

**“Evaluación de mezclas de subproductos de desinfección
con espectrometría de masas usando análisis dirigidos y no
dirigidos: identificación y priorización”**

Anexos

ANEXO A

GLOSARIO

- **Agente oxidante:** compuesto químico que en una reacción contribuye con oxígeno, extrae hidrógeno, o extrae electrones, a la vez que se reduce.
- **Agua de grado HPLC:** agua tridestilada que ha sido sometida a procesos de filtración por una membrana de 0.2 μm para evitar la presencia de partículas como sales, minerales, bacterias y esporas, utilizada en la fase móvil de los análisis de cromatografía de líquidos.
- **Aguas regeneradas:** aguas residuales depuradas que, en su caso, han sido sometidas a un proceso de tratamiento adicional o complementario que permite adecuar su calidad al uso al que se destinan.
- **Carbono orgánico total (TOC):** carbón que forma parte de las sustancias orgánicas de las aguas superficiales; parámetro que se utiliza para valorar la calidad de las aguas de un determinado lugar.
- **Citotoxicidad:** daño celular (interferencia con estructura, procesos celulares, o ambos) provocado por la acción de anticuerpos específicos y complemento o por células citotóxicas.
- **Cloro libre residual:** remanente del cloro en el agua después de que se haya alcanzado el punto de ruptura en la curva de cloro (cuando el cloro residual inicialmente en aumento por su combinación con aminos presentes en el agua, empieza a disminuir por destrucción de estos compuestos aminos formados). Corresponde fundamentalmente a una combinación de hipoclorito y ácido hipocloroso, en una proporción que varía en función del pH.
- **Compuestos halogenados:** compuestos ya sean sintéticos o naturales, que contiene algún elemento halógeno, ubicados en el grupo 17 de la tabla periódica (flúor, cloro, bromo, yodo).
- **Contaminantes orgánicos emergentes:** compuestos de distinto origen y naturaleza química, cuya presencia en el medio ambiente no se ha considerado significativa en términos de distribución y/o concentración, y, por lo tanto, no han sido regulados. No obstante, ahora están siendo ampliamente detectados y tienen el potencial de acarrear un impacto ecológico, así como efectos adversos sobre la salud.
- **Cromatografía:** método físico de separación de los componentes de una mezcla. Los compuestos a separar se distribuyen entre dos fases, una que es estacionaria (fase estacionaria) mientras que la otra, (la fase móvil) se mueve en una dirección determinada. Es utilizado, en combinación con diferentes detectores, para confirmar la presencia o ausencia de un compuesto en una muestra determinada.
- **Cromatografía de gases (GC):** técnica cromatográfica de separación en la que la fase móvil es un gas. Empleada en la separación de compuestos volátiles o semivolátiles.

- ***Cromatografía líquida (LC)***: técnica de separación en la que la fase móvil es un líquido. Empleada en la separación de compuestos poco volátiles y polares.
- ***Deconvolución***: operación matemática. Se usa en restauración de señales para recuperar datos que han sido degradados por un proceso físico que puede describirse mediante la operación inversa, una convolución.
- ***Eluir***: extraer, mediante un líquido apropiado, una sustancia del medio sólido que la ha absorbido.
- ***Ensayos de potencial de formación de DBPs***: ensayo simulado, útil para valorar los precursores de DBPs, realizado en condiciones controladas con la presencia del agente oxidante en exceso (asegurando su presencia tras el periodo de incubación elegido).
- ***Espectrometría de masas de alta resolución***: método de detección que consiste en la separación y medida de las masas de los iones resultantes de un proceso de ionización (en el que se suministra energía) de una molécula y de su fragmentación. Los analizadores utilizados permiten realizar medidas de masa exacta (hasta 4 o 5 decimales).
- ***Espectroscopía infrarroja (IR)***: cubre una gama de técnicas, en su mayoría basadas en espectroscopia de absorción, utilizada para identificar y estudiar sustancias químicas e implica la interacción de la radiación infrarroja con la materia.
- ***Genotoxicidad***: capacidad para causar daño al material genético por agentes físicos, químicos o biológicos; el daño en el material genético incluye no sólo al ADN, sino también a todos aquellos componentes celulares que se encuentran relacionados con la funcionalidad y comportamiento de los cromosomas dentro de la célula.
- ***Ionización por impacto electrónico o ionización electrónica (EI)***: la ionización electrónica es un método de ionización en el que los electrones energéticos interactúan con los átomos o moléculas de fase sólida o gaseosa para producir iones. Fue una de las primeras técnicas de ionización desarrolladas para la espectrometría de masas.
- ***Ionización química (CI)***: técnica de ionización suave utilizada en espectrometría de masas, por lo que produce menos fragmentación que por EI; forma iones a partir del “gas reactivo” por bombardeo con electrones, siendo parte de la rama de la química de la molécula de iones gaseosos.
- ***Límite de cuantificación (LOQ)***: menor concentración de analito que puede determinarse con precisión y exactitud en una muestra, bajo las condiciones experimentales establecidas.
- ***Límite de detección (LOD)***: cantidad o concentración mínima de sustancia que puede ser detectada con fiabilidad por un método analítico determinado.
- ***m/z***: relación masa/carga del ion, división de la masa atómica o molecular de un ion (m) por el número de cargas (z) que tiene el ion. Debido a que la mayoría de los iones pequeños (<600 Da) en MS tienen z=1, el término m/z a menudo se reduce al término más adecuado de masa.

- **Mutagénico:** dicho de un agente mutagénico o mutágeno, es un agente que puede ser de diferente tipo que altera o hace diferente la información genética (normalmente la del ADN) de un organismo vivo, aumentando así la frecuencia de mutaciones por encima del umbral.
- **Nitrógeno total oxidado (TON):** en aplicaciones de agua o aguas residuales, es la suma de nitratos y nitritos; también puede ser definido como una fracción del nitrógeno total, que excluye el amoníaco/amonio y nitrógeno unido orgánicamente.
- **Tren de tratamiento:** sucesión de sistemas en una estación depuradora de aguas residuales, que incorpora las tecnologías de purificación necesarias para garantizar que el agua liberada cumplirá con los requisitos de higienización esperados.

ANEXO B

CONCENTRACIONES CUANTIFICADAS PARA CADA DBP CON EL ENFOQUE DE ANÁLISIS

DIRIGIDO

Trihalometanos yodados (I-THMs)

I-THMs	DCIM	BCIM	DBIM	CDIM	BDIM	TIM
LOD	0.05	0.05	0.05	0.05	0.1	0.1
LOQ	0.15	0.15	0.15	0.10	0.25	0.5
TS_26-6_Cl2_A	0.337	0.178	<LOQ	ND	ND	ND
TS_26-6_Cl2_B	0.253	<LOQ	<LOQ	ND	ND	ND
TS_19-6_Cl2_A	0.464	0.195	<LOQ	<LOQ	ND	ND
TS_19-6_Cl2_B	0.396	0.187	<LOQ	<LOQ	ND	ND
TS_19-6_NHCl2_A	<LOQ	0.186	0.265	<LOQ	<LOQ	ND
TS_19-6_NHCl2_B	0.234	0.331	0.465	<LOQ	<LOQ	ND
TS_26-6_NHCl2_A	<LOQ	0.222	0.361	<LOQ	<LOQ	ND
TS_26-6_NHCl2_B	0.210	0.418	0.743	<LOQ	<LOQ	ND
TT_26-6_Cl2_A	0.419	0.226	0.130	<LOQ	ND	ND
TT_26-6_Cl2_B	0.435	0.207	<LOQ	ND	ND	ND
TT_19-6_Cl2_A	0.273	0.153	<LOQ	ND	ND	ND
TT_19-6_Cl2_B	0.330	0.193	<LOQ	ND	ND	ND
TT_19-6_NHCl2_A	0.196	0.353	0.577	<LOQ	<LOQ	ND
TT_19-6_NHCl2_B	0.098	0.174	0.255	<LOQ	<LOQ	ND
TT_26-6_NHCl2_A	0.173	0.283	0.475	<LOQ	<LOQ	ND
TT_26-6_NHCl2_B	0.154	0.243	0.392	<LOQ	<LOQ	ND
P1_26-6_Cl2_A	0.399	0.261	0.169	<LOQ	ND	ND
P1_26-6_Cl2_B	0.446	0.276	0.162	<LOQ	ND	ND
P1_19-6_Cl2_A	0.241	0.177	<LOQ	<LOQ	ND	ND
P1_19-6_Cl2_B	0.292	0.203	<LOQ	<LOQ	ND	ND
P1_19-6_NH2Cl_A	<LOQ	0.264	0.373	<LOQ	<LOQ	ND
P1_19-6_NH2Cl_B	0.213	0.482	0.729	<LOQ	<LOQ	ND
P1_26-6_NHCl2_A	<LOQ	0.245	0.360	<LOQ	<LOQ	ND
P1_26-6_NHCl2_B	0.261	0.512	0.711	<LOQ	<LOQ	ND
P2_26-6_Cl2_A	ND	<LOQ	ND	ND	ND	ND
P2_26-6_Cl2_B	ND	<LOQ	ND	ND	ND	ND
P2_19-6_Cl2_A	<LOQ	0.152	0.159	ND	ND	ND
P2_19-6_Cl2_B	<LOQ	<LOQ	<LOQ	ND	ND	ND
P2_19-6_NH2Cl_A	<LOQ	0.199	0.260	<LOQ	<LOQ	ND
P2_19-6_NH2Cl_B	<LOQ	0.253	0.351	<LOQ	<LOQ	ND
P2_26-6_NH2Cl_A	<LOQ	0.273	0.566	ND	<LOQ	ND
P2_26-6_NH2Cl_B	<LOQ	0.152	0.283	ND	<LOQ	ND

P3_19-6_Cl2_A	0.225	0.240	0.153	<LOQ	ND	ND
P3_19-6_Cl2_B	0.196	0.167	<LOQ	ND	ND	ND
P3_26-6_Cl2_A	<LOQ	<LOQ	<LOQ	ND	ND	ND
P3_26-6_Cl2_B	<LOQ	<LOQ	<LOQ	ND	ND	ND
P3_19-6_NHCl2_A	<LOQ	0.214	0.204	<LOQ	<LOQ	ND
P3_19-6_NHCl2_B	<LOQ	0.287	0.243	<LOQ	<LOQ	ND
P3_26-6_NHCl2_A	<LOQ	0.257	0.384	<LOQ	<LOQ	ND
P3_26-6_NHCl2_B	<LOQ	0.181	0.248	<LOQ	<LOQ	ND
ETAP_14-6_Cl2_A	ND	<LOQ	<LOQ	ND	ND	ND
ETAP_14-6_Cl2_B	ND	<LOQ	<LOQ	ND	ND	ND
ETAP_26-6_Cl2_A	ND	<LOQ	<LOQ	ND	ND	ND
ETAP_26-6_Cl2_B	ND	<LOQ	<LOQ	ND	ND	ND

Trihaloacetaldehídos (Tri-HALs)

Tri-HALs	TCAL	BDCAL	DBCAL	TBAL
LOD	0.07	0.25	0.25	0.7
LOQ	0.15	0.5	0.5	1.5
TS_26-6_Cl2_A	37.716	30.681	16.815	2.475
TS_26-6_Cl2_B	55.654	43.267	22.259	2.400
TS_19-6_Cl2_A	42.349	33.153	17.794	2.376
TS_19-6_Cl2_B	32.913	25.052	13.290	2.171
TS_19-6_NHCl2_A	0.159	0.618	1.092	<LOQ
TS_19-6_NHCl2_B	0.598	1.410	1.678	1.543
TS_26-6_NHCl2_A	<LOQ	0.719	1.415	1.607
TS_26-6_NHCl2_B	0.206	1.327	2.957	2.105
TT_26-6_Cl2_A	24.711	24.316	14.407	2.220
TT_26-6_Cl2_B	43.362	40.336	22.576	2.652
TT_19-6_Cl2_A	36.818	35.608	21.904	2.779
TT_19-6_Cl2_B	20.626	19.206	12.418	2.349
TT_19-6_NHCl2_A	0.404	1.069	1.706	1.668
TT_19-6_NHCl2_B	<LOQ	<LOQ	0.920	<LOQ
TT_26-6_NHCl2_A	<LOQ	0.763	1.494	1.605
TT_26-6_NHCl2_B	<LOQ	0.512	1.075	<LOQ
P1_26-6_Cl2_A	20.002	22.673	15.842	2.762
P1_26-6_Cl2_B	25.056	27.766	20.530	2.992
P1_19-6_Cl2_A	12.496	14.267	9.257	2.051
P1_19-6_Cl2_B	27.332	30.715	19.327	2.430
P1_19-6_NH2Cl_A	<LOQ	0.684	1.248	1.501
P1_19-6_NH2Cl_B	0.212	1.269	2.328	1.914
P1_26-6_NHCl2_A	<LOQ	0.808	1.274	<LOQ
P1_26-6_NHCl2_B	0.220	1.689	2.981	1.968
P2_26-6_Cl2_A	4.129	11.998	15.205	3.713
P2_26-6_Cl2_B	1.870	6.999	13.240	9.987
P2_19-6_Cl2_A	5.313	7.839	6.709	2.479
P2_19-6_Cl2_B	13.389	14.908	9.935	1.940
P2_19-6_NH2Cl_A	<LOQ	<LOQ	0.987	<LOQ
P2_19-6_NH2Cl_B	<LOQ	0.509	1.074	<LOQ
P2_26-6_NH2Cl_A	0.216	0.715	1.580	1.813
P2_26-6_NH2Cl_B	<LOQ	<LOQ	0.933	1.563
P3_19-6_Cl2_A	5.694	5.960	4.822	1.995
P3_19-6_Cl2_B	23.054	22.138	12.727	2.166
P3_26-6_Cl2_A	11.011	22.215	21.524	3.296
P3_26-6_Cl2_B	11.205	23.368	22.191	3.559

P3_19-6_NHCl2_A	<LOQ	<LOQ	0.863	<LOQ
P3_19-6_NHCl2_B	<LOQ	0.523	0.917	<LOQ
P3_26-6_NHCl2_A	ND	0.600	1.259	1.600
P3_26-6_NHCl2_B	ND	<LOQ	1.019	<LOQ
ETAP_14-6_Cl2_A	<LOQ	<LOQ	1.535	1.837
ETAP_14-6_Cl2_B	<LOQ	<LOQ	1.349	1.582
ETAP_26-6_Cl2_A	ND	<LOQ	0.987	1.740
ETAP_26-6_Cl2_B	ND	<LOQ	1.071	1.853

Haloacetonitrilos (HANs)

HANs	CAN	BAN	IAN	DCAN	DBAN	BDCAN	DBCAN	TBAN
LOD	0.10	0.1	0.05	0.05	0.1	2.5	5	10
LOQ	0.25	0.25	0.15	0.10	0.25	4	10	20
TS_26-6_CI2_A	0.718	0.627	<LOQ	29.460	10.996	4.707	<LOQ	ND
TS_26-6_CI2_B	0.832	0.763	<LOQ	38.032	13.311	<LOQ	<LOQ	<LOQ
TS_19-6_CI2_A	0.748	0.598	<LOQ	39.521	11.843	<LOQ	<LOQ	<LOQ
TS_19-6_CI2_B	0.558	0.464	<LOQ	30.535	8.524	<LOQ	<LOQ	ND
TS_19-6_NHCl2_A	ND	ND	ND	1.190	0.380	ND	ND	ND
TS_19-6_NHCl2_B	ND	ND	ND	2.235	0.726	ND	ND	ND
TS_26-6_NHCl2_A	ND	ND	ND	1.045	0.577	ND	ND	ND
TS_26-6_NHCl2_B	ND	ND	ND	1.856	1.057	ND	ND	ND
TT_26-6_CI2_A	0.435	0.416	<LOQ	19.971	9.999	<LOQ	<LOQ	<LOQ
TT_26-6_CI2_B	0.626	0.659	<LOQ	32.674	14.600	<LOQ	<LOQ	<LOQ
TT_19-6_CI2_A	0.589	0.559	<LOQ	27.545	15.288	4.303	<LOQ	<LOQ
TT_19-6_CI2_B	0.335	0.367	<LOQ	14.816	8.206	<LOQ	<LOQ	<LOQ
TT_19-6_NHCl2_A	ND	ND	ND	1.337	0.778	ND	ND	ND
TT_19-6_NHCl2_B	ND	ND	ND	0.692	0.328	ND	ND	ND
TT_26-6_NHCl2_A	ND	ND	ND	1.026	0.639	ND	ND	ND
TT_26-6_NHCl2_B	ND	ND	ND	0.912	0.504	ND	ND	ND
P1_26-6_CI2_A	0.372	0.496	<LOQ	14.309	10.495	<LOQ	<LOQ	ND
P1_26-6_CI2_B	0.447	0.584	<LOQ	17.745	12.590	<LOQ	<LOQ	ND
P1_19-6_CI2_A	0.272	0.348	<LOQ	12.564	6.866	<LOQ	<LOQ	ND
P1_19-6_CI2_B	0.415	0.559	<LOQ	24.592	13.187	4.507	<LOQ	<LOQ
P1_19-6_NH2Cl_A	ND	ND	ND	0.984	0.535	<LOQ	ND	ND
P1_19-6_NH2Cl_B	ND	ND	ND	1.564	1.167	<LOQ	ND	ND
P1_26-6_NHCl2_A	ND	ND	ND	0.971	0.405	ND	ND	ND
P1_26-6_NHCl2_B	ND	ND	ND	1.859	1.060	ND	ND	ND
P2_26-6_CI2_A	<LOQ	0.373	ND	3.135	13.402	ND	ND	ND
P2_26-6_CI2_B	<LOQ	0.371	ND	1.934	21.439	<LOQ	<LOQ	ND
P2_19-6_CI2_A	<LOQ	<LOQ	ND	3.152	5.994	<LOQ	<LOQ	ND
P2_19-6_CI2_B	0.390	0.352	ND	6.531	6.987	ND	<LOQ	ND
P2_19-6_NH2Cl_A	ND	ND	ND	0.428	0.372	ND	ND	ND
P2_19-6_NH2Cl_B	ND	ND	ND	0.600	0.491	ND	ND	ND
P2_26-6_NH2Cl_A	ND	ND	ND	0.476	1.062	ND	ND	ND
P2_26-6_NH2Cl_B	ND	ND	ND	0.232	0.507	ND	ND	ND
P3_19-6_CI2_A	0.168	0.250	ND	3.642	4.037	<LOQ	ND	ND
P3_19-6_CI2_B	0.443	0.480	ND	11.140	7.369	<LOQ	<LOQ	ND
P3_26-6_CI2_A	0.307	0.534	ND	6.741	15.099	<LOQ	<LOQ	ND
P3_26-6_CI2_B	0.324	0.599	ND	7.311	16.767	<LOQ	<LOQ	ND

P3_19-6_NHCl2_A	ND	ND	ND	0.531	0.256	ND	ND	ND
P3_19-6_NHCl2_B	ND	ND	ND	0.974	0.330	ND	ND	ND
P3_26-6_NHCl2_A	ND	ND	ND	0.535	0.660	ND	ND	ND
P3_26-6_NHCl2_B	ND	ND	ND	0.377	0.510	ND	ND	ND
ETAP_14-6_Cl2_A	ND	<LOQ	ND	0.170	2.163	ND	ND	ND
ETAP_14-6_Cl2_B	ND	<LOQ	ND	0.174	2.010	ND	ND	ND
ETAP_26-6_Cl2_A	ND	<LOQ	ND	0.100	2.792	ND	ND	ND
ETAP_26-6_Cl2_B	ND	<LOQ	ND	<LOQ	2.722	ND	ND	ND

Haloacetamidas (HACMs)

HACMs*	TCACM	BDCACM	DBCACM
LOD	1	5	7.5
LOQ	2	10	15
TS_26-6_CI2_A	2.853	<LOQ	<LOQ
TS_26-6_CI2_B	3.927	<LOQ	<LOQ
TS_19-6_CI2_A	2.971	<LOQ	<LOQ
TS_19-6_CI2_B	2.394	<LOQ	<LOQ
TS_19-6_NHCl2_A	ND	ND	ND
TS_19-6_NHCl2_B	ND	ND	ND
TS_26-6_NHCl2_A	ND	ND	ND
TS_26-6_NHCl2_B	ND	ND	ND
TT_26-6_CI2_A	<LOQ	<LOQ	<LOQ
TT_26-6_CI2_B	3.202	<LOQ	<LOQ
TT_19-6_CI2_A	3.149	<LOQ	<LOQ
TT_19-6_CI2_B	<LOQ	<LOQ	<LOQ
TT_19-6_NHCl2_A	ND	ND	ND
TT_19-6_NHCl2_B	ND	ND	ND
TT_26-6_NHCl2_A	ND	ND	ND
TT_26-6_NHCl2_B	ND	ND	ND
P1_26-6_CI2_A	<LOQ	<LOQ	<LOQ
P1_26-6_CI2_B	2.572	<LOQ	<LOQ
P1_19-6_CI2_A	<LOQ	<LOQ	ND
P1_19-6_CI2_B	2.403	<LOQ	<LOQ
P1_19-6_NH2Cl_A	ND	ND	ND
P1_19-6_NH2Cl_B	ND	ND	ND
P1_26-6_NHCl2_A	ND	ND	ND
P1_26-6_NHCl2_B	ND	ND	ND
P2_26-6_CI2_A	ND	ND	<LOQ
P2_26-6_CI2_B	ND	ND	ND
P2_19-6_CI2_A	ND	ND	ND
P2_19-6_CI2_B	<LOQ	ND	ND
P2_19-6_NH2Cl_A	ND	ND	ND
P2_19-6_NH2Cl_B	ND	ND	ND
P2_26-6_NH2Cl_A	ND	ND	ND
P2_26-6_NH2Cl_B	ND	ND	ND
P3_19-6_CI2_A	<LOQ	<LOQ	ND
P3_19-6_CI2_B	2.051	<LOQ	ND
P3_26-6_CI2_A	<LOQ	<LOQ	<LOQ
P3_26-6_CI2_B	<LOQ	<LOQ	<LOQ
P3_19-6_NHCl2_A	ND	ND	ND
P3_19-6_NHCl2_B	ND	ND	ND

P3_26-6_NHCl2_A	ND	ND	ND
P3_26-6_NHCl2_B	ND	ND	ND
ETAP_14-6_Cl2_A	ND	ND	ND
ETAP_14-6_Cl2_B	ND	ND	ND
ETAP_26-6_Cl2_A	ND	ND	ND
ETAP_26-6_Cl2_B	ND	ND	ND

- Los analitos *DBACM*, *DCACM*, *BCIACM*, *BIACM*, *TBACM* (LOD= 10 µg/L y LOQ= 25 µg/L), y *CIACM*, *DIACM* (LOD= 5 µg/L y LOQ= 10 µg/L), no fueron detectados en ninguna de las muestras.

ANEXO C

IDENTIFICACIÓN DE DBPS HALOGENADOS MEDIANTE EL ENFOQUE DE ANÁLISIS NO DIRIGIDO

Muestras TT	Rt (min)	m/z del ion mayoritario	Área en HOCl/OCl-	Área en NH ₂ Cl	Confirmado*
Chloral hydrate (TCAL)	3.9	81.9371	XXXXX	XX	Sí
Dibromochloromethane	4.2	128.89208	XXXXXX	XXXXX	Sí
1,2-dichloro-2-methyl-propane	4.3	77.01522	XXXX		No
Dichloroacetonitrile (DCAN)	4.5	73.9793	XXXXX	XXX	Sí
Dichloriodometano (DCIM)	4.6	82.94492	XX	XX	Sí
Chloroacetonitrile (CAN)	4.6	47.97614	XXX	XX	Sí
1-Chloro-2-methyl-2-propanol	4.7	93.01012	XXXXXX	XX	No
Bromodichloroacetonitrile (BDCAN)	4.9	107.94017	XXX		Sí
Carbon tetrachloride	5.0	116.90594	XXXX	XXX	No
Bromodichloroacetaldehyde (BDCAL)	5.5	82.94492	XXXXX	XXX	Sí
C ₄ H ₇ OCl	5.7	107.02574	XXXX	XXX	No
Contiene CH ₂ Br ₂ , CH ₂ Br, y C ₂ H ₂ OBr	5.7	92.93342	XXX	XXXX	No
Tribromo-methane	5.8	172.84163	XXXXX	XXXX	Sí
2,3-dichloro-2-methyl-butane	5.9	77.01522	XXXX		No
Chloro-benzene	6.0	112.00736	XXX	XX	No
Bromoacetone (C ₃ H ₅ OBr)	6.1	138.95752	XXXX	XXX	No
1,1-Dimethyl-3-chloropropanol	6.2	59.04913	XXXX	XXX	No
Bromochloriodomethane (BCIM)	6.3	128.892	XX	XXX	Sí
Bromochloro-acetonitrile (BCAN)	6.3	73.97913	XXXXX	XXXX	Sí
Bromoacetonitrilo (BAN)	6.5	120.9344	XXX	X	Sí
Dibromochloroacetonitrile (DBCAN)	6.7	206.80257	XX		Sí
1,1,1-trichloro-2-propapone	7.2	43.01781	XXXX		No
Chlorodibromoacetaldehyde (DBCAL)	7.5	128.89208	XXXX	XXX	Sí

Trans-1,3-Dichlorocyclopentane	7.8	67.05424	XXXX		No
Dibromiodomethane (DBIM)	8.1	172.84169	XXX	XXXX	Sí
Dibromoacetonitrile (DBAN)	8.5	117.92857	XXXXX	XXX	Sí
Chlorodiiodomethane (CDIM)	8.6	174.88036	XX	XX	Sí
C ₃ H ₅ NCl ₂	8.9	92.03	XXX		No
1-Bromo-1,1-dichloro-2-propapone	9.2	43.01781	XXX	XX	No
Tribromoacetaldehyde (TBAL)	9.5	172.84169	XXX	XX	Sí
Bromodiiodomethane (BDIM)	10.5	218.8298		X	Sí
Contiene C ₂ HCl ₄ , CCl ₃ , CHCl ₂	11.9	161.09596	XX		No
2,2,2-trichloroacetamide (TCAM)	15.1	44.0131	XX		Sí
Bromodichloroacetamida (BDCAM)	16.7	44.0131	XX	X	Sí
Chloromethanesulfonyl-dichloromethanesulfonyl chloride	18.9	116.90597	XXX		No
Phenol, 4-chloro-2,6-bis(1,1-dimethylethyl)	19.2	225.10371	XXX	X	No
2-Bromo-4,6-di-tert-butylphenol	20.3	269.05334	XXXXX	XX	No

Observación:

* IS = Compuesto verificado con solución patrón

X = Compuesto detectado mediante ambos enfoques (análisis dirigido y no dirigido)

Leyenda para Área en HOCl/OCl⁻ y NH₂Cl

> 100,000,000	XXXXXX
10,000,000 – 100,000,000	XXXXX
1,000,000 – 10,000,000	XXXX
100,000 – 1,000,000	XXX
10,000 – 100,000	XX
< 10,000	X