



Title	<b>Determination of Methyl-, Chloromethyl- and Benzisothiazolinone in cosmetic products and fingerprint using UPLC-MS-MS</b>		
Code	CHE01-WV416	version 06	Start date 15-07-2016

**Divisie Consument & veiligheid**  
Chemisch en Microbiologisch  
Productveiligheid Lab

Paterswoldseweg 1  
9726 BA GRONINGEN  
Postbus 43006  
3540 AA UTRECHT  
www.nvwa.nl

## SCOPE

This procedure describes a method for the determination of methylisothiazolinone (MI), chloromethylisothiazolinone (CMI) and benzisothiazolinone (BIT) in (child) cosmetics and fingerprint. The method is validated for a cream, liquid soap and a fingerprint. The method is applicable for MI, CMI and BIT in the range of 0.8 – 160 mg·kg<sup>-1</sup>.

## ABSTRACT

Extraction of isothiazolinones is achieved by using water/methanol (10:90) solution. The final extract is analysed using an UPLC-triple quad-MS system with a Acquity UPLC HSS T3 (100\*2.1 mm, 1.7 µm) and a gradient of water and methanol. Identification is carried out by using the molecular ion and two or three diagnostic ions. Quantification is done by comparing the ratio of the major fragment ions of the isothiazolinones with the calibration curve. The limit of detection for MI, CMI and BIT are for a cream respectively 1.7, 1.6 and 1.8 mg·kg<sup>-1</sup>, for a liquid soap respectively 0.7, 0.4 and 1.8 mg·kg<sup>-1</sup> and for a fingerprint respectively 0.16, 0.42 and 0.91 mg·kg<sup>-1</sup>.

## SAMENVATTING

Een product wordt geëxtraheerd met een water/methanol oplossing (10:90). Het extract wordt gefiltreerd en geanalyseerd op aanwezigheid van MI, CMI en BIT door gebruik te maken van een UPLC triple quad MS systeem. Een Acquity UPLC HSS T3 (100\*2.1 mm, 1.7 µm) kolom wordt gebruikt en een gradiënt van water en methanol als mobiele fase. Identificatie vindt plaats op basis van het moleculaire ion en 2 of 3 fragment ionen. Kwantificering vindt plaats door middel van het vergelijken van de ratio van de belangrijkste fragment ionen met de kalibratie standaarden. De detectielimiet voor MI, CMI en BIT zijn voor een creme respectievelijk 1.7, 1.6 en 1.8 mg·kg<sup>-1</sup>, voor een vloeibare zeep respectievelijk 0.7, 0.4 en 1.8 mg·kg<sup>-1</sup> en voor een vingerverf respectievelijk 0.16, 0.42 en 0.91 mg·kg<sup>-1</sup>.