

# Évaluation d'étalons commerciaux portant la dénomination « Triton X-100 »

Mars 2025

## Auteurs

---

*Bertille Bonnaud*  
LNE  
*bertille.bonnaud@lne.fr*

*Véronique Le Diouren*  
LNE  
*veronique.lediouren@lne.fr*

*Béatrice Lalère*  
LNE  
*beatrice.lalere@lne.fr*

## Vérification du document

---

*Jean-Philippe Ghestem*  
BRGM  
*jp.ghestim@brgm.fr*

## Les correspondants

---

OFB : Nicolas Gaury, *nicolas.gaury@ofb.gouv.fr*

Aquaref : Bertille Bonnaud (LNE)

## Référence et droits d'usage

---

Référence du document : Bertille Bonnaud, Véronique Le Diouren, Béatrice Lalère – Évaluation de standards commerciaux portant la dénomination « Triton X-100 » – Rapport AQUAREF 2025 – 28 p

Droits d'usage : Accès libre

## SOMMAIRE

---

|     |                                            |    |
|-----|--------------------------------------------|----|
| 1   | Contextes et objectifs.....                | 6  |
| 1.1 | Présentation du Triton x-100.....          | 6  |
| 1.2 | Règlementation .....                       | 6  |
| 1.3 | Objectifs de l'étude .....                 | 7  |
| 2   | Standards commerciaux étudiés .....        | 7  |
| 2.1 | Description .....                          | 9  |
| 2.2 | Prix et conditionnement.....               | 9  |
| 2.3 | Pureté.....                                | 9  |
| 2.4 | Homogénéité .....                          | 9  |
| 2.5 | Stabilité.....                             | 9  |
| 2.6 | Condition de stockage.....                 | 10 |
| 2.7 | Remarques sur les certificats.....         | 10 |
| 3   | Méthode analytique.....                    | 10 |
| 4   | Distribution des OPnEO .....               | 12 |
| 4.1 | Comparaison de la surface .....            | 12 |
| 4.2 | Comparaison des pourcentages relatifs..... | 12 |
| 5   | Conclusions .....                          | 13 |
| 6   | Annexes .....                              | 14 |

## Liste des annexes

---

|                                                                         |    |
|-------------------------------------------------------------------------|----|
| Annexe 1 : Certificats d'analyse des standards étudiés.....             | 14 |
| Annexe 2 : Documents supplémentaires reçu avec le standard 6 (TCI)..... | 25 |
| Annexe 3 : Répartition moyenne (%) des OPnEO pour chaque étalon .....   | 27 |

## Résumé

L'arrêté du 26 avril 2022 qui modifie l'arrêté du 25 janvier 2010 établissant le programme de surveillance de l'état des eaux en application de l'article R. 212-22 du code de l'environnement établit une liste de substances pertinentes à surveiller (SPAS) en se basant sur l'étude Emergents Nationaux (EMNAT) menée en 2018. Le Triton X-100 figure sur cette liste. L'appellation « Triton X-100 » est le nom commercial d'une solution contenant un mélange d'octylphénols polyéthoxylés avec différents nombres « n » de groupements éthoxy (OPnEO). Il est indiqué dans l'arrêté que les paramètres individuels sont en cours de définition. Les OPnEO suivis lors de la campagne EMNAT étaient ceux allant de n=7 à n=11, ces derniers étant majoritaires dans l'étalon commercial utilisé. Sur cette base, AQUAREF a publié une note recommandant de surveiller les mêmes OPnEO lors d'une analyse de Triton X-100.

Il existe sur le marché, un grand nombre d'étalons commerciaux portant l'appellation « Triton X-100 » et qui sont liés à des numéros CAS différents. Les informations concernant la composition du mélange (et sa répartition) ne sont en général pas fournies par les fabricants. Or il est important de connaître la nature des OPEO constituant les différents Triton X-100 disponibles sur le marché afin de répondre correctement à la réglementation.

Suite à ces questionnements et dans le cadre de la poursuite des travaux AQUAREF pour disposer de recommandation pour le démarrage de la surveillance, il a été décidé d'effectuer une évaluation de six étalons commerciaux vendus sous l'appellation « Triton X-100 » afin de vérifier qu'ils sont bien tous similaires en terme de répartition des OPnEO et de conclure sur leur pertinence pour leur utilisation dans le cadre de la surveillance réglementaire.

Une grande différence entre les six références étudiées concerne le prix et le conditionnement des étalons. Le prix peut, en partie, s'expliquer par les informations disponibles sur le certificat d'analyse ; elles sont très différentes d'un étalon à un autre. La répartition des OPnEO de chaque étalon a été étudiée et a permis de conclure que les six produits commerciaux étudiés présentent un mélange d'OPnEO similaire, dans les mêmes proportions. Sous réserve du contenu du certificat fourni par le fabricant, ces étalons commerciaux peuvent être mis en œuvre pour la surveillance réglementaire du paramètre Triton X-100.

### **Mots clés** (thématique et géographique) :

Triton X-100, OPnEO, étalons commerciaux, surveillance, eau

## Abstract

In France, Triton X-100 is included in this list of relevant substances to be monitored (Arrêté du 26 avril 2022 qui modifie l'arrêté du 25 janvier 2010 établissant le programme de surveillance de l'état des eaux en application de l'article R. 212-22 du code de l'environnement établit une liste de substances pertinentes à surveiller). The "Triton X-100" designation is associated with a solution containing a mixture of polyethoxylated octylphenols with different numbers 'n' of ethoxy groups (OPnEO). During previous monitoring campaign conducted in France, the OPnEOs monitored were those with n=7 to n=11, which constituted the majority in the commercial standard that was used. Consequently, AQUAREF published a note recommending that the same OPnEOs should be monitored when analysing Triton X-100.

There are many commercial standards bear the name 'Triton X-100' and are also associated with different CAS numbers. Information on the composition of the mixture and the OPnEO distribution are generally not provided by the manufacturers. However, in order to comply with regulations, it is important to know which OPnEOs are present in the commercial standards and their distribution.

In order to adress these questions and to provide recommendations for the start of monitoring, a study was conducted on six commercial standards sold under the name 'Triton X-100'. The objective of this study was to determine whether they have comparable characteristics with regards to the OPEOs present and their distribution.

The main distinction among the six commercial standards examined relates to the cost of the standards, which can be partly explained by the information available on the certificate of analysis, which varies considerably from one standard to another. The distribution of OPnEOs within each standard was studied and it was found that the six commercial standards studied had a similar mixture of OPnEOs in the same proportions.

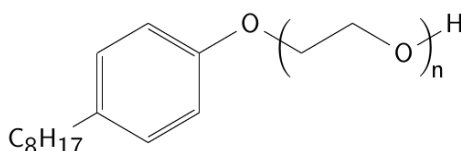
### **Key words** (thematic and geographical area):

Triton X-100, OPnEO, commercial standards, monitoring, water

# 1 Contextes et objectifs

## 1.1 Présentation du Triton x-100

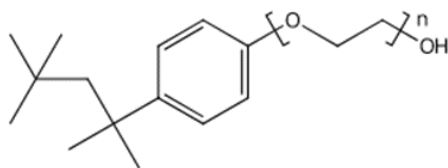
Le Triton X-100 est le nom commercial d'une solution contenant un mélange d'octylphénols polyéthoxylés avec différents nombres de groupements éthoxy. Les octylphénols polyéthoxylés (OPnEO) font partie des alkylphénols polyéthoxylés (APnEO), avec les nonylphénols polyéthoxylés (NPnEO) et les dodécylphénol polyéthoxylés (DPnEO). Ils sont produits à partir de l'octylphénol. La structure générale des OPnEO est représentée en **Figure 1**. Il existe des isomères ortho, méta et para et le groupement C<sub>8</sub>H<sub>17</sub> peut être linéaire ou ramifié.



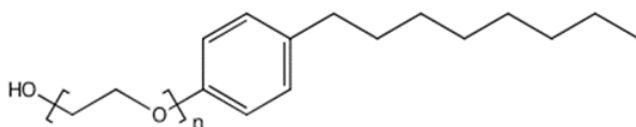
**Figure 1** : Structure générale des OPnEO sous la forme para

Il existe trois numéros CAS associés à des formes génériques et/ou mélange d'OPnEO : 9002-93-1, 9036-19-5 et 26636-22-8 :

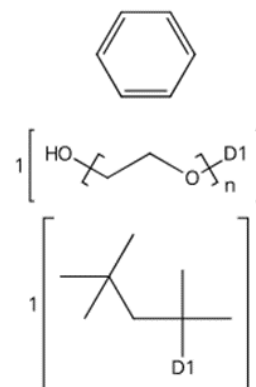
- Les numéros CAS 9036-19-5 et 9002-93-1 correspondent aux OPnEO sous leur forme ramifiée (voir Figure 2 et Figure 3).
- Le numéro CAS 9036-19-5 correspond aux isomères para, méta et ortho (voir Figure 3) alors que le numéro CAS 9002-93-1 ne correspond qu'à la substitution para (voir Figure 2).
- Le numéro CAS 26636-22-8 correspond à la substitution para des OPnEO sous leur forme linéaire uniquement (voir Figure 4).



**Figure 2** : Structure associée au numéro CAS 9002-93-1



**Figure 4** : Structure associée au numéro CAS 26636-22-8



**Figure 3** : Structure associée au numéro CAS 9036-19-5

Il existe deux codes SANDRE associés à des mélanges d'OPnEO :

- Le code SANDRE 8322 est associé à la somme des 4-tert-polyéthoxylates (avec un nombre de groupe éthoxy compris entre 7 à 11), c'est-à-dire à la somme des OPnEO avec 7 à 11 groupements éthoxy en position para chaîne ramifiée. Ce code SANDRE est associé au numéro CAS 9002-93-1. Dans les commentaires associés à ce paramètre, il est indiqué qu'une des appellations commerciales liée à ce code CAS est "Triton X 100".
- Le code SANDRE 6233 est associé au paramètre « 4-Octylphénol polyéthoxylate ». Il est décrit comme « un mélange de différents isomères de l'octyl phénol éthoxylate ». Ce code SANDRE est associé au numéro CAS 26636-32-8 et donc à des OPnEO sous leur forme para et linéaire.

## 1.2 Règlementation

L'arrêté du 26 avril 2022 qui modifie l'arrêté du 25 janvier 2010 établissant le programme de surveillance de l'état des eaux en application de l'article R. 212-22 du code de l'environnement établit une liste de substances pertinentes à surveiller () en se basant sur l'étude Emergents Nationaux (EMNAT) menée

en 2018 (Assoumani et al., 2020). Le Triton X-100, qui fait partie de cette liste, est associé au code SANDRE 8322 et au numéro CAS 9002-93-1. Ce numéro CAS est différent de celui utilisé dans la campagne EMNAT. Cependant, il semble plus adapté étant donné qu'il est associé au numéro SANDRE 8322 et qu'il correspond au OPnEO sous leur forme para et ramifiée. Il est par ailleurs indiqué que les paramètres individuels sont en cours de définition et seront précisés dans la fiche SANDRE correspondante. Lors de la campagne EMNAT, les résultats « Triton X-100 » correspondaient aux OPnEO de n=7 à n=11. Comme indiqué précédemment, le Triton™ X-100 est le nom d'un produit industriel commercial. A terme, le terme « Triton X-100 » devra être remplacé par les dénominations de substances chimiques dans l'arrêté surveillance.

### **1.3 Objectifs de l'étude**

Cette étude a pour objectif de caractériser les étalons disponibles commercialement sous la dénomination « Triton X-100 ». Pour cela, différents étalons, acquis auprès de plusieurs fabricants et fournisseurs, ont été caractérisés et comparés. Ce travail permettra ainsi de fournir des recommandations quant à l'utilisation de ces étalons pour l'analyse du « Triton X-100 » dans un cadre réglementaire.

## **2 Standards commerciaux étudiés**

Dans le cadre de cette étude, six étalons commerciaux de différents fabricants ont été achetés auprès de plusieurs fournisseurs. Cette étude n'est pas exhaustive, il existe d'autres standards portant la dénomination Triton X-100. Il est important de noter que la solution commerciale utilisée lors de la campagne EMNAT a été sélectionnée dans cette étude. Les certificats d'analyse des étalons commerciaux sont disponibles en Annexe 1 et différentes informations les concernant sont regroupées dans le Tableau 1.

**Tableau 1** : Description des standards commerciaux étudiées

| Référence rapport | Fabricant (Fournisseur)    | Dénomination commerciale                            | N° CAS<br>(o : ortho,<br>m : méta,<br>p : para) | Référence   | Lot                | n<br>(nombre de<br>groupes<br>ethoxy) | Condition-<br>nement             | Pureté          | Prix           | Prix au<br>litre |
|-------------------|----------------------------|-----------------------------------------------------|-------------------------------------------------|-------------|--------------------|---------------------------------------|----------------------------------|-----------------|----------------|------------------|
| Étalon 1          | Merck (Merck)              | Triton X-100                                        | 9036-19-5<br>(o, m, p –<br>ramifié)             | 108603.1000 | K52842003          | n.i.                                  | 1 L                              | n.i.            | 179 €<br>(HT)  | 179 €/L          |
| Étalon 2          | Chiron (BCP<br>instrument) | POE (3-23) tert<br>Octylphenol                      | 9002-93-1<br>(p – ramifié)                      | 8388-X      | 6886               | 3-23                                  | 100 mg                           | 99,2 ±<br>0,3 % | 178 €<br>(HT)  | 1 895 700<br>€/L |
| Étalon 3          | TRC (CIL)                  | Triton X-100                                        | 9002-93-1<br>(p – ramifié)                      | T886800     | 1-MSW-77-1         | 9 ou 10                               | 1 g                              | > 95%           | 193 €<br>(HT)  | 205 545<br>€/L   |
| Étalon 4          | A2S (CIL)                  | Triton X-100                                        | 9002-93-1<br>(p – ramifié)                      | T801P050    | T801-01-<br>240816 | n.i.                                  | ≈ 50 mg<br>(51,04 mg<br>± 0,63%) | n.i.            | 52,5 €<br>(HT) | 1 118 250<br>€/L |
| Étalon 5          | Sigma-Aldrich<br>(Merck)   | Triton X-100                                        | 9036-19-5<br>(o, m, p –<br>ramifié)             | T8787       | SLCM6763           | n.i.                                  | 50 mL                            | n.i.            | 32,2 €<br>(HT) | 644 €/L          |
| Étalon 6          | TCI (TCI)                  | Polyethylene<br>Glycol Mono-4-<br>octylphenyl Ether | 9002-93-1<br>(p – ramifié)                      | P0873       | MF6YN              | 9,5                                   | 25 g<br>(visqueux)               | n.i.            | 18 €<br>(TTC)  | 767 €/L          |

*n.i.* : non indiqué

## 2.1 Description

L'appellation commerciale « Triton X-100 » apparaît sur tous les certificats d'analyse excepté pour le fabricant TCI. Le numéro CAS 9002-93-1, qui correspond à la forme para et ramifiée des OPnEO, est utilisé pour quatre des six étalons. Les fabricants Sigma-Aldrich et Merck utilisent le numéro CAS 9036-19-5, qui correspond aux isomères ramifiés para, méta et ortho, (étalons 1 et 5).

Le nombre de groupement ethoxy est indiqué seulement pour trois des étalons :

- TRC indique la présence d'OPnEO avec  $n = 9$  ou  $10$ ,
- TCI indique  $n = 9,5$
- Chiron indique  $n = 3$  à  $23$ .

TRC et TCI semblent indiquer les OPnEO majoritaires (dans le cas de TCI, les deux OPnEO majoritaires seraient  $n=9$  et  $n=10$ ) alors que Chiron indique tous les OPnEO présents dans le mélange (les majoritaires ne sont pas indiqués). La distribution des homologues dans ces mélanges n'est indiquée par aucun fabricant. Ces étalons commerciaux étant des mélanges d'OPnEO, la masse molaire n'est indiquée, à juste titre, sur aucun des certificats d'analyses obtenus.

## 2.2 Prix et conditionnement

Le conditionnement et le prix des étalons commerciaux portant la dénomination Triton X-100 varie énormément d'une référence à une autre. Il a été décidé pour cette étude de comparer plusieurs étalons commerciaux avec différents conditionnements et prix. Le prix des standards commerciaux étudiés varie entre 18 et 193 €. Les conditionnements associés à ces prix sont très différents avec une masse de solution visqueuse (50 mg à 25 g) indiquée pour quatre étalons et un volume (50 mL et 1 L) pour deux étalons. En ramenant le prix au litre (en prenant une masse volumique de  $1,065 \text{ g/cm}^3$ ), les prix sont compris entre 178 € et 1 895 700 €. Les trois étalons les plus chers sont ceux de chez Chiron (standard 2), A2S (standard 4) et TRC (standard 3). Ce prix est peut-être expliqué par le fait que les étalons 2 et 3 sont les seuls pour lesquels une information de pureté est disponible et que le 4 est associé à une masse exacte ( $51,04 \text{ mg} \pm 0,63\%$ ). À réception, tous les étalons sont sous forme d'un liquide visqueux. Ces étalons commerciaux sont conditionnés dans des flacons en verre (l'étalon 4 est conditionné dans une ampoule en verre scellée), excepté pour l'étalon 5 qui est conditionné dans un flacon en plastique.

## 2.3 Pureté

L'information concernant la pureté des étalons est seulement disponible pour deux étalons (2 et 3). L'étalon 2 a la pureté la plus élevée, associée à une incertitude. Au contraire, dans le cas de l'étalon 3, le certificat d'analyse livré avec l'étalon indique uniquement une pureté supérieure à 95%. Pour information, le certificat d'analyse trouvé sur internet de ce même lot et correspondant au précédent test effectué sur cet étalon indiquait une pureté de 96,89% (voir Annexe 1.10). Les autres fabricants n'indiquent pas de pureté. Le fournisseur TCI (étalon 6) a été contacté sur cette question de la pureté et a indiqué que la référence n'étant pas d'une substance définie, aucune information de pureté n'était/ne pouvait être fournie. Aucune pureté n'est indiquée par le fabricant A2S, cependant, l'étalon est fourni avec une information de masse exacte  $51,04 \pm 0,63\%$ . Concernant l'étalon 1, Laure Wiest (2021) indique dans sa thèse une pureté de 85%, information non retrouvée sur le certificat d'analyse.

## 2.4 Homogénéité

Il est indiqué par le fabricant A2S que l'homogénéité du produit est évaluée par l'analyse de lots d'échantillons ou par une autre méthode compatible avec l'utilisation prévue du produit et par une procédure conforme aux exigences du système de qualité approprié et du guide ISO 35 §7, aucune autre information particulière n'est disponible pour cette référence. Les fabricants Chiron et A2S indiquent sur le certificat d'analyse qu'il est recommandé de remuer la fiole plusieurs fois pour obtenir une homogénéité. Cependant, dans le cas du standard A2S, il est difficile d'homogénéiser la petite quantité ( $\approx 50 \text{ mg}$ ) présente dans l'ampoule scellée qui peut alors se coller dans la partie supérieure de la fiole scellée.

## 2.5 Stabilité

Les dates d'expiration ne sont indiquées que sur les certificats d'analyse des étalons 1 et 4 (Merck et A2S). Il est indiqué par le fabricant A2S que la stabilité de la référence est assurée jusqu'à la date

d'expiration indiquée sur celle-ci. Les autres fabricants (TRC, Chiron et Sigma-Aldrich) donnent une date à laquelle l'étalon doit être de nouveau testé, ce qui laisse supposer qu'ils garantissent que le composé est stable jusqu'à cette date. Aucun autre fabricant ne fait mention de la stabilité de leur référence. Un document supplémentaire reçu avec l'étalon 6 indique qu'aucune date d'expiration ni de « retest » n'est donnée pour l'étalon fabriqué par TCI. Il y est indiqué, qu'une fois ouvert, si l'étalon est conservé dans les bonnes conditions, il est stable pendant « plusieurs années ». Cependant, TCI recommande de tester un an après l'achat du composé pour vérifier que le produit répond toujours aux exigences de son application.

**Tableau 2 : Stabilité des standards**

| Référence rapport | Fabricant (Fournisseur) | Lot            | Type              | Date       |
|-------------------|-------------------------|----------------|-------------------|------------|
| Standard 1        | Merck (Merck)           | K52842003      | Date d'expiration | 31/10/2025 |
| Standard 2        | Chiron (BCP instrument) | 6886           | Date de retest    | 10/2028    |
| Standard 3        | TRC (CIL)               | 1-MSW-77-1     | Date de retest    | 12/3/2026  |
| Standard 4        | A2S (CIL)               | T801-01-240816 | Date d'expiration | 16/08/2027 |
| Standard 5        | Sigma-Aldrich (Merck)   | SLCM6763       | Date de retest    | 01/2026    |
| Standard 6        | TCI (TCI)               | MF6YN          | /                 | /          |

## 2.6 Condition de stockage

Trois fabricants (Chiron, A2S, TCI) recommandent un stockage au réfrigérateur. TCI indique dans la fiche de donnée sécurité (FDS) que le conteneur doit être gardé dans un endroit frais et à l'abri de la lumière. Un document supplémentaire reçu avec le composé indique une température de stockage comprise entre 0 et 10°C. Les deux autres fabricants (Merck et Sigma-Aldrich) n'indiquent pas de condition de stockage.

Remarque : aucun des étalons n'a été reçu dans un contenant réfrigéré. TCI indique que le transport dans des conditions normales n'affecte pas le produit pendant une « courte » période (la durée de cette période n'est pas précisée).

**Tableau 3 : Condition de stockage des standards étudiés**

| Référence rapport | Fabricant (Fournisseur) | Stockage                                             |
|-------------------|-------------------------|------------------------------------------------------|
| Étalon 1          | Merck (Merck)           | /                                                    |
| Étalon 2          | Chiron (BCP instrument) | 5 ± 3°C à l'abri de l'air et de la lumière           |
| Étalon 3          | TRC (CIL)               | 4°C                                                  |
| Étalon 4          | A2S (CIL)               | 4 ± 4°C dans le noir                                 |
| Étalon 5          | Sigma-Aldrich (Merck)   | /                                                    |
| Étalon 6          | TCI (TCI)               | 0-10°C dans un endroit sec et à l'abri de la lumière |

## 2.7 Remarques sur les certificats

- Dans le certificat de référence de l'étalon A2S, il est indiqué que l'étalon peut être utilisé en tant que matériau de référence afin de valider des protocoles analytiques et que ce produit peut être utilisé pour l'identification (RM) et/ou quantification (CRM).  
*Remarque : pour qu'un étalon soit déclarer CRM, il est nécessaire de lui associer une pureté.*
- Chiron indique que son étalon est un matériau de référence.

## 3 Méthode analytique

Les solutions mères ont été préparées dans le méthanol (MeOH) à des concentrations comprises entre 500 et 1 500 µg/mL par gravimétrie. Les solutions filles à des concentrations de 1 µg/mL ont été préparées par volumétrie et par gravimétrie à partir des solutions mères dans un mélange Eau/MeOH 50/50 + 0,1 % acide formique (AF) + 10 mM acétate d'ammonium (NH<sub>4</sub>Ac) (Wiest, 2021).

Une méthode en chromatographie liquide couplée à un spectromètre de masse en tandem (LC-MS/MS) XEVO TQ-MS (Waters) a été développée dans le but de caractériser les différents étalons. Les conditions spectrométriques et chromatographiques utilisées sont respectivement résumées dans le **Tableau 4** et le **Tableau 5**. La phase mobile utilisée est composée d'eau 0,1% AF et 10 mM de  $\text{NH}_4\text{AF}$  comme phase aqueuse (A) et de 100% MeOH comme phase organique (B). L'injection est effectuée en mode isocratique (30/70 A/B) pendant 20 minutes. L'analyse est effectuée en mode MRM sans fragmentation (analyse  $[\text{M}+\text{NH}_4]^+ > [\text{M}+\text{NH}_4]^+$ ) avec les paramètres suivants : span à 0,1 uma, dwell time à 0,022 s, tension de cône à 30 V et énergie de collision à 2 V (cette tension est identique à celle appliquée en full scan pour éviter une quelconque fragmentation dans la cellule de collision). Les temps de rétention ( $\text{Tr}$ ), lorsqu'ils ont pu être déterminés, et les  $m/z$  des adduits ammoniums des OPnEO sont répertoriés dans le **Tableau 6**. Les  $m/z$  des adduits ammonium ont été déterminés à partir de la moyenne des  $m/z$  obtenus sur les spectres de masses extraits du full scan des six étalons.

**Tableau 4** : Conditions spectrométriques utilisées

|                                     |                   |
|-------------------------------------|-------------------|
| <b>Tension de cône</b>              | 30 V <sup>1</sup> |
| <b>Tension de capillaire</b>        | 3,5 kV            |
| <b>Température de désolvatation</b> | 550 °C            |
| <b>Débit désolvatation</b>          | 1000 L/h          |
| <b>Débit cône</b>                   | 0 L/h             |
| <b>Fenêtre d'acquisition (span)</b> | 1 uma             |

**Tableau 5** : Conditions chromatographiques utilisées

|                                |                                |
|--------------------------------|--------------------------------|
| <b>Débit</b>                   | 0,4 mL/min                     |
| <b>Température colonne</b>     | 50°C                           |
| <b>Colonne</b>                 | Waters RP18 1,7µm 2,1 x 100 mm |
| <b>Température échantillon</b> | 10°C                           |
| <b>Volume d'injection</b>      | 15 µL                          |

**Tableau 6** : Adduits et temps de rétention des différents OPnEO

| OPnEO  | Tr (min) | $[\text{M}+\text{NH}_4]^+$ | OPnEO  | Tr (min) | $[\text{M}+\text{NH}_4]^+$ |
|--------|----------|----------------------------|--------|----------|----------------------------|
| OP1EO  | /        | 268,15 <sup>2</sup>        | OP14EO | 6,62     | 840,26                     |
| OP2EO  | 4,80     | 312,15 <sup>2</sup>        | OP15EO | 6,71     | 884,31                     |
| OP3EO  | 5,10     | 356,21                     | OP16EO | 6,85     | 928,50                     |
| OP4EO  | 5,29     | 400,20                     | OP17EO | 6,95     | 972,41                     |
| OP5EO  | 5,50     | 444,10                     | OP18EO | 7,06     | 1016,52                    |
| OP6EO  | 5,67     | 488,14                     | OP19EO | 7,12     | 1060,63                    |
| OP7EO  | 5,78     | 532,15                     | OP20EO | 7,24     | 1104,43                    |
| OP8EO  | 5,92     | 576,13                     | OP21EO | 7,39     | 1148,2 <sup>2</sup>        |
| OP9EO  | 6,05     | 620,19                     | OP22EO | 7,45     | 1192,2 <sup>2</sup>        |
| OP10EO | 6,17     | 664,28                     | OP23EO | /        | 1236,2 <sup>2</sup>        |
| OP11EO | 6,29     | 708,23                     | OP24EO | /        | 1280,2 <sup>2</sup>        |
| OP12EO | 6,39     | 752,24                     | OP25EO | /        | 1324,2 <sup>2</sup>        |
| OP13EO | 6,52     | 796,27                     |        |          |                            |

<sup>1</sup> La tension de cône joue sur l'intensité des pics des adduits ammonium. L'intensité est maximale pour une tension de cône de 30 V avec une disparition complète pour une tension de 70 V.

<sup>2</sup> L'OPnEO n'apparaissait pas sur le spectre de masse obtenu à partir des full scan. Le  $m/z$  indiqué dans la méthode MRM est donc déterminé à partir du  $m/z$  théorique et du décalage en masse de l'appareil.

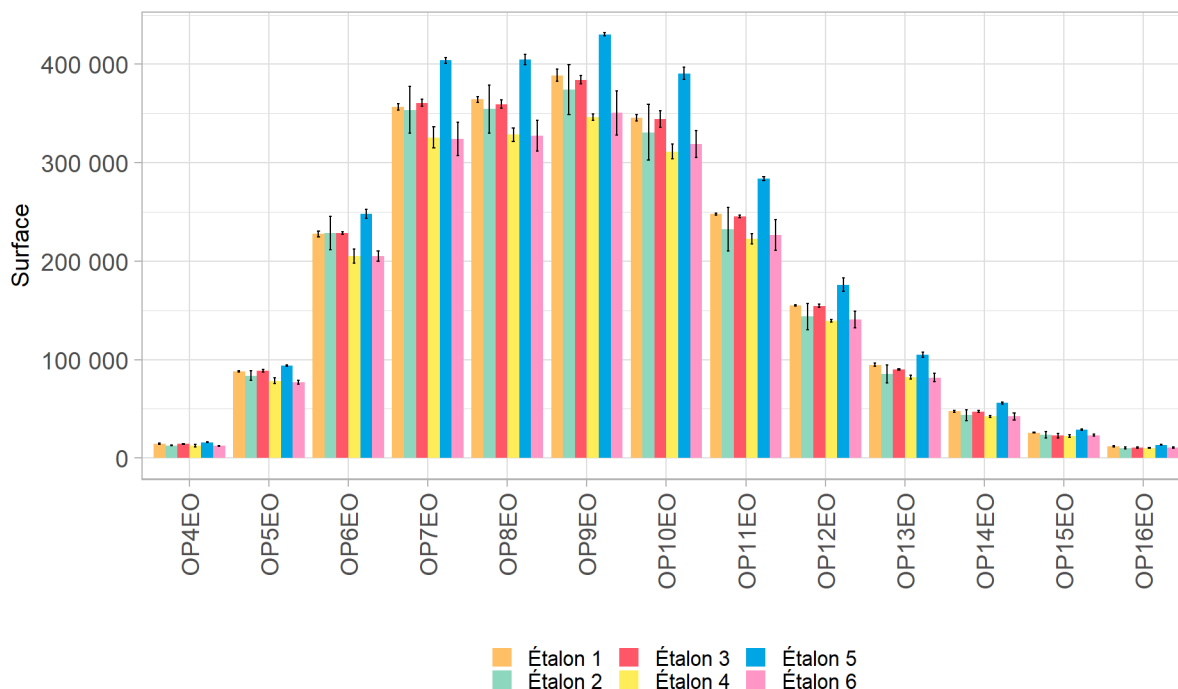
## 4 Distribution des OPnEO

La distribution des OPnEO dans chacun des étalons étudiés a été déterminée à partir de l'analyse de solution à 1 µg/mL préparée par volumétrie et par gravimétrie. Au vu des résultats préliminaires, seuls les OPnEO avec n compris entre 4 et 16 ont été suivis.

### 4.1 Comparaison de la surface

Sur les injections des solutions à 1 µg/mL préparées volumétriquement, une légère différence de surface de chaque OPEO entre les six étalons est observée. Cette différence peut être due soit à des différences de pureté entre les étalons, soit à de légères différences de concentrations du fait de leur préparation (manque de précision sur volume de solution mère et volume de solvant ajouté). Des solutions individuelles de chaque étalon commercial ont donc été préparées gravimétriquement de manière à déterminer avec exactitude leur concentration finale et pouvoir ainsi comparer plus précisément les surfaces des différents OPnEO dans les six étalons pour une même concentration.

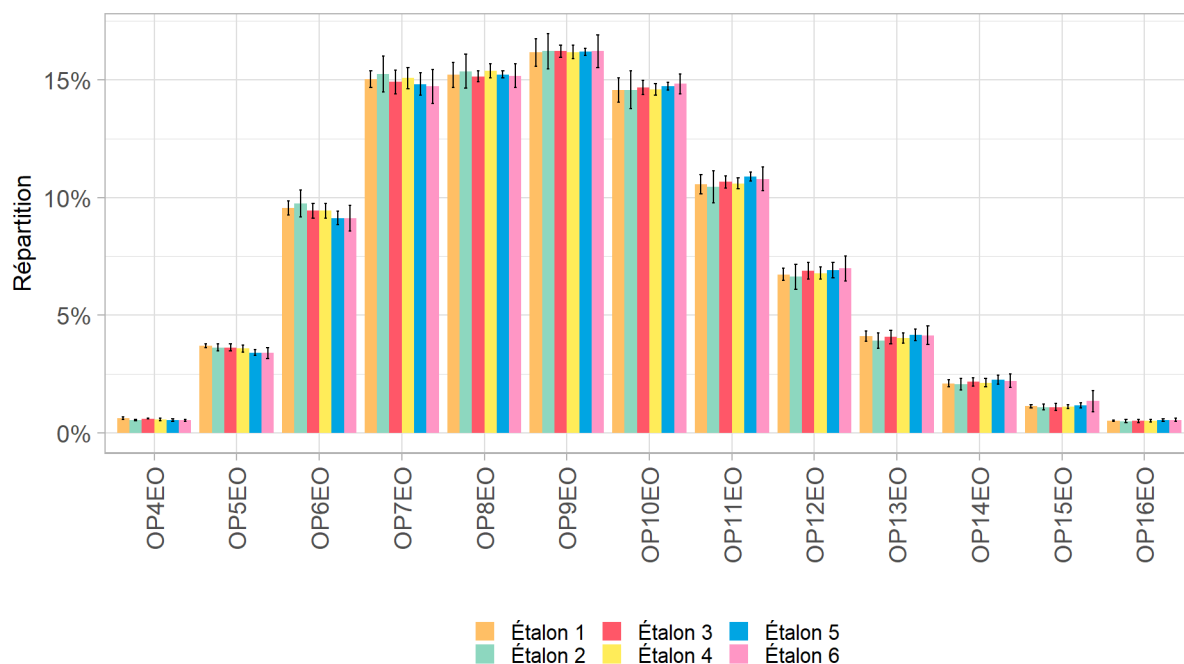
Afin de comparer les différents étalons, les surfaces des OPnEO obtenues pour les injections des solutions préparées par gravimétrie ont été normalisées par la concentration des solutions filles préparées par gravimétrie (*Aire/Concentration*). Les surfaces normalisées, représentées en Figure 5, sont les plus importantes pour l'étalon 5 ce qui indiquerait que sa quantité en OPnEO est supérieure à celle des autres étalons. Cela est surprenant, étant donné que l'étalon 2 a une pureté de 99,2%. Il est supposé que cet étalon a donc une pureté supérieure ou proche de l'étalon 2.



**Figure 5 :** Surfaces normalisées par la concentration obtenues pour les six étalons (solutions préparées par gravimétrie). La barre d'erreur correspond à l'écart-type (n=6).

### 4.2 Comparaison des pourcentages relatifs

Des pourcentages relatifs de chaque substance dans les étalons ont été calculés à partir des surfaces des pics de chaque homologue en faisant l'approximation que tous les homologues ont des facteurs de réponse identiques. La répartition des homologues pour chaque étalon est indiquée en Annexe 3 et est représentée sur la Figure 6. La répartition est équivalente pour tous les étalons. Les OPnEO allant de n=7 à n = 11 représentent environ 71,7% des OPnEO présents dans la solution avec l'OP9EO légèrement plus représenté. Il n'existe donc pas de différence au niveau de la répartition qui pourrait expliquer les différences de prix observés.



**Figure 6 :** Répartition des différents homologues pour chaque standard. La barre d'erreur correspond à l'écart-type ( $n=6$ ).

## 5 Conclusions

Les six étalons étudiés présentent la même répartition des homologues avec les OPnEO avec  $n=7$  à 10 qui sont majoritaires dans le mélange. Dans le cadre de l'arrêté surveillance, pour quantifier le Triton X-100, il a été préconisé de faire la somme des OPnEO avec  $n=7$  à 11 qui représentent plus de 71% du mélange, ce qui est pertinent et représentatif de la contamination en Triton X-100 et permet de comparer les données avec celles de l'étude EMNAT. Pour une quantification plus précise et dans le cadre d'une éventuelle évolution de la surveillance, il serait pertinent d'ajouter l'OP6EO, qui correspond à presque 10 % du mélange. Les six étalons commerciaux sont utilisables pour la surveillance réglementaire. En effet, malgré l'absence d'information de pureté précise sur 5 des 6 étalons commerciaux, les écarts entre les surfaces pour un même OPnEO sont faibles. Cependant, la solution disposant d'une information sur la pureté est cependant à privilégier. Cette étude ne garantit pas que les étalons commerciaux non analysés dans le cadre de cette étude présentent la même répartition. Il conviendra donc de vérifier cette répartition avant toute analyse.

## 6 Annexes

### Annexe 1 : Certificats d'analyse des standards étudiés

---

|                                                                                                         |    |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| <b>Annexe 1.1</b> : Certificat d'analyse de la référence T801P050 du fournisseur A2S - page 1 .....     | 15 |
| <b>Annexe 1.2</b> : Certificat d'analyse de la référence T801P050 du fournisseur A2S - page 2 .....     | 16 |
| <b>Annexe 1.3</b> : Certificat d'analyse de la référence 8388.X du fabricant Chiron - page 1.....       | 17 |
| <b>Annexe 1.4</b> : Certificat d'analyse de la référence 8388.X du fabricant Chiron - page 2.....       | 18 |
| <b>Annexe 1.5</b> : Certificat d'analyse de la référence 108603 du fabricant Merck .....                | 19 |
| <b>Annexe 1.6</b> : Certificat d'analyse de la référence T8787 du fabricant Sigma Aldrich – page 1..... | 20 |
| <b>Annexe 1.7</b> : Certificat d'analyse de la référence T8787 du fabricant Sigma Aldrich - page 2..... | 21 |
| <b>Annexe 1.8</b> : Certificat d'analyse de la référence P0873 du fabricant TCI .....                   | 22 |
| <b>Annexe 1.9</b> : Certificat d'analyse de la référence T886800 du fabricant TRC – à jour .....        | 23 |
| <b>Annexe 1.10</b> : Certificat d'analyse de la référence T886800 du fabricant TRC – ancienne version.. | 24 |



## CERTIFICATE

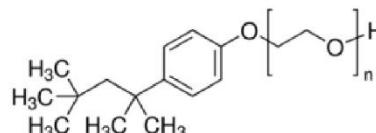
ANALYTICAL  
STANDARD SOLUTIONS

## Triton X-100

## Reference Material

Product code:  
Batch #  
Expiration date:  
Recommended Storage:  
Weight/Vol:  
Operator:

T801P050  
T801-01-240816  
August 16 2027  
4°C±4°C in the dark  
50.0mg  
SYM



|   | Name         | Purity % | CAS       | Raw Material | Quantity*      |
|---|--------------|----------|-----------|--------------|----------------|
| 1 | Triton X-100 | NA ±1%   | 9002-93-1 | 289735       | 51.92mg ±0.64% |

## Chemistry data

Name: Triton X-100  
Formula: (C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>O)<sub>n</sub>C<sub>14</sub>H<sub>22</sub>O  
Molecular Weight: 0.0 g·mol<sup>-1</sup>  
Melting Point: 6 °C  
Boiling Point: >200°C at 1,013 hPa  
Density: 1.065 g/cm<sup>3</sup> at 20 °C  
EINECS: NA  
State: liquid  
Color: colorless

## Analysis

NMR <sup>1</sup>H  
HPLC-DAD  
HPLC-FLD  
GC-FID  
GC-MS  
IC

## Safety Data:



C: corrosive



Xi: irritating



N: dangerous for the environment

Hazard statements: H302-H315-H318-H410

Precautionary statements: P273-P280-P301+P312-P330-P302+P352-P305+P351+P338-P310

A2S is a brand of Analytical Standard  
Solutions company

295 avenue de Boulac  
33127 Saint Jean d'Ilac  
FRANCE  
Distributors list available at [www.a-2-s.com](http://www.a-2-s.com)

Edition Date  
August 16 2024

Certificate Number  
CYL61X

Signature Mr Cyril RUBIO  
CEO

Electronically signed on 2024-08-16 13:39 UTC

**This product is for routine laboratory analysis and research purposes ONLY. Not for human consumption.**

(1) For all details of uncertainty see below

A2S is certified to ISO 9001: 2015 for all its activities on August 20th, 2012 ref N°2012/51356.5.



## GENERAL &amp; QUALITY INFORMATION

- 1- **General Information:** Analytical Standard Solutions – A2S is a producer of Reference Materials in neat, pure in solution and mixture forms. A2S is located in France, 295 Avenue de Boulac, 33127 SAINT JEAN D'ILLAC.

- 2- **Quality Standards and Documentation:**

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |                                                                                     |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|
| A2S is certified ISO 9001: 2015 Quality Management System – Requirements AFNOR Certification Number N°2012/51356.6.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |  |
| A2S is accredited ISO 17034 Producer of Reference Material – Requirements COFRAC Accreditation Number N° 1-6378: The scope is available on <a href="http://www.cofrac.fr">www.cofrac.fr</a><br>The certificates of analysis are designed in accordance with ISO Guide 31 (Reference Materials – Contents of Certificates and labels) and ISO Guide 35 (Reference Materials - General and Statistical Principal for Certification). |                                                                                     |

- 3- **Intended Use:** The product covered by this certificate is designed for calibration or for use in quality control procedures for the specified chemical compound listed on the first page. This product can be used for identification (RM) and/or quantification (CRM). This product can also be used as a reference material to validate analytical procedures, subject to the conditions under Section 11. For neat products quantities sold are integrate in a range between the quantity request and 5% more. If dilution is required, use only Class A glassware and diluents compatible with all certified analytes in this preparation. All solutions should be thoroughly mixed prior to use. Concentration is corrected for chromatographic purity integrating, if necessary, residual water, residual solvent and residual inorganics. No adjustment is required before use.
- 4- **Raw Materials:** Reference standards are prepared from the highest quality starting materials with defined purities. All analytes and solvents are obtained from pre-qualified vendors and then analyzed or evaluated prior to use.
- 5- **Manufacturing:** All the weighing and volumetric equipment is controlled and calibrated either by internal procedure or by ISO/IEC 17025 accredited calibration laboratory.

| Equipment     | Frequency                                               | Quality Norms  |
|---------------|---------------------------------------------------------|----------------|
| Weight        | Annually (ISO 17025 Lab)                                | OIML R76-1     |
| Balances      | Annually (ISO 17025 Lab) & daily (internal procedure)   | NF EN 45501    |
| Micropipettes | Annually (ISO 17025 Lab) & monthly (internal procedure) | NF EN ISO 8655 |

- 6- **Homogeneity Assessment:** Homogeneity of the finished product is assessed by analyzing sample batches or by other method consistent with the intended use of the product and by procedures that comply with the appropriate Quality System requirements, and ISO Guide 35 §7.
- 7- **Stability Assessment:** The manufacturer guarantees the stability of this solution through the expiration date stated on the label, when handled and store according to the conditions stated on the label. To ensure a uniform solution, mix the contents of the sealed container thoroughly prior to use. Care should be taken not to contaminate the contents of the original container.
- 8- **Analytical Quality Control:** All products sold are tested by validated analytical methods specified in the manufacturer's quality system. Spectrums and/or chromatograms are supplied in the way to assure the quality (identification, purity, concentration) of the MR.
- 9- **Uncertainty Statistics and Confidence Limits:** Uncertainty of the concentration is expressed as an expanded uncertainty in accordance with ISO 17034 at the approximate 95% confidence interval using a coverage factor of k=2 and has been calculated by statistical analysis of our production system and incorporates uncertainty of the mass balance, purity factor, balance, micropipettes (for RM) and in addition with homogeneity and stability (for CRM). More details are available in the A2S procedure (PROD 02).
- 10- **Warranties:** The manufacturer warrants that its products shall conform to the description of such products as provided in its catalog or on the specific product label. This warranty is exclusive, and the manufacturer makes no other warranty, express or implied, including any implied warranty of merchantability of fitness for any particular purpose.
- 11- **Legal Notice and Limit of Liability:** This product is for routine laboratory analysis and research purposes only. Due to the hazardous nature, only trained personnel should handle this product. The company's liability will be limited to the replacement of the product or refund of purchase price. Notice of claims must be made within thirty (30) days from the date of delivery.

## PRODUCT INFORMATION SHEET REFERENCE MATERIAL

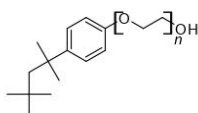


Certificate no.: 8388.X-6886-2

### 1. Description of the reference material (RM)

#### 1.1. General product data

Catalogue #: **8388.X**  
Product name: POE (3-23) tert-Octylphenol  
Synonym: Triton X-100 (n=3-23)  
Next retest date: 2028/10  
Long-term storage: +5 °C ± 3 °C. Protect from air and light.  
Short-term storage: This product is suitable for transit at ambient temperatures.  
CAS #: [9002-93-1]  
Molecular formula:  $(C_2H_4O)_n C_{14}H_{22}O$   
Molecular weight (g/mol): N/A  
Structure:



#### 1.2. Batch specific data

Batch #: **6886**  
Chromatographic purity: 99.2 ± 0.3 %  
Appearance: Clear viscous liquid

#### 1.3. Chemical analysis

| Analysis/Calculation                      | Method #           | Results  |
|-------------------------------------------|--------------------|----------|
| Chromatographic purity by LC-UV (210 nm): | 10769 <sup>1</sup> | 99.2 %   |
| Identity by LC-MS:                        | 10769 <sup>1</sup> | Complies |
| Identity by IR:                           | External           | Complies |
| Refractive index:                         | External           | 1.492    |

### 2. General information

#### 2.1. Intended use of the RM

This reference material is intended for laboratory use only. It may be used for identification, quality control, calibration or assigning values. A reference material should only be used for a single purpose in a given measurement. It is not suitable for human or animal consumption.

<sup>1</sup>Chiron AS analytical raw data and chromatograms are available upon request.

Your quality is our business

Chiron AS | Stiklestadveien 1 | NO-7041 Trondheim | Norway

+47 73 87 44 90 | sales@chiron.no | www.chiron.no | Reg.no 924 361 360

8388.X-6886-2

Page 1 of 2

## PRODUCT INFORMATION SHEET

### REFERENCE MATERIAL



#### 2.2. Instruction for use of the RM

Allow the RM to reach room temperature before use. Where applicable, it is recommended to invert the vial several times to achieve homogeneity before opening.

If storage is required after opening, make sure to close the cap tightly and keep away from light and moisture.

This product is supplied with an overfill to assist recovery of the specified quantity. Users should quantitatively transfer the desired amount and dissolve with an appropriate solvent. It is recommended to correct for both net purity, and salt/conjugated acid where applicable.

#### 2.3. Metrological traceability

All weights, volumes and temperatures are controlled daily using in-house procedures that are controlled against traceable masters according to requirements in ISO/IEC 17025.

#### 2.4. Uncertainty

Uncertainty (U) for products with internal analysis is expressed as an expanded uncertainty in accordance with ISO/IEC 17025 and ISO 17034 at the approximate 95 % confidence interval using a coverage factor of  $k = 2$ . It has been calculated by multiplying the combined uncertainty  $u$  with an appropriate coverage factor.

#### 2.5. Retest/expiry information

The next retest date is based on current knowledge and on the unopened container being stored according to the recommended storage conditions stated in this document. Warranty can only be guaranteed when following these storage recommendations.

#### 2.6. Safety

All reference materials should be considered potentially hazardous and should only be used by qualified laboratory personnel. Users should minimize their exposure and use appropriate personal protective equipment when handling. Please consult the Safety Data Sheet (SDS) for detailed information. They are available online at [www.chiron.no](http://www.chiron.no).

Issued by:

Trondheim, October 9, 2023

Solveig Bye Hauge, Quality Assurance Manager  
Chiron AS

The purchaser must determine the suitability of this product for its particular use. Chiron AS makes no warranty of any kind, express or implied, other than its products meet all quality control standards set by Chiron AS. We do not guarantee that the product can be used for a special application.

#### Revision history

| Version | Date       | Description of change                                                                                                                      |
|---------|------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 0       | N/A        | Initial release                                                                                                                            |
| 1       | 07.09.2023 | Name changed into Product Information Sheet<br>Unique certificate number added<br>Next retest date added<br>Added Document History section |
| 2       | 09.10.2023 | Updated document to new template<br>Product name updated<br>Net purity removed (same as chrom. purity)                                     |

Your quality is our business

8388.X-6886-2

Chiron AS | Stiklestadveien 1 | NO-7041 Trondheim | Norway

+47 73 87 44 90 sales@chiron.no [www.chiron.no](http://www.chiron.no) | Reg.no 924 361 360

Page 2 of 2

**Annexe 1.5 : Certificat d'analyse de la référence 108603 du fabricant Merck**



## Certificate of Analysis

1.08603.1000 Triton® X-100 for analysis  
Batch K52842003

|                                   | Spec. Values  |     | Batch Values |     |
|-----------------------------------|---------------|-----|--------------|-----|
| Identity (IR-spectrum)            | passes test   |     | passes test  |     |
| pH-value (10 g/l)                 | 6.0 - 8.0     |     | 6.7          |     |
| Density (d 20/4)                  | 1.064 - 1.067 |     | 1.064        |     |
| Cloud point                       | 63 - 69       | °C  | 65           | °C  |
| Ethylene oxide (GC)               | ≤ 30          | ppm | ≤ 30         | ppm |
| Dioxane (GC)                      | ≤ 20          | ppm | ≤ 20         | ppm |
| Sulfated ash (600 °C)             | ≤ 0.2         | %   | < 0.10       | %   |
| Water (according to Karl Fischer) | ≤ 0.2         | %   | 0.03         | %   |

Date of release (DD.MM.YYYY) 02.12.2020  
Minimum shelf life (DD.MM.YYYY) 31.10.2025

Ioannis Chartomatsidis  
Responsible laboratory manager quality control

This document has been produced electronically and is valid without a signature.

Merck KGaA  
Corporation with General Partners  
Frankfurter Straße 250  
64293 Darmstadt, Germany

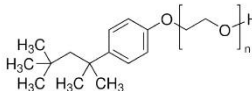
The life science business of Merck KGaA, Darmstadt,  
Germany operates as MilliporeSigma in the U.S. and  
Canada.

Page 1 of 1

SALSA Version 1022699/990000800148// Date: 02.12.2020

Outside USA: [eurtechserv@sial.com](mailto:eurtechserv@sial.com)

|                           |                                     |
|---------------------------|-------------------------------------|
| Product Name :            | Triton™ X-100 for molecular biology |
| Product Number :          | T8787-BULK                          |
| Batch Number :            | SLCM6763                            |
| CAS Number :              | 9036-19-5                           |
| Date Retested :           | 18 Jan 2024                         |
| Recommended Retest Date : | Jan 2026                            |
| Quality Release Date :    | 09 Mar 2022                         |



| Test                                                                        | Specification             | Result        |
|-----------------------------------------------------------------------------|---------------------------|---------------|
| Appearance (Clarity)                                                        | Clear to Slightly Hazy    | Clear         |
| Appearance (Color)                                                          | Colorless to Light Yellow | Colorless     |
| Appearance (Form)                                                           | Liquid                    | Liquid        |
| Solubility (Turbidity)<br>0.1 mL/mL of H2O                                  | Clear to Slightly Hazy    | Clear         |
| Solubility (Color)                                                          | Colorless to Faint Yellow | Colorless     |
| Infrared Spectrum                                                           | Conforms to Structure     | Conforms      |
| Water (by Karl Fischer)                                                     | ≤ 1.00 %                  | 0.04 %        |
| Sodium (Na)                                                                 | ≤ 0.1 %                   | 0.0 %         |
| Heavy Metals                                                                | ≤ 5.0 ppm                 | 5.0 ppm       |
| Iron (Fe)                                                                   | ≤ 5 ppm                   | < 5 ppm       |
| Potassium (K)                                                               | ≤ 0.05 %                  | < 0.01 %      |
| DNase Detection                                                             | None Detected             | None Detected |
| RNase Detection                                                             | None Detected             | None Detected |
| Registered Trademark<br>Triton is a registered trademark of Dow Chemical CO | Confirmed                 | Conforms      |

Page 1 of 2

The branding on the header and/or footer of this document may temporarily not visually match the product purchased as we transition our branding. However, all of the information in the document regarding the product remains unchanged and matches the product ordered.  
For further information please contact [mlsbranding@sial.com](mailto:mlsbranding@sial.com)



**Annexe 1.7 : Certificat d'analyse de la référence T8787 du fabricant Sigma Aldrich - page 2**

**Sigma-Aldrich.**

**Product** T8787-BULK  
**Batch** SLCM6763



Michael Grady, Manager

Quality Control  
Milwaukee, WI  
US

Sigma-Aldrich warrants, that at the time of the quality release or subsequent retest date this product conformed to the information contained in this publication. The current Specification sheet may be available at Sigma-Aldrich.com. For further inquiries, please contact Technical Service. Purchase must determine the suitability of the product for its particular use. See reverse side of website or packing slip for additional terms and conditions of sale

Version Number: 2 Doc: 1138493

Page 2 of 2

The branding on the header and/or footer of this document may temporarily not visually match the product purchased as we transition our branding. However, all of the information in the document regarding the product remains unchanged and matches the product ordered. For further information please contact [mlsbranding@sial.com](mailto:mlsbranding@sial.com)



**Annexe 1.8 : Certificat d'analyse de la référence P0873 du fabricant TCI**



**Certificate of Analysis**

06-09-2024(JST)

TOKYO CHEMICAL INDUSTRY CO., LTD.  
T-PLUS Nihonbashi-Kodemmacho  
16-12 Nihonbashi-kodemmacho, Chuo-ku, Tokyo 103-0001, Japan

|                                                                            |                        |                                        |
|----------------------------------------------------------------------------|------------------------|----------------------------------------|
| Chemical Name: Polyethylene Glycol Mono-4-octylphenyl Ether (n=approx. 10) |                        |                                        |
| Product Number: P0873<br>CAS RN: 9002-93-1                                 | Lot: MF6YN             |                                        |
| Tests                                                                      | Results                | Specifications                         |
| Appearance                                                                 | Colorless clear liquid | Colorless to Light yellow clear liquid |
| The average value of n                                                     | 9.5                    | 8.5 to 11.5                            |

TCI Lot numbers are 4-5 characters in length. Characters listed after the first 4-5 characters are control numbers for internal purpose only.

The contents of the specifications are subject to change without advance notice. The specification values displayed here are the most up to date values. There may be cases where the product labels display a different specification, however, the product quality still meets the latest specification.

**Customer Service:**

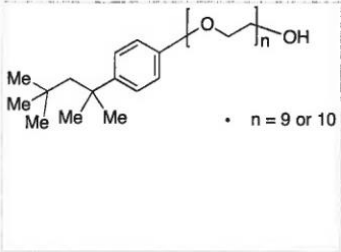
TCI EUROPE N.V.  
Tel: +32-3-735-0700  
Fax: +32-3-735-0701  
E-mail: Sales-EU@TCIchemicals.com

TCI Deutschland GmbH  
Tel: +49 6196 64053-00  
Fax: +49 6196 64053-01  
E-mail: Sales-DE@TCIchemicals.com

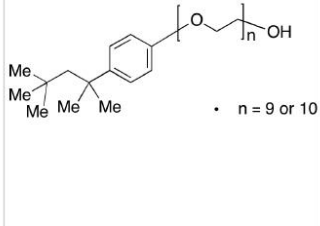
Tokyo Chemical Industry UK Ltd  
Tel: +44 1865 78 45 60  
E-mail: Sales-UK@TCIchemicals.com

Takuya Nishioka  
Quality Assurance Department Manager

**Annexe 1.9 : Certificat d'analyse de la référence T886800 du fabricant TRC – à jour**

|  <b>CERTIFICATE OF ANALYSIS</b>                                                                                                                                                                                                                                               |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>1. Identification</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| <b>Catalogue Number:</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       | T886800                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |
| <b>CAS Number:</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             | 9002-93-1                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |
| <b>Product:</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | Triton X-100                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |
| <b>Structure:</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
| <b>Lot Number:</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             | 1-MSW-77-1                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |
| <b>Shipping Condition:</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     | This Product Is Stable To Be Shipped At Room Temperature                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |
| <b>Synonym:</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | Polyethyleneglycols Mono[p-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)phenyl] Ether; p-(1,1,3,3-Tetramethylbutyl)phenol Monoether with Polyethylene Glycol; (p-t-Octylphenoxy)polyethoxyethanol; Anapoe X 100; Anapoe X 114; Antarox A 200; Coulter Dispersant IA; Criton X 100; Hydrol SW; Iconol OP; Intra-Cell; Koromex II; Lutensol OP 10; NOP 90; Nonidel P 40; OPE 30; Octoxynol 5; Ortho-Gynol; Photo-Flow 200; Poly(oxyethylene) p-tert-Octylphenyl Ether; Polyethylene Glycol Mono(4-octylphenyl) Ether; Polyethylene Glyco |
| <b>Molecular Formula:</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      | C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O•(OCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> ) <sub>n</sub>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
| <b>Molecular weight:</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       | N/A                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
| <b>Source of Product:</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      | N/A                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
| <b>Solubility:</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             | DMSO (Slightly), Methanol (Slightly)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |
| <b>Purity:</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 | 95%                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
| <b>Storage Condition:</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      | 4°C                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
| <b>2. Warning</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| <b>Warning 1:</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              | <b>Warning 2:</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
| <b>Warning 3:</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| <b>3. Analytical Information</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| <b>Tests:</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  | <b>Specifications:</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |
| Appearance                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     | Colourless Oil to Thick Oil                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
| NMR                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | Conforms to Structure                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |
| Elemental Analysis                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             | Conforms                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |
| MS                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             | Conforms to Structure                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |
| <b>Results:</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| Clear Colourless Thick Oil                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| Conforms                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| %C: 63.88, %H: 10.19                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| Conforms                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| <b>Additional Information:</b> N/A                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| Purity is based on the analytical results of the tests performed. NMR and Elemental Analysis (if available) may have an accuracy of ± 2%. Isotopic purity is based on mass distribution observed. The contents of the specifications are subject to change without advance notice, and the specification values displayed here are the most up to date values. |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| <b>4. Signatures</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| <b>Reviewed By</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             | <b>Reviewed By</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
| Neha Khanna                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | Toni Rantanen                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
|                                                                                                                                                                                                                                                                             |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
| <b>C of A Approved By</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      | <b>Test Date</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
| Chanell Chu                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | 3/14/2022                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |
|                                                                                                                                                                                                                                                                             | <b>Retest Date</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | 3/12/2026                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |



|  <b>CERTIFICATE OF ANALYSIS</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |                                                                                     |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>1. Identification</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |                                                                                     |
| <b>Catalogue Number:</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | T886800                                                                             |
| <b>CAS Number:</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  | 9002-93-1                                                                           |
| <b>Product:</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     | Triton X-100                                                                        |
| <b>Structure:</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |    |
| <b>Lot Number:</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  | 1-MSW-77-1                                                                          |
| <b>Purity:</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      | 95%                                                                                 |
| <b>Shipping Condition:</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          | This Product Is Stable To Be Shipped At Room Temperature                            |
| <b>Storage Condition:</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           | Refrigerator                                                                        |
| <b>Synonym:</b> Polyethyleneglycols Mono[p-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)phenyl] Ether; p-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)phenol Monoether with Polyethylene Glycol; (p-t-Octylphenoxy)polyethoxyethanol; Anapoe X 100; Anapoe X 114; Antarox A 200; Coulter Dispersant IA; Criton X 100; Hydrol SW; Iconol OP; Intra-Cell; Koromex II; Lutensol OP 10; NOP 90; Nonidel P 40; OPE 30; Octoxynol 5; Ortho-Gynol; Photo-Flow 200; Poly(oxyethylene) p-tert-Octylphenyl Ether; Polyethylene Glycol Mono(4-octylphenyl) Ether; Polyethylene Glyco |                                                                                     |
| <b>Molecular Formula:</b><br>C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O•(OCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> ) <sub>n</sub>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                     |
| <b>Molecular weight:</b><br>N/A                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                     |
| <b>Source of Product:</b><br>N/A                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |                                                                                     |
| <b>Solubility:</b><br>Chloroform, DMSO, Methanol (Sparingly)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |                                                                                     |
| <b>2. Warning</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |                                                                                     |
| <b>Warning 1:</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   | Not Determined                                                                      |
| <b>Warning 2:</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |                                                                                     |
| <b>Warning 3:</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |                                                                                     |
| <b>3. Analytical Information</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |                                                                                     |
| <b>Tests:</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       | <b>Specifications:</b>                                                              |
| Appearance                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          | Clear Colourless Oil                                                                |
| NMR                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 | Conforms to Structure                                                               |
| MS                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  | Conforms to Structure                                                               |
| HPLC Purity                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         | >95%                                                                                |
| <b>Results:</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                     |
| Clear Colourless Oil                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |                                                                                     |
| Conforms                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |                                                                                     |
| Conforms                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |                                                                                     |
| 96.89%                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |                                                                                     |
| <b>Additional Information:</b> NA                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |                                                                                     |
| Purity is based on the analytical results of the tests performed. NMR and Elemental Analysis (if available) may have an accuracy of ± 2%. Isotopic purity is based on mass distribution observed. The contents of the specifications are subject to change without advance notice, and the specification values displayed here are the most up to date values.                                                                                                                                                                      |                                                                                     |
| <b>4. Signatures</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |                                                                                     |
| <b>Reviewed By</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  | <b>Reviewed By</b>                                                                  |
| Eric Beaton                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         | Neha Khanna                                                                         |
|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |  |
| <b>C of A Approved By</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           | <b>Test Date</b>                                                                    |
| Clarissa Santos                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     | 2/5/2019                                                                            |
|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  | <b>Retest Date</b>                                                                  |
|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     | 2/3/2023                                                                            |



## Annexe 2 : Documents supplémentaires reçus avec le standard 6 (TCI)



### Expiry date and storage of TCI products

#### Expiry date

As a principle, TCI (Tokyo Chemical Industry) does not give an expiry date or guarantee time (or period) for reagents.

Any reagent can have problems as a result of storage conditions that are not optimal or due to even a small amount of impurities.

These minor factors can cause unexpected decomposition of the product over time.

Therefore, it is difficult for TCI to create an expiry date for reagents.

We recommend using the products promptly upon receipt and store the material as described in the SDS under section 7 "handling and storage".

#### Storage of TCI reagents

To avoid degradation of quality, store TCI reagents according to the recommendations mentioned on the label and the SDS document (section 7).

If there is no specific advice on the SDS sheet, we recommend keeping the products in a dark, cool and dry place at a temperature below 15 ° C.

Some of our products require a specific storage:

- For refrigerated products, we recommend to keep them in a dry and dark place, at a temperature between 0°C and 10°C.
- For frozen products, we recommend to keep them in a dry and dark place, at a temperature below 0°C.

There are 3 different groups :

- Frozen below 0°C
- Frozen below -20°C
- Frozen below -80°C

#### Transport Temperature

Some products are shipped at ambient temperature even though the recommended storage temperature is refrigerated or frozen. Please rest assured that as long as the transportation occurs over a brief period, it will not affect the product quality, and that degradation caused by exposure to ambient temperature has not been reported in these short time frames. Furthermore, we give full consideration to the transportation of products that are sensitive to short-term exposure, and specially ship these with refrigerants so as to prevent degradation.

You can find more information on our website:

<http://www.tcichemicals.com/en/be/users-guide/temperature.html>

**TCI Europe NV** Boereveldseweg 6 - Haven 1063 - B-2070 Zwijndrecht (Belgium)  
Tel. : +32 3 735 07 02 Fax : +32 3 735 07 01 VAT nr. BE 0467.386.679



October 24, 2023

#### General shelf life statement

TCI does not generally determine an expiry date for its regular reagent grade products. When unopened and stored according to the recommendations of the SDS, our products are typically stable for several years.

Although we do not guarantee a defined shelf life, we recommend performing a retest one year after purchase to confirm if our products still meet the requirements for their application.

Title                      Technical Information Specialist  
Name                     Elzana Edieva

Signature                *Elzana Edieva*



---

TCI Europe N.V. – Boereveldseweg 6 – Haven 1063 – B-2070 Zwijndrecht (Belgium)  
Tel: +32 (0)3 735 07 00 – Fax +32 (0)3 735 07 01  
BE 467.386.679 – HRA 336 968 – Fortis 220-0041231-42  
<http://www.tcichemicals.com>

### Annexe 3 : Répartition moyenne (%) des OPnEO pour chaque étalon

| OPnEO         | Étalon 1     | Étalon 2     | Étalon 3     | Étalon 4     | Étalon 5     | Étalon 6     | Moyenne      |
|---------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| <b>OP4EO</b>  | 0,63 ± 0,05  | 0,54 ± 0,02  | 0,61 ± 0,01  | 0,58 ± 0,05  | 0,56 ± 0,06  | 0,54 ± 0,04  | 0,58 ± 0,05  |
| <b>OP5EO</b>  | 3,70 ± 0,08  | 3,63 ± 0,14  | 3,64 ± 0,16  | 3,59 ± 0,15  | 3,42 ± 0,13  | 3,40 ± 0,23  | 3,56 ± 0,18  |
| <b>OP6EO</b>  | 9,55 ± 0,29  | 9,75 ± 0,57  | 9,44 ± 0,32  | 9,44 ± 0,32  | 9,12 ± 0,28  | 9,11 ± 0,55  | 9,40 ± 0,44  |
| <b>OP7EO</b>  | 15,02 ± 0,35 | 15,24 ± 0,76 | 14,90 ± 0,50 | 15,06 ± 0,46 | 14,81 ± 0,48 | 14,70 ± 0,71 | 14,96 ± 0,55 |
| <b>OP8EO</b>  | 15,20 ± 0,52 | 15,35 ± 0,72 | 15,13 ± 0,23 | 15,37 ± 0,30 | 15,21 ± 0,15 | 15,16 ± 0,50 | 15,24 ± 0,43 |
| <b>OP9EO</b>  | 16,15 ± 0,58 | 16,21 ± 0,75 | 16,21 ± 0,26 | 16,17 ± 0,28 | 16,18 ± 0,16 | 16,20 ± 0,70 | 16,19 ± 0,47 |
| <b>OP10EO</b> | 14,55 ± 0,51 | 14,57 ± 0,80 | 14,67 ± 0,30 | 14,59 ± 0,25 | 14,71 ± 0,17 | 14,82 ± 0,42 | 14,65 ± 0,43 |
| <b>OP11EO</b> | 10,57 ± 0,40 | 10,45 ± 0,67 | 10,66 ± 0,26 | 10,59 ± 0,23 | 10,88 ± 0,19 | 10,79 ± 0,51 | 10,66 ± 0,41 |
| <b>OP12EO</b> | 6,73 ± 0,26  | 6,63 ± 0,52  | 6,88 ± 0,35  | 6,78 ± 0,26  | 6,91 ± 0,34  | 6,99 ± 0,52  | 6,82 ± 0,38  |
| <b>OP13EO</b> | 4,12 ± 0,21  | 3,93 ± 0,33  | 4,08 ± 0,29  | 4,04 ± 0,22  | 4,18 ± 0,25  | 4,15 ± 0,40  | 4,08 ± 0,28  |
| <b>OP14EO</b> | 2,11 ± 0,15  | 2,08 ± 0,24  | 2,17 ± 0,19  | 2,14 ± 0,17  | 2,27 ± 0,18  | 2,22 ± 0,29  | 2,16 ± 0,20  |
| <b>OP15EO</b> | 1,14 ± 0,07  | 1,10 ± 0,13  | 1,11 ± 0,16  | 1,13 ± 0,09  | 1,19 ± 0,11  | 1,36 ± 0,45  | 1,17 ± 0,22  |
| <b>OP16EO</b> | 0,52 ± 0,02  | 0,50 ± 0,07  | 0,52 ± 0,07  | 0,53 ± 0,05  | 0,55 ± 0,05  | 0,56 ± 0,07  | 0,53 ± 0,06  |