Analytical and Bioanalytical Chemistry

Electronic Supplementary Material

Gas chromatography–triple quadrupole tandem mass spectrometry: a powerful tool for the (ultra)trace analysis of multiclass environmental contaminants in fish and fish feed

Kamila Kalachova, Jana Pulkrabova, Tomas Cajka, Lucie Drabova, Michal Stupak, Jana Hajslova*

Institute of Chemical Technology, Prague, Faculty of Food and Biochemical Technology, Department of Food Analysis and Nutrition, Technicka 3, 166 28 Prague 6, Czech Republic

*Corresponding Author E-mail: jana.hajslova@vscht.cz

Tel. number: +420 220 443 185

Fax number: +420 220 443 186

Table S1 Optimised MS/MS transitions used for identification and confirmation of target BFRs and internal standards

Analyte (M_{rel})	**RT (min)**	**Precursor ion**		**Product ion**		**CE**	**RT Window (min)**	
BDE 28 (406.9)	10.5	405.8	$[M]^{+\bullet}$	245.9	$[M–Br_2]^+$	15	10.0	11.5
		407.9	$[M]^{+\bullet}$	247.9	$[M–Br_2]^+$	18		
BDE 37 (406.9)	10.9	405.8	$[M]^{+\bullet}$	245.9	$[M–Br_2]^+$	15	10.0	11.5
		407.9	$[M]^{+\bullet}$	247.9	$[M–Br_2]^+$	18		
PBT (486.6)	10.9	406.7	$[M–Br]^+$	246.7	$[M–Br_3]^+$	20	10.3	11.8
		485.5	$[M]^{+\bullet}$	324.8	$[M–Br_2]^+$	30		
PBEB (500.7)	11.1	499.7	$[M]^{+\bullet}$	485.1	$[M–CH_3]^+$	10	10.5	12.0
		501.5	$[M]^{+\bullet}$	487.0	$[M–CH_3]^+$	15		
BDE 49 (485.8)	12.0	485.8	$[M]^{+\bullet}$	325.8	$[M–Br_2]^+$	18	9.5	16.5
		487.8	$[M]^{+\bullet}$	327.8	$[M–Br_2]^+$	18		
BDE 47 (485.8)	12.3	485.8	$[M]^{+\bullet}$	325.8	$[M–Br_2]^+$	18	9.5	16.5
		487.8	$[M]^{+\bullet}$	327.8	$[M–Br_2]^+$	18		
HBB (551.5)	12.5	551.6	$[M]^{+\bullet}$	470.6	$[M–Br]^+$	25	11.9	13.4
		551.6	$[M]^{+\bullet}$	389.6	$[M–Br_2]^+$	30		
BDE 66 (485.8)	12.6	485.8	$[M]^{+\bullet}$	325.8	$[M–Br_2]^+$	18	9.5	16.5
		487.8	$[M]^{+\bullet}$	327.8	$[M–Br_2]^+$	18		
BDE 77 (485.8)	13.0	485.8	$[M]^{+\bullet}$	325.8	$[M–Br_2]^+$	18	9.5	16.5
		487.8	$[M]^{+\bullet}$	327.8	$[M–Br_2]^+$	18		
BDE 100 (564.7)	13.8	561.8	$[M]^{+\bullet}$	401.8	$[M–Br_2]^+$	18	12.5	16.5
		565.8	$[M]^{+\bullet}$	405.8	$[M–Br_2]^+$	18		
BDE 99 (564.7)	14.2	561.8	$[M]^{+\bullet}$	401.8	$[M–Br_2]^+$	18	12.5	16.5
		565.8	$[M]^{+\bullet}$	405.8	$[M–Br_2]^+$	18		
BDE 85 (564.7)	15.4	561.8	$[M]^{+\bullet}$	401.8	$[M–Br_2]^+$	18	12.5	16.5
		565.8	$[M]^{+\bullet}$	405.8	$[M–Br_2]^+$	18		
BDE 154 (643.6)	15.5	641.7	$[M]^{+\bullet}$	481.7	$[M–Br_2]^+$	18	14.3	17.3
		645.7	$[M]^{+\bullet}$	485.7	$[M–Br_2]^+$	18		
BDE 153 (643.6)	16.3	641.7	$[M]^{+\bullet}$	481.7	$[M–Br_2]^+$	18	14.3	17.3
		645.7	$[M]^{+\bullet}$	485.7	$[M–Br_2]^+$	18		
BDE 183 (722.5)	20.2	721.8	$[M]^{+\bullet}$	561.8	$[M–Br_2]^+$	20	15.5	20.5
		723.7	$[M]^{+\bullet}$	563.8	$[M–Br_2]^+$	20		
BTBPE (687.6)	21.0	356.7	$[M–C_6H_2Br_3O]^+$	277.4	$[M–C_6H_2Br_4O]^+$	15	17.8	19.3
		356.7	$[M–C_6H_2Br_3O]^+$	328.4	$[M–C_8H_7Br_3O]^+$	15		

Table S2 Optimised MS/MS transitions used for identification and confirmation of target PCBs and internal standards

Analyte (M_{rel})	RT (min)	Precursor ion		Product ion		CE	RT Window (min)	
CB 28 (257.5)	8.2	255.9	$[M]^{+\bullet}$	219.9	$[M–Cl]^+$	20	7.6	9.1
		257.9	$[M]^{+\bullet}$	150.9	$[M–Cl_3]^+$	35		
CB 52 (291.9)	8.4	291.9	$[M]^{+\bullet}$	221.9	$[M–Cl_2]^+$	22	8.0	11.0
		291.9	$[M]^{+\bullet}$	256.9	$[M–Cl]^+$	15		
CB 101 (324.6)	9.2	323.8	$[M]^{+\bullet}$	253.8	$[M–Cl_2]^+$	30	9.0	12.0
		325.8	$[M]^{+\bullet}$	290.8	$[M–Cl]^+$	14		
$^{13}C_{12}$-CB 101 (336.6)	9.2	338.8	$[M]^{+\bullet}$	265.8	$[M–Cl_2]^+$	30	9.0	12.0
		336.8	$[M]^{+\bullet}$	302.8	$[M–Cl]^+$	14		
CB 81 (291.9)	9.7	291.9	$[M]^{+\bullet}$	221.9	$[M–Cl_2]^+$	22	8.0	11.0
		291.9	$[M]^{+\bullet}$	256.9	$[M–Cl]^+$	15		
CB 77 (291.9)	9.9	291.9	$[M]^{+\bullet}$	221.9	$[M–Cl_2]^+$	22	8.0	11.0
		291.9	$[M]^{+\bullet}$	256.9	$[M–Cl]^+$	15		
$^{13}C_{12}$-CB 77 (303.9)	9.9	302.9	$[M]^{+\bullet}$	233.9	$[M–Cl_2]^+$	22	9.0	12.0
		302.9	$[M]^{+\bullet}$	268.9	$[M–Cl]^+$	15		
CB 123 (324.6)	10.0	323.8	$[M]^{+\bullet}$	253.8	$[M–Cl_2]^+$	30	9.0	12.0
		325.8	$[M]^{+\bullet}$	290.8	$[M–Cl]^+$	14		
CB 118 (324.6)	10.1	323.8	$[M]^{+\bullet}$	253.8	$[M–Cl_2]^+$	30	9.0	12.0
		325.8	$[M]^{+\bullet}$	290.8	$[M–Cl]^+$	14		
CB 153 (360.9)	10.2	357.8	$[M]^{+\bullet}$	287.9	$[M–Cl_2]^+$	25	9.0	13.0
		359.8	$[M]^{+\bullet}$	289.9	$[M–Cl_2]^+$	25		
CB 114 (324.6)	10.3	323.8	$[M]^{+\bullet}$	253.8	$[M–Cl_2]^+$	30	9.0	12.0
		325.8	$[M]^{+\bullet}$	290.8	$[M–Cl]^+$	14		
CB 105 (324.6)	10.6	323.8	$[M]^{+\bullet}$	253.8	$[M–Cl_2]^+$	30	9.0	12.0
		325.8	$[M]^{+\bullet}$	290.8	$[M–Cl]^+$	14		
CB 138 (360.9)	10.8	357.8	$[M]^{+\bullet}$	287.9	$[M–Cl_2]^+$	25	9.0	13.0
		359.8	$[M]^{+\bullet}$	289.9	$[M–Cl_2]^+$	25		
CB 126 (324.6)	10.9	323.8	$[M]^{+\bullet}$	253.8	$[M–Cl_2]^+$	30	9.0	12.0
		325.8	$[M]^{+\bullet}$	290.8	$[M–Cl]^+$	14		
CB 167 (360.9)	11.0	357.8	$[M]^{+\bullet}$	287.9	$[M–Cl_2]^+$	25	9.0	13.0
		359.8	$[M]^{+\bullet}$	289.9	$[M–Cl_2]^+$	25		
CB 156 (360.9)	11.5	357.8	$[M]^{+\bullet}$	287.9	$[M–Cl_2]^+$	25	9.0	13.0
		359.8	$[M]^{+\bullet}$	289.9	$[M–Cl_2]^+$	25		
CB 157 (360.9)	11.6	357.8	$[M]^{+\bullet}$	287.9	$[M–Cl_2]^+$	25	9.0	13.0
		359.8	$[M]^{+\bullet}$	289.9	$[M–Cl_2]^+$	25		
CB 180 (395.3)	11.6	391.8	$[M]^{+\bullet}$	321.8	$[M–Cl_2]^+$	25	11.0	13.0
		393.8	$[M]^{+\bullet}$	323.8	$[M–Cl_2]^+$	25		
CB 169 (360.9)	12.0	357.8	$[M]^{+\bullet}$	287.9	$[M–Cl_2]^+$	25	9.0	13.0
		359.8	$[M]^{+\bullet}$	289.9	$[M–Cl_2]^+$	25		
CB 189 (395.3)	12.5	391.8	$[M]^{+\bullet}$	321.8	$[M–Cl_2]^+$	25	11.0	13.0
		393.8	$[M]^{+\bullet}$	323.8	$[M–Cl_2]^+$	25		

Table S3 Optimised MS/MS transitions used for identification and confirmation of target OCPs

Analyte (M_{rel})	**RT (min)**	**Precursor ion**		**Product ion**		**CE**	**RT Window (min)**	
HCB	7.4	248.8	$[M-Cl]^{+}$	213.9	$[M-Cl_2]^{+}$	20	6.8	8.3
(284.8)		283.8	$[M]^{+\bullet}$	213.9	$[M-Cl_2]^{+}$	20		
HCH-α	7.5	216.9	$[M-HCl_2]^{+}$	180.9	$[M-HCl_3]^{+}$	15	7.0	8.5
(290.8)		218.9	$[M-HCl_2]^{+}$	182.9	$[M-HCl_3]^{+}$	15		
HCH-γ	7.9	216.9	$[M-HCl_2]^{+}$	180.9	$[M-HCl_3]^{+}$	15	7.0	8.5
(290.8)		218.9	$[M-HCl_2]^{+}$	182.9	$[M-HCl_3]^{+}$	15		
HCH-β	8.0	216.9	$[M-HCl_2]^{+}$	180.9	$[M-HCl_3]^{+}$	15	7.0	8.5
(290.8)		218.9	$[M-HCl_2]^{+}$	182.9	$[M-HCl_3]^{+}$	15		
Heptachlor	8.1	271.9	$[M-C_5H_5Cl]^{+}$	236.9	$[M-C_5H_5Cl_2]^{+}$	15	8.0	12.0
(373.3)		273.9	$[M-C_5H_5Cl]^{+}$	238.9	$[M-C_5H_5Cl_2]^{+}$	12		
Aldrin	8.5	262.9	$[M-C_5H_6Cl]^{+}$	192.9	$[M-C_5H_6Cl_3]^{+}$	32	7.5	10.5
(364.9)		262.9	$[M-C_5H_6Cl]^{+}$	227.9	$[M-C_5H_6Cl_2]^{+}$	32		
HEPO-*cis*	9.0	352.8	$[M-Cl]^{+}$	262.9	$[M-C3HCl_2O]^{+}$	15	8.5	10.0
(389.3)		354.8	$[M-Cl]^{+}$	264.9	$[M-C3HCl_2O]^{+}$	15		
HEPO-*trans*	9.1	288.9	$[M-CHCl_2O]^{+}$	218.9	$[M-CHCl_4O]^{+}$	15	8.5	10.0
(389.3)		352.8	$[M-Cl]^{+}$	252.9	$[M-CHCl_3O]^{+}$	15		
Chlordane-*trans*	9.3	276.9	$[M-C_2H_2Cl_3]^{+}$	203.9	$[M-C_2H_2Cl_5]^{+}$	16	8.8	10.3
(409.8)		372.8	$[M-Cl]^{+}$	265.9	$[M-Cl_4]^{+}$	15		
o,p′-DDE	9.3	246.0	$[M-Cl_2]^{+}$	176.0	$[M-Cl_4]^{+}$	25	8.8	10.3
(318.0)		317.9	$[M]^{+\bullet}$	245.9	$[M-Cl_2]^{+}$	20		
Chlordane-*cis*	9.4	372.8	$[M-Cl]^{+}$	265.9	$[M-Cl_4]^{+}$	18	8.8	10.3
(409.8)		409.8	$[M]^{+\bullet}$	374.8	$[M-Cl]^{+}$	5		
Endosulfan-α	9.5	240.9	$[M-CH_3Cl_2O_3S]^{+}$	205.9	$[M-CH_3Cl_3O_3S]^{+}$	20	8.0	12.0
(406.9)		264.9	$[M-C_2H_2ClO_3S]^{+}$	192.9	$[M-C_2H_4Cl_3O_3S]^{+}$	22		
p,p′-DDE	9.6	246.0	$[M-Cl_2]^{+}$	176.0	$[M-Cl_4]^{+}$	25	8.8	10.3
(318.0)		317.9	$[M]^{+\bullet}$	245.9	$[M-Cl_2]^{+}$	20		
Dieldrin	9.9	262.9	$[M-C_5H_6ClO]^{+}$	192.9	$[M-C_5H_6Cl_3O]^{+}$	26	7.5	10.5
(380.9)		262.9	$[M-C_5H_6ClO]^{+}$	227.9	$[M-C_5H_6Cl_2O]^{+}$	5		
o,p′-DDD	10.0	235.0	$[M-CHCl_2]^{+}$	165.0	$[M-CHCl_4]^{+}$	20	9.5	12.5
(320.0)		237.0	$[M-CHCl_2]^{+}$	165.0	$[M-CHCl_4]^{+}$	20		
Endrin	10.3	262.9	$[M-C_5H_3ClO]^{+}$	190.9	$[M-C_5H_3Cl_3O]^{+}$	25	7.5	10.5
(380.9)		280.9	$[M-CHCl_2O]^{+}$	244.9	$[M-CHCl_3O]^{+}$	12		
p,p′-DDD	10.3	235.0	$[M-CHCl_2]^{+}$	165.0	$[M-CHCl_4]^{+}$	20	9.5	12.5
(320.0)		237.0	$[M-CHCl_2]^{+}$	165.0	$[M-CHCl_4]^{+}$	20		
o,p′-DDT	10.4	234.9	$[M-CCl_3]^{+}$	165.0	$[M-CCl_5]^{+}$	15	9.0	14.0
(354.5)		236.9	$[M-CCl_3]^{+}$	165.0	$[M-CCl_5]^{+}$	20		
Endosulfan-β	10.7	240.9	$[M-CH_3Cl_2O_3S]^{+}$	205.9	$[M-CH_3Cl_3O_3S]^{+}$	20	8.0	12.0
(406.9)		271.9	$[M-C_4H_6O_3S]^{+}$	236.9	$[M-C_4H_6ClO_3S]^{+}$	18		
p,p′-DDT	10.8	234.9	$[M-CCl_3]^{+}$	165.0	$[M-CCl_5]^{+}$	20	9.0	14.0
(354.5)		236.9	$[M-CCl_3]^{+}$	165.0	$[M-CCl_5]^{+}$	20		
Endosulfan sulfate	11.3	271.9	$[M-C_4H_6O_4S]^{+}$	236.9	$[M-C_4H_6ClO_4S]^{+}$	15	8.0	12.0
(422.9)		273.9	$[M-C_4H_6O_4S]^{+}$	238.9	$[M-C_4H_6ClO_4S]^{+}$	15		

Table S4 Optimised MS/MS transitions used for identification and confirmation of target PAHs and internal standards

Analyte (M_{rel})	RT (min)	Precursor ion		Product ion		CE	RT Window (min)	
$^{13}C_6$-NA	5.0	134.0	$[M]^{+\bullet}$	83.0	$[M–C_4H_3]^+$	30	4.3	5.8
(134.2)		134.0	$[M]^{+\bullet}$	107.0	$[M–C_2H_3]^+$	20		
NA	5.0	128.0	$[M]^{+\bullet}$	77.0	$[M–C_4H_3]^+$	30	4.3	5.8
(128.2)		128.0	$[M]^{+\bullet}$	102.0	$[M–C_2H_2]^+$	20		
1MN	5.6	141.0	$[M–H]^+$	115.0	$[M–C_2H_3]^+$	15	5.0	6.5
(142.2)		142.0	$[M]^{+\bullet}$	115.0	$[M–C_2H_3]^+$	25		
2MN	5.7	141.0	$[M–H]^+$	115.0	$[M–C_2H_3]^+$	15	5.0	6.5
(142.2)		142.0	$[M]^{+\bullet}$	115.0	$[M–C_2H_3]^+$	25		
$^{13}C_6$-ACL	6.5	158.0	$[M]^{+\bullet}$	130.0	$[M–C_2H_4]^+$	30	5.8	7.3
(158.2)		158.0	$[M]^{+\bullet}$	156.0	$[M–H_2]^+$	20		
ACL	6.5	152.0	$[M]^{+\bullet}$	102.0	$[M–C_4H_2]^+$	30	5.8	7.3
(152.2)		152.0	$[M]^{+\bullet}$	126.0	$[M–C_2H_2]^+$	20		
$^{13}C_6$-AC	6.6	159.0	$[M–H]^+$	158.0	$[M–H_2]^+$	20	5.8	7.3
(160.2)		160.0	$[M]^{+\bullet}$	159.0	$[M–H]^+$	20		
AC	6.6	153.0	$[M–H]^+$	126.0	$[M–C_2H_4]^+$	40	5.8	7.3
(154.2)		153.0	$[M–H]^+$	151.0	$[M–H_3]^+$	40		
$^{13}C_6$-FL	7.1	171.0	$[M–H]^+$	145.0	$[M–C_2H_3]^+$	30	6.4	7.9
(172.2)		171.0	$[M–H]^+$	169.0	$[M–H_3]^+$	30		
FL	7.1	165.0	$[M–H]^+$	139.0	$[M–C_2H_3]^+$	30	6.4	7.9
(166.2)		165.0	$[M–H]^+$	163.0	$[M–H_3]^+$	30		
$^{13}C_6$-PHE	8.1	184.0	$[M]^{+\bullet}$	156.0	$[M–C_2H_4]^+$	30	7.5	9.0
(184.2)		184.0	$[M]^{+\bullet}$	182.0	$[M–H_2]^+$	30		
PHE	8.1	178.0	$[M]^{+\bullet}$	152.0	$[M–C_2H_2]^+$	20	7.5	9.0
(178.2)		178.0	$[M]^{+\bullet}$	176.0	$[M–H_2]^+$	20		
$^{13}C_6$-AN	8.1	184.0	$[M]^{+\bullet}$	156.0	$[M–C_2H_4]^+$	30	7.5	9.0
(184.2)		184.0	$[M]^{+\bullet}$	182.0	$[M–H_2]^+$	30		
AN	8.1	178.0	$[M]^{+\bullet}$	152.0	$[M–C_2H_2]^+$	20	7.5	9.0
(178.2)		178.0	$[M]^{+\bullet}$	176.0	$[M–H_2]^+$	20		
1MPH	8.6	192.0	$[M]^{+\bullet}$	165.0	$[M–C_2H_3]^+$	30	8.1	9.6
(192.3)		192.0	$[M]^{+\bullet}$	189.0	$[M–H_3]^+$	30		
2MA	8.8	192.0	$[M]^{+\bullet}$	165.0	$[M–C_2H_3]^+$	30	8.1	9.6
(192.3)		192.0	$[M]^{+\bullet}$	189.0	$[M–H_3]^+$	30		
$^{13}C_6$-FA	9.7	208.0	$[M]^{+\bullet}$	206.0	$[M–H_2]^+$	30	9.3	10.8
(208.3)		208.0	$[M]^{+\bullet}$	180.0	$[M–C_2H_4]^+$	30		
FA	9.7	202.0	$[M]^{+\bullet}$	176.0	$[M–C_2H_2]^+$	30	9.3	10.8
(202.3)		202.0	$[M]^{+\bullet}$	200.0	$[M–H_2]^+$	30		
$^{13}C_3$-PY	10.1	205.0	$[M]^{+\bullet}$	203.0	$[M–H_2]^+$	30	9.3	10.8
(205.3)		205.0	$[M]^{+\bullet}$	204.0	$[M–H]^+$	30		
PY	10.1	202.0	$[M]^{+\bullet}$	176.0	$[M–C_2H_2]^+$	30	9.3	10.8
(202.3)		202.0	$[M]^{+\bullet}$	200.0	$[M–H_2]^+$	30		
BcFL	10.7	216.0	$[M]^{+\bullet}$	189.0	$[M–C_2H_3]^+$	30	10.3	11.8
(216.3)		216.0	$[M]^{+\bullet}$	215.0	$[M–H]^+$	20		
1MP	11.0	216.0	$[M]^{+\bullet}$	189.0	$[M–C_2H_3]^+$	30	10.3	11.8
(216.3)		216.0	$[M]^{+\bullet}$	215.0	$[M–H]^+$	20		
$^{13}C_6$-BaA	12.3	234.0	$[M]^{+\bullet}$	208.0	$[M–C_2H_2]^+$	30	11.8	13.3
(234.3)		234.0	$[M]^{+\bullet}$	232.0	$[M–H_2]^+$	30		
BaA	12.3	228.0	$[M]^{+\bullet}$	202.0	$[M–C_2H_2]^+$	30	11.8	13.3
(228.3)		228.0	$[M]^{+\bullet}$	226.0	$[M–H_2]^+$	30		
$^{13}C_6$-CHR	12.5	234.0	$[M]^{+\bullet}$	208.0	$[M–C_2H_2]^+$	30	11.8	13.3
(234.3)		234.0	$[M]^{+\bullet}$	232.0	$[M–H_2]^+$	30		
CPP	12.5	226.0	$[M]^{+\bullet}$	200.0	$[M–C_2H_2]^+$	30	12.3	13.8
(226.3)		226.0	$[M]^{+\bullet}$	224.0	$[M–H_2]^+$	30		
CHR	12.5	228.0	$[M]^{+\bullet}$	202.0	$[M–C_2H_2]^+$	30	11.8	13.3
(228.3)		228.0	$[M]^{+\bullet}$	226.0	$[M–H_2]^+$	30		
1MC	13.1	242.0	$[M]^{+\bullet}$	226.0	$[M–CH_2]^+$	30	12.8	14.3
(242.3)		242.0	$[M]^{+\bullet}$	240.0	$[M–H_2]^+$	30		

5MC	13.3	242.0	$[M]^{+\bullet}$	226.0	$[M-CH_2]^+$	30	12.8	14.3
(242.3)		242.0	$[M]^{+\bullet}$	240.0	$[M-H_2]^+$	30		
3MC	13.4	242.0	$[M]^{+\bullet}$	226.0	$[M-CH_2]^+$	30	12.8	14.3
(242.3)		242.0	$[M]^{+\bullet}$	240.0	$[M-H_2]^+$	30		
$^{13}C_6$-BbFA	14.6	258.0	$[M]^{+\bullet}$	230.0	$[M-C_2H_4]^+$	30	14.2	15.7
(258.3)		258.0	$[M]^{+\bullet}$	256.0	$[M-H_2]^+$	30		
BbFA	14.6	252.0	$[M]^{+\bullet}$	226.0	$[M-C_2H_2]^+$	30	14.2	15.7
(252.3)		252.0	$[M]^{+\bullet}$	250.0	$[M-H_2]^+$	30		
$^{13}C_6$-BkFA	14.7	258.0	$[M]^{+\bullet}$	230.0	$[M-C_2H_4]^+$	30	14.2	15.7
(258.3)		258.0	$[M]^{+\bullet}$	256.0	$[M-H_2]^+$	30		
BkFA	14.7	252.0	$[M]^{+\bullet}$	226.0	$[M-C_2H_2]^+$	30	14.2	15.7
(252.3)		252.0	$[M]^{+\bullet}$	250.0	$[M-H_2]^+$	30		
BjFA	14.8	252.0	$[M]^{+\bullet}$	226.0	$[M-C_2H_2]^+$	30	14.2	15.7
(252.3)		252.0	$[M]^{+\bullet}$	250.0	$[M-H_2]^+$	30		
$^{13}C_4$-BaP	15.7	256.0	$[M]^{+\bullet}$	230.0	$[M-C_2H_2]^+$	30	15.0	16.5
(256.3)		256.0	$[M]^{+\bullet}$	256.0	$[M]^{+\bullet}$	30		
BaP	15.7	252.0	$[M]^{+\bullet}$	226.0	$[M-C_2H_2]^+$	30	15.0	16.5
(252.3)		252.0	$[M]^{+\bullet}$	250.0	$[M-H_2]^+$	30		
$^{13}C_6$-IP	19.3	282.0	$[M]^{+\bullet}$	254.0	$[M-C_2H_4]^+$	30	17.1	18.6
(282.3)		282.0	$[M]^{+\bullet}$	280.0	$[M-H_2]^+$	30		
IP	19.3	276.0	$[M]^{+\bullet}$	248.0	$[M-C_2H_4]^+$	40	16.8	18.8
(276.3)		276.0	$[M]^{+\bullet}$	274.0	$[M-H_2]^+$	40		
$^{13}C_6$-DBahA	19.3	284.0	$[M]^{+\bullet}$	256.0	$[M-C_2H_4]^+$	30	17.1	18.6
(284.3)		284.0	$[M]^{+\bullet}$	282.0	$[M-H_2]^+$	30		
DBahA	19.3	278.0	$[M]^{+\bullet}$	252.0	$[M-C_2H_2]^+$	30	17.1	18.6
(278.3)		278.0	$[M]^{+\bullet}$	276.0	$[M-H_2]^+$	30		
$^{13}C_{12}$-BghiP	20.8	288.0	$[M]^{+\bullet}$	260.0	$[M-C_2H_4]^+$	30	17.9	19.4
(288.3)		288.0	$[M]^{+\bullet}$	286.0	$[M-H_2]^+$	30		
BghiP	20.8	276.0	$[M]^{+\bullet}$	248.0	$[M-C_2H_4]^+$	40	17.6	19.6
(276.3)		276.0	$[M]^{+\bullet}$	274.0	$[M-H_2]^+$	40		
DBalP	27.9	302.0	$[M]^{+\bullet}$	276.0	$[M-C_2H_2]^+$	40	20.5	23.5
(302.4)		302.0	$[M]^{+\bullet}$	300.0	$[M-H_2]^+$	30		
$^{13}C_6$-DBaeP	30.7	308.0	$[M]^{+\bullet}$	282.0	$[M-C_2H_2]^+$	40	20.5	23.5
(308.4)		308.0	$[M]^{+\bullet}$	306.0	$[M-H_2]^+$	30		
DBaeP	30.7	302.0	$[M]^{+\bullet}$	276.0	$[M-C_2H_2]^+$	40	20.5	23.5
(302.4)		302.0	$[M]^{+\bullet}$	300.0	$[M-H_2]^+$	30		
$^{13}C_{12}$-DBaiP	32.5	314.0	$[M]^{+\bullet}$	288.0	$[M-C_2H_2]^+$	40	20.5	23.5
(314.4)		314.0	$[M]^{+\bullet}$	312.0	$[M-H_2]^+$	30		
DBaiP	32.5	302.0	$[M]^{+\bullet}$	276.0	$[M-C_2H_2]^+$	40	20.5	23.5
(302.4)		302.0	$[M]^{+\bullet}$	300.0	$[M-H_2]^+$	30		
DBahP	33.5	302.0	$[M]^{+\bullet}$	276.0	$[M-C_2H_2]^+$	40	20.5	23.5
(302.4)		302.0	$[M]^{+\bullet}$	300.0	$[M-H_2]^+$	30		

Table S5 The overview of validation data including mean recovery (REC, %), repeatability (RSD, %) and MQL (μg kg^{-1}) of all target analytes in fish tissue. REC and RSD were calculated from the results of repeated analyses (n=6) of fish tissue (fat 1%, *w/w*) spiked at three concentration levels 0.1, 1 and 5 μg kg^{-1}

	Analyte	0.1 μg kg^{-1}		1 μg kg^{-1}		5 μg kg^{-1}		MQL (μg kg^{-1})
		REC (%)	RSD (%)	REC (%)	RSD (%)	REC (%)	RSD (%)	
Major PCBs	CB 28	90	6	107	9	101	5	0.005
	CB 52	93	9	114	10	114	10	0.005
	CB 101	94	7	117	11	116	5	0.005
	CB 138	107	10	105	7	119	4	0.005
	CB 153	104	9	117	6	105	5	0.005
	CB 180	99	8	110	6	118	4	0.01
Dioxin-like PCBs	CB 77	110	13	105	12	114	10	0.005
	CB 81	111	11	118	10	90	9	0.005
	CB 126	108	8	103	8	113	3	0.005
	CB 169	115	9	102	5	118	4	0.005
	CB 105	101	5	116	13	108	6	0.005
	CB 114	94	14	117	8	118	5	0.005
	CB 118	105	6	102	11	111	9	0.01
	CB 123	98	6	118	13	107	2	0.01
	CB 156	108	10	117	4	113	5	0.005
	CB 157	111	11	105	6	117	4	0.005
	CB 167	107	8	119	5	114	3	0.005
	CB 189	104	9	119	5	111	3	0.005
OCPs	Aldrin	98	12	114	16	102	6	0.1
	Chlordan-*trans*	N/A	N/A	109	12	109	6	0.5
	Chlordan-*cis*	N/A	N/A	99	9	107	7	0.5
	HCB	79	9	82	13	86	3	0.1
	HCH-alfa	103	8	120	11	101	14	0.1
	HCH-beta	107	14	73	20	79	9	0.1
	HCH-gama	99	10	91	16	101	6	0.1
	HEPO-*cis*	N/A	N/A	106	11	90	12	0.5
	HEPO-*trans*	90	9	119	3	98	3	0.1
	Heptachlor	82	9	113	12	79	8	0.1
	O,p‘-DDD	104	3	119	10	116	6	0.1
	P,p‘-DDD	114	13	87	8	82	7	0.1
	O,p‘-DDE	109	15	82	10	111	7	0.1
	P,p‘-DDE	106	6	96	15	118	10	0.1
	O,p‘-DDT	95	8	92	8	103	6	0.1
	P,p‘-DDT	93	3	103	7	109	11	0.1
BFRs	BDE28	98	4	114	6	100	10	0.025
	BDE 47	112	10	75	7	73	5	0.005
	BDE 49	103	3	107	14	94	6	0.01
	BDE 66	92	9	102	14	92	6	0.05
	BDE 85	73	7	113	19	101	7	0.05
	BDE 99	97	6	106	8	100	5	0.05
	BDE 100	102	9	102	8	98	5	0.05
	BDE 153	98	16	107	10	101	7	0.05
	BDE 154	92	8	99	10	93	6	0.05
	BDE 183	N/A	N/A	N/A	N/A	104	10	1
	HBB	N/A	N/A	85	9	100	3	0.5
	PBEB	N/A	N/A	95	12	101	8	0.5
	PBT	N/A	N/A	82	4	95	6	0.5
	BTBPE	N/A	N/A	N/A	N/A	97	7	1

PAHs	AN	113	13	119	12	102	8	0.01
	BaA	83	4	100	9	104	6	0.025
	BaP	95	7	113	12	118	12	0.025
	BbFA	90	8	111	10	117	9	0.025
	BcF	76	13	104	7	106	6	0.025
	BghiP	79	16	113	12	113	3	0.01
	BjFA	85	8	110	12	111	9	0.025
	BkFA	84	5	106	11	107	6	0.025
	CHR	77	9	115	12	118	5	0.025
	CPP	90	12	105	5	100	2	0.025
	DBaeP	111	13	108	6	103	4	0.025
	DBahA	81	7	103	10	100	6	0.005
	DBahP	115	18	103	11	108	8	0.05
	DBaiP	N/A	N/A	98	5	99	5	0.25
	DBalP	112	19	104	5	104	5	0.025
	FL	73	15	95	16	92	10	0.01
	FA	78	16	97	12	98	17	0.05
	IP	82	4	102	11	104	6	0.01
	PY	81	11	102	12	101	14	0.05
	1MC	90	7	117	12	117	5	0.01
	1MPH	74	12	92	12	90	12	0.005
	1MPr	78	17	97	18	109	15	0.01
	2MA	72	5	119	17	112	12	0.01
	3MC	92	7	119	13	103	3	0.01
	5MC	84	8	100	7	93	4	0.005

Table S6 The overview of validation data including mean recovery (REC, %), repeatability (RSD, %) and MQL (μg kg^{-1}) of all target analytes in fish feed. REC and RSD were calculated from the results of repeated analyses (*n*=6) of fish feed (fat 8%, *w/w*) spiked at three concentration levels 1, 5 and 10 μg kg^{-1}

	Analyte	1 μg kg^{-1}		5 μg kg^{-1}		10 μg kg^{-1}		MQL (μg kg^{-1})
		REC (%)	RSD (%)	REC (%)	RSD (%)	REC (%)	RSD (%)	
Major PCBs	CB 28	107	8	107	6	82	9	0.05
	CB 52	110	7	111	4	89	9	0.05
	CB 101	115	7	115	4	74	5	0.05
	CB 138	118	7	112	4	81	9	0.05
	CB 153	103	8	109	5	92	9	0.05
	CB 180	117	6	116	4	74	11	0.1
Dioxin-like PCBs	CB 77	114	7	118	4	92	4	0.05
	CB 81	113	5	95	6	83	4	0.05
	CB 126	109	9	103	5	84	10	0.05
	CB 169	102	7	95	4	76	9	0.05
	CB 105	119	8	113	5	104	2	0.05
	CB 114	116	7	119	3	74	1	0.05
	CB 118	107	9	110	3	98	5	0.1
	CB 123	115	9	118	5	78	12	0.1
	CB 156	107	9	111	4	77	11	0.05
	CB 157	106	9	110	4	76	19	0.05
	CB 167	106	7	108	2	76	13	0.05
	CB 189	113	11	112	6	79	9	0.05
OCPs	Aldrin	79	19	98	5	115	6	1
	Chlordan-*trans*	N/A	N/A	102	6	109	11	5
	Chlordan-*cis*	N/A	N/A	107	15	89	6	5
	HCB	112	9	120	7	90	9	1
	HCH-alfa	102	4	109	9	99	3	1
	HCH-beta	105	10	96	3	79	5	1
	HCH-gama	94	6	93	9	83	7	1
	HEPO-*cis*	N/A	N/A	89	15	105	13	5
	HEPO-*trans*	90	9	90	9	89	10	1
	Heptachlor	94	10	78	3	114	4	1
	O,p'-DDD	114	12	84	9	98	6	1
	P,p'-DDD	105	9	104	3	92	8	1
	O,p'-DDE	102	7	116	10	78	12	1
	P,p'-DDE	115	10	109	5	119	4	1
	O,p'-DDT	91	11	83	13	104	13	1
	P,p'-DDT	89	15	72	10	93	10	1
BFRs	BDE28	102	7	98	17	84	14	0.25
	BDE 47	85	16	82	9	90	5	0.05
	BDE 49	109	4	89	4	76	5	0.1
	BDE 66	103	7	74	6	89	8	0.5
	BDE 85	98	11	111	11	74	3	0.5
	BDE 99	116	16	108	19	86	7	0.5
	BDE 100	115	9	102	16	74	12	0.5
	BDE 153	109	14	115	16	81	17	0.5
	BDE 154	87	19	98	13	90	13	0.5
	BDE 183	N/A	N/A	N/A	N/A	105	6	10
	HBB	N/A	N/A	90	9	93	9	5
	PBEB	N/A	N/A	78	5	90	10	5
	PBT	N/A	N/A	83	8	78	3	5
	BTBPE	N/A	N/A	N/A	N/A	91	6	10

PAHs	AN	90	13	87	6	90	12	0.1
	BaA	94	7	97	6	75	7	0.25
	BaP	100	8	106	6	106	10	0.25
	BbFA	89	10	93	8	93	4	0.25
	BcF	92	10	89	6	84	7	0.25
	BghiP	76	7	75	6	78	10	0.1
	BjFA	82	8	82	7	75	9	0.25
	BkFA	88	8	91	7	82	7	0.25
	CHR	93	11	93	9	73	1	0.25
	CPP	107	10	110	7	75	15	0.25
	DBaeP	76	20	96	16	109	18	0.25
	DBahA	84	9	87	5	73	17	0.05
	DBahP	73	17	106	14	86	8	0.5
	DBaiP	N/A	N/A	89	7	78	9	2.5
	DBalP	85	9	90	8	114	12	0.25
	FL	76	7	95	3	76	5	0.1
	FA	73	11	103	9	73	7	0.5
	IP	84	8	85	8	73	10	0.1
	PY	89	7	77	10	70	13	0.5
	1MC	76	10	76	17	98	16	0.1
	1MPH	88	12	95	6	81	8	0.05
	1MPr	81	9	94	19	85	9	0.1
	2MA	94	7	90	14	92	13	0.1
	3MC	103	3	103	6	102	17	0.1
	5MC	99	14	96	10	74	9	0.05

Table S7 Verification of trueness of generated data: Analysis of PCBs, PBDEs and OCPs in standard reference material – Lake Michigan fish tissue (SRM 1947, NIST, USA)

	Analyte	Determined value ($\mu g\ kg^{-1}$) [1]	Certified/reference value ($\mu g\ kg^{-1}$)	Agreement Yes/No
Major PCBs	CB 28	16.3 ± 2.5	14.1 ± 1.0	Yes
	CB 52	37.8 ± 8.0	36.4 ± 4.3	Yes
	CB 101	98.7 ± 38.9	90.8 ± 0.3	Yes
	CB 138	172 ± 68	162.0 ± 6.9	Yes
	CB 153	206 ± 62	201 ± 3	Yes
	CB 180	81.5 ± 39.5	80.8 ± 5.0	Yes
Dioxin-like PCBs	CB 105	50.4 ± 13.7	50.3 ± 3.7	Yes
	CB 118	118 ± 29	112 ± 6	Yes
	CB 156	14.8 ± 2.7	13.3 ± 0.9	Yes
	CB 157	3.5 ± 0.6	4.08 ± 0.77	Yes
OCPs	Chlordan-*trans*	15.6 ± 4.3	12.8 ± 1.2	Yes
	Chlordan-*cis*	56.9 ± 6.9	49.0 ± 5.5	Yes
	HCB	9.4 ± 1.7	7.48 ± 0.66	Yes
	HCH-alfa	0.96 ± 0.2	1.06 ± 0.12	Yes
	HCH-gama	0.56 ± 0.2	0.355 ± 0.095	Yes
	O,p'-DDD	2.9 ± 1.3	3.31 ± 0.16	Yes
	P,p'-DDD	50.69 ± 1.3	45.9 ± 3.6	Yes
	O,p'-DDE	4.1 ± 0.7	3.39 ± 0.28	Yes
	P,p'-DDE	789 ± 96	720 ± 43	Yes
	O,p'-DDT	17.4 ± 8.4	15.7 ± 0.89	Yes
	P,p'-DDT	65.3 ± 27.7	59.5 ± 6.7	Yes
BFRs	BDE28	1.94 ± 1.06	2.26 ± 0.46 [2]	Yes
	BDE 47	79.6 ± 19.3	73.3 ± 2.9	Yes
	BDE 49	3.5± 1.6	4.01 ± 0.10	Yes
	BDE 66	1.82 ± 0.5	1.85 ± 0.13	Yes
	BDE 99	19.6 ± 9.5	19.2 ± 0.8	Yes
	BDE 100	14.3 ± 1.3	17.1 ± 0.6	No
	BDE 153	3.9 ± 1.54	3.83 ± 0.04	Yes
	BDE 154	6.5 ± 1.8	6.88 ± 0.52	Yes

Yes/No – result is/not in agreement with the certified value

n.d. – not detected

1 The uncertainty was estimated by the "top-down" approach combining standard uncertainties calculated for both precision and trueness. The estimation of the relative standard deviation for reproducibility conditions was based on the empiric equation between repeatability (RSD) and reproducibility (RSD_R) ($RSD = 0.66 * RSD_R$).

[2] *Certified value is a sum of BDE 28 and 33*

Table S8 Verification of trueness of generated data: Analysis of PCBs, OCPs and PAHs in standard reference material – Mussel Tissue (SRM 1974b, NIST, USA)

	Analyte	Determined value (µg/kg) [1]	Certified/reference value (µg/kg)	Agreement Yes/No
Major PCBs	CB 28	4.2 ± 0.8	3.43 ± 0.25	Yes
	CB 52	7.4 ± 1.6	6.26 ± 0.37	Yes
	CB 101	13.6 ± 5.4	10.7 ± 1.1	Yes
	CB 138	9.0 ± 3.3	9.2 ± 1.4	Yes
	CB 153	15.2 ± 4.6	12.3 ± 0.8	Yes
	CB 180	1.54 ± 0.51	1.17 ± 0.10	Yes
Dioxin-like PCBs	CB 105	3.1 ± 0.8	4.00 ± 0.18	Yes
	CB 118	10.7 ± 2.6	10.3 ± 0.4	Yes
	CB 156	0.89 ± 0.51	0.718 ± 0.080	Yes
	CB 157	0.25 ± 0.12	0.236 ± 0.024	Yes
OCPs	Chlordan-*trans*	1.21 ± 0.29	1.14 ± 0.17	Yes
	Chlordan-*cis*	1.41 ± 0.51	1.36 ± 0.10	Yes
	O,p'-DDD	0.85 ± 0.11	1.09 ± 0.16	Yes
	P,p'-DDD	3.97 ± 1.32	3.34 ± 0.22	Yes
	O,p'-DDE	0.41 ± 0.06	0.336± 0.044	Yes
	P,p'-DDE	6.5 ± 3.35	4.15 ± 0.38	Yes
PAHs	AN	0.49 ± 0.21	0.527 ± 0.071	Yes
	BaA	6.02 ± 1.19	4.74 ± 0.53	Yes
	BaP	3.12 ± 0.57	2.80 ± 0.38	Yes
	BbFA	7.12 ± 1.29	6.46 ± 0.59	Yes
	BghiP	4.12 ± 1.00	3.12 ± 0.33	Yes
	BjFA	3.65 ± 1.03	2.99 ± 0.29	Yes
	BkFA	4.02 ± 0.81	3.16 ± 0.18	Yes
	CHR	6.98 ± 1.90	6.3 ± 1.0	Yes
	CPP	0.32 ± 0.14	0.227 ± 0.004	Yes
	DBahA	0.31 ± 0.06	0.327 ± 0.031	Yes
	FL	0.38 ± 0.21	0.494 ± 0.036	Yes
	FA	14.5 ± 7.91	17.1 ± 0.7	Yes
	IP	2.01 ± 0.43	2.14 ± 0.11	Yes
	PY	19.6 ± 8.3	18.04 ± 0.6	Yes
	1MPH	1.23 ± 0.67	0.98 ± 0.13	Yes
	2MA	0.36 ± 0.13	0.232 ± 0.004	Yes

Yes/No – result is/not in agreement with the certified value

n.d. – not detected

1 The uncertainty was estimated by the "top-down" approach combining standard uncertainties calculated for both precision and trueness. The estimation of the relative standard deviation for reproducibility conditions was based on the empiric equation between repeatability (RSD) and reproducibility (RSD_R) ($RSD = 0.66 * RSD_R$).