-Chloorfenol	<b>128</b>	130	<b>64</b>	"	"	"
4-Chloorfenol	<b>128</b>	130	<b>64</b>	"	"	"
2,6-Dichloorfenol	<b>162</b>	164	<b>98</b>	13C-2,4-Dichloorfenol	<b>168</b>	170
2,5-Dichloorfenol	<b>162</b>	164	<b>98</b>	"	"	"
2,4-Dichloorfenol	<b>162</b>	164	<b>98</b>	"	"	"
3,5-Dichloorfenol	<b>162</b>	164	<b>98</b>	"	"	"
2,3-Dichloorfenol	<b>162</b>	164	<b>98</b>	"	"	"
3,4-Dichloorfenol	<b>162</b>	164	<b>98</b>	"	"	"
2,4,6-Trichloorfenol	<b>196</b>	198	<b>200</b>	13C-2,4,5-Trichloorfenol	202	<b>204</b>
2,3,6-Trichloorfenol	<b>196</b>	198	<b>200</b>	"	"	"
2,3,5-Trichloorfenol	<b>196</b>	198	<b>200</b>	"	"	"
2,4,5-Trichloorfenol	<b>196</b>	198	<b>200</b>	"	"	"
2,3,4-Trichloorfenol	<b>196</b>	198	<b>200</b>	"	"	"
3,4,5-Trichloorfenol	<b>196</b>	198	<b>200</b>	"	"	"
2,3,5,6-Tetrachloorfenol	<b>232</b>	230	<b>234</b>	13C-2,3,4,5-Tetrachloorfenol	236	<b>238</b>
2,3,4,6-Tetrachloorfenol	<b>232</b>	230	<b>234</b>	"	"	"
2,3,4,5-Tetrachloorfenol	<b>232</b>	230	<b>234</b>	"	"	"
Pentachlorofenol	<b>266</b>	268	<b>234</b>	13C-Pentachloorfenol	272	<b>274</b>
4-Chloro-3,5-dimethylfenol	<b>156</b>	158	<b>121</b>	D <sub>3</sub> -2,4-dimethylfenol	<b>109</b>	110
Octylfenol	<b>135</b>	107		13C-4-t-octylfenol	<b>141</b>	113
Nonylfenol	<b>135</b>	121	<b>149</b>	13C-4-(3,6-dimethylheptyl)fenol	<b>155</b>	<b>113</b>
Bisfenol A	<b>213</b>	<b>228</b>		D <sub>16</sub> -Bisfenol A	<b>224</b>	<b>242</b>
Recovery standaard bvb. <sup>13</sup> C-PCB 15	<b>234</b>	236				

## Opmerkingen :

- Voor <sup>13</sup>C<sub>6</sub>-2,4,5-trichloorfenol, <sup>13</sup>C<sub>6</sub>-2,3,4,5-tetrachloorfenol en <sup>13</sup>C<sub>6</sub>-pentachloorfenol worden massa's gekozen die niet overeenstemmen met de meest intense massa's van de isotopcluster. Om de bijdrage van ionen behorende bij de isotopcluster van de overeenkomstige natieve fenol



- bij de ionen van de koolstof-13 gemerkte verbinding te voorkomen, worden voor de gemerkte verbinding de massa's behorende bij het M+2 of M+4 ion genomen.
- De m/z-waarden gebruikt voor kwantificatie zijn in de bovenstaande tabel in vet weergegeven.

**BIJLAGE 2 : TYPISCHE GC/MS WERKVOORWAARDEN VOOR DE BEPALING VAN FENOLEN**

Kolomspecificaties : DB-XLB, 30 m x 0.25 mm x 0.25 mm

Draaggas en druk : Helium, 75 kPa

Injectie :

Modus : splitless  
Injectievolume : 1 µl hexaan eindextract  
Injectietemperatuur: 250°C

GC-oven programmatie :

55°C : 1 min  
55°C --> 205°C : 6°C/min  
205°C --> 305°C : 25°C/min

totale duur : 30 min

MS-instellingen :

Interfacetemperatuur : 280°C  
Brontemperatuur : 230°C  
Ionen : zie bijlage 1

## BIJLAGE 3 : TYPISCH GC-PATROON VAN TECHNISCH NONYLFENOL

