

DES type/ salt addition

DES type	Salt	No	Peaks area					
			TMP	SMX	OTC	TC	CTC	DC
DES 13	no	1a	410432	1545992	70303	422948	321970	354153
	no	1b	447615	1711299	71913	422539	342612	410876
	no	1c	465903	1727904	73438	438692	339738	358634
	Na2SO5	2a	432739	1543187	67471	401273	322851	354732
	Na2SO5	2b	453762	1709117	71485	438407	342399	355823
	Na2SO6	2c	456134	1785580	70762	405198	340522	380567
	(NH4)2SO4	3a	312872	1738552	67226	383040	316505	348049
	(NH4)2SO4	3b	328504	1844488	70695	402167	328268	377907
	(NH4)2SO4	3c	332527	1776329	71065	402601	321461	373428
DES 2	no	4a	436201	1126394	185266	441585	287768	447990
	no	4b	436530	1198066	189367	448166	287710	488257
	no	4c	433535	1229585	187746	445067	286142	482473
	Na2SO4	5a	417842	1207628	179786	421457	275414	468175
	Na2SO5	5b	428875	1296062	187799	441637	285626	485189
	Na2SO6	5c	425767	1285626	185151	429935	282093	480004
	(NH4)2SO4	6a	413050	1257040	167844	391188	245144	429522
	(NH4)2SO4	6b	428067	1307865	175056	405471	251471	437058
	(NH4)2SO4	6c	430292	1318484	176260	406043	256347	450619
DES 5	no	7a	453279	1390397	141139	404663	286042	480874
	no	7b	467721	1452545	143923	421286	299330	498623
	no	7c	470026	1460184	146198	430743	297680	514835
	Na2SO4	8a	463960	1452810	146458	418928	290401	481491
	Na2SO5	8b	477215	1504493	154505	429430	310151	503858
	Na2SO6	8c	473018	1536502	152474	433972	307903	506497
	(NH4)2SO4	9a	460032	1471072	140640	392768	268388	455184
	(NH4)2SO4	9b	476322	1538441	149149	411369	272580	475817
	(NH4)2SO4	9c	472824	1546867	151185	417725	274736	470603
DES 15	no	10a	424317	1968638	67318	368452	324193	381260
	no	10b	370541	2039121	67245	386837	338986	383338
	no	10c	359317	2094492	66596	384367	324687	374217
	Na2SO4	11a	408074	1974597	64082	369113	314300	365272
	Na2SO5	11b	345866	2009037	65317	385384	323397	379109
	Na2SO6	11c	427922	2043925	66595	386053	326212	382808
	(NH4)2SO4	12a	298904	2001427	64966	377632	307068	357497
	(NH4)2SO4	12b	314376	2109279	67463	378085	304455	377468
	(NH4)2SO4	12c	266129	2124071	64231	390157	327675	369014
DES 30	no	13a	342260	1720699	67693	364048	290890	333152
	no	13b	338610	1784870	69862	377651	300773	351454
	no	13c	289791	1771614	66747	381076	349714	380925
	Na2SO4	14a	424728	1777390	70106	381874	390001	401990
	Na2SO5	14b	428610	1859010	72903	395662	386970	420975
	Na2SO6	14c	432024	1869571	73747	396305	314690	424243
	(NH4)2SO4	15a	288506	1876853	71627	381009	315429	405426
	(NH4)2SO4	15b	301047	1980090	75286	400167	387727	428796
	(NH4)2SO4	15c	302031	1983258	74768	397051	384670	425297

Average

DES type	TMP	SMX	OTC	TC	CTC	DC
1	441317	1661732	71885	428060	334773	374554
2	447545	1679295	69906	414959	335257	363707
3	324634	1786456	69662	395936	322078	366461
4	435422	1184682	187460	444939	287207	472907
5	424161	1263105	184245	431010	281044	477789
6	423803	1294463	173053	400901	250987	439066
7	463675	1434375	143753	418897	294351	498111
8	471398	1497935	151146	427443	302818	497282
9	469726	1518793	146991	407287	271901	467201
10	384725	2034084	67053	379885	329289	379605
11	393954	2009186	65331	380183	321303	375730
12	293136	2078259	65553	381958	313066	367993
13	323554	1759061	68101	374258	313792	355177
14	428454	1835324	72252	391280	363887	415736
15	297195	1946734	73894	392742	362609	419840
16	685681	1783878	69539	447776	373880	394180

RSD

	TMP	SMX	OTC	TC	CTC	DC
1	28267	100577	1568	9210	11181	31535
2	12877	123918	2140	20401	10785	14611
3	10383	53689	2118	11170	5906	16102
4	1642	52881	2065	3292	922	21771
5	5689	48327	4083	10133	5186	8721
6	9379	32841	4551	8416	5617	10691
7	9077	38277	2534	13203	7243	16986
8	6774	42230	4185	7716	10812	13739
9	8576	41542	5594	12970	3228	10729
10	34744	63078	397	9978	8402	4780
11	42812	34664	1257	9593	6226	9244
12	24635	66948	1694	7104	12719	10025
13	29296	33877	1597	9007	31499	24103
14	3651	50449	1906	8152	42633	12016
15	7541	60539	1980	10280	40887	12605

Summary Salt

	TMP	SMX	OTC	TC	CTC	DC
no salt	435422	1184682	187460	444939	287207	472907
Na2SO4	424161	1263105	184245	431010	281044	477789
(NH4)2SO4	423803	1294463	173053	400901	250987	439066

Summary DES

	TMP	SMX	OTC	TC	CTC	DC
[OA]/[Th] (1:1) DES 13	435422	1184682	187460	444939	287207	472907
[1,2-PD]/[Th] (DES 2	441317	1661732	71885	428060	334773	374554
[1,3-PD]/[Th] (DES 5	384725	2034084	67053	379885	329289	379605
[OA]/ [1,3-PD] DES 15	463675	1434375	143753	418897	294351	498111
[1,3-PD]/[Th] (DES 30	323554	1759061	68101	374258	313792	355177