

Waterschap Limburg
t.a.v. het Dagelijks Bestuur
Postbus 2207
6040 CC Roermond

Datum	17.11.2021	Behandeld door	5.1.2e
Kenmerk	2021-WTW-IAZI0122	E-mailadres	5.1.2e @sitech.nl
Onderwerp	Aanvulling voortgangsrapportage melding voorschrift 29; onbekende stoffen	Telefoonnummer	+31 (0)6 5.1.2e

Geachte heer/mevrouw,

Met uw schrijven, kenmerk 2020-D125315 van 18 december 2020., hebben wij de vergunning in het kader van de Waterwet ontvangen voor het verrichten van handelingen in een watersysteem. Het besluit is gedateerd 15 december 2020 onder nummer 2019-Z4532.

Volgens voorschrift 29, lid 3 a en lid 3b, van de Watervergunning hebben wij totaal 61 onbekende componenten gemeld waarvan meer dan 4 maal een relatieve concentratie > 2,2 µg/l is vastgesteld waarbij ook het Plan van aanpak was toegevoegd.

Bijgevoegd de voortgangsrapportage volgens voorschrift 29 lid 6 a.
De voortgangsrapportage is een aanvulling op de rapportage 2021-WTW-IAZI0107, dd. 7-10-2021.

Hopende u voldoende te hebben geïnformeerd,

In afwachting van uw reactie.

Sitech Services,

5.1.2e

5.1.2e

Voortgangsrapportage identificatie 61 onbekende pieken in screeningen.

1. Inleiding:

In de periode tussen 2 februari en 16 november 2021 zijn totaal 61 onbekende componenten gemeld welke in de verschillende screeningsmethoden 4 keer of meer met een relatieve concentratie > 2,2 µg/l zijn gemeten. Op het moment dat de exacte gegevens van LCAQua-447 bekend werd, bleek dat deze ook al als QTOF_20_0013 uit de UPLC-Qtof screening van AQZ was gemeld.

In deze rapportage wordt daarom de voortgang van deze 60 onbekende componenten beschreven.

Door het feit dat van enkele onbekende componenten uit de LC-UV screening (LCAqua codes) nog niet alle basis gegevens bekend zijn, is het aantal onbekende waarvoor de identificatie gestart is 52.

Reden voor het combineren van de voortgangsrapportage is dat de identificatie op dit moment ook gecombineerd wordt uitgevoerd.

De voortgangsrapportages van de meldingen staan in onderstaand overzicht; deze voortgangsrapportage betreft de groen gearceerde rapportages.

Rapportage		voortgangsrapportage									
voorschrift	onderwerp	Aantal	Datum	6 weken		18 weken		30 weken		42 weken	
				plandatum	Datum opgestuurd	plandatum	Datum opgestuurd	plandatum	Datum opgestuurd	plandatum	Datum opgestuurd
29	2021-WTW-IAZ0013 Melding en Plan van aanpak identificatie 8 LCAqua componenten	8	2-feb-21	16-mei-21	22-mrt-2021	6-jun-21	31-mei-21	11-aug-21	20-aug-21	23-nov-21	
29	2021-WTW-IAZ0047 Melding en plan van aanpak identificatie LCAqua-196	1	16-apr-21	26-mei-21	31-mei-21	28-aug-21	20-8-2021	12-nov-21	17-nov-21	4-feb-22	
29	2021-WTW-IAZ0048 Melding identificatie 6 componenten uit UPLC_Qtof screening polaire stoffen	5	20-apr-21	1-jun-21	31-mei-21	28-aug-21	20-8-2021	16-nov-21	17-nov-21	8-feb-22	
29	2021-WTW-IAZ0051 Melding identificatie 11 componenten uit UPLC_Orbitrap screening zeer polaire stoffen	11	22-apr-21	1-jun-21	31-mei-21	28-aug-21	20-8-2021	18-nov-21	17-nov-21	10-feb-22	
29	2021-WTW-IAZ0055 Melding 9 onbekende pieken in screening polaire stoffen UPLC-Qtof AQZ (3) en UPLC-Orbitrap KWR (6)	9	7-mei-21	16-jun-21	31-mei-21	18-sep-21	20-8-2021	3-dec-21	17-nov-21	25-feb-22	
29	2021-WTW-IAZ0063 Melding 5 onbekende pieken in screening polaire stoffen UPLC-Qtof AQZ (4) en LC-UV AQZ (1)	5	8-jun-21	20-jul-21	4-aug-21	19-okt-21	20-8-2021	4-jan-22		29-mrt-22	
29	2021-WTW-IAZ0072 Melding 9 onbekende pieken in screening polaire stoffen UPLC-Qtof AQZ (2) en KWR (7)	9	7-jul-21	16-aug-21	4-aug-21	19-sep-21	20-8-2021	2-feb-22		27-apr-22	
29	2021-WTW-IAZ0085 Melding 2 onbekende pieken in screening polaire stoffen UPLC-Qtof AQZ (1) en KWR (1)	2	26-aug-21	1-sep-21	7-okt-21	30-dec-21		24-mrt-22		16-jun-22	
29	2021-WTW-IAZ0105 Melding 7 onbekende pieken in screening polaire stoffen UPLC-Qtof AQZ (4) en KWR (3)	7	30-sep-21	13-nov-21	17-nov-21	3-feb-22		28-apr-22		21-jul-22	
29	2021-WTW-IAZ020xx Melding 4 onbekende pieken in screening polaire stoffen LC-UV AQZ (1), UPLC-Qtof AQZ (2) en KWR (1)	4	16-nov-21	28-dec-21		22-mrt-22		14-jun-22		6-sep-22	

2. Identificatie

Op basis van de gegevens uit de LC-UV screening van AQZ is de toetsing aan de bekende componenten uit de stoffenlijst niet mogelijk. Om het vergelijk uit te kunnen voeren zijn de exacte massa en de bruto formule van de onbekende piek nodig.

AQZ heeft in januari 2021 opdracht ontvangen voor de vaststelling van de exacte massa en bruto formule van de 8 LCAqua componenten, deze opdracht is intussen uitgebreid naar 10.

Bij de aanbidding zijn door AQZ onderstaande opmerkingen gemaakt:

- AQZ heeft tenminste vijf effluent samples nodig waarin de concentraties van de genoemde LCAqua's sterk verschillen (AQZ houdt dit zelf in de gaten in de wekelijkse samples voor de HPLC-UV screening).
- In dit voorstel is ook het berekenen van de bruto formule opgenomen, het gaat dus om een identificatie tot Schymanski niveau 4.
- Voor het betrouwbaar berekenen van de bruto formule worden fragmentatiespectra (MSMS) opgenomen. Met behulp van onze software is het dan in de meeste gevallen mogelijk om tot een eenduidige en betrouwbare bruto formule te komen.
- De startdatum van het project zou 1 februari 2021 kunnen zijn. De verwachting is dat er minimaal drie maanden nodig zijn om goede samples te verzamelen waarin de concentratie voldoende verschilt om trendanalyses te doen. **Planning is om eind april 2021 het rapport op te leveren.**
- **Disclaimer:**
Het zou kunnen zijn dat er meerdere massa's gevonden worden in de verschillende fracties, waarbij het niet mogelijk is om tot 1 m/z en bruto formule te komen voor een LCAqua-code. In dat geval zullen meerdere opties

worden opgenomen in de rapportage, met eventuele informatie over de waarschijnlijkheid welke bruto formule bij de code hoort. Uiteraard is het ook mogelijk dat de HPLC-UV piek bestaat uit een mengsel van pieken die per definitie meerdere massa's geven.

Status punten per 16 november 2021:

Door AQZ zijn de exacte massa en bruto formule van 6 van de 12 onbekende LCAqua componenten gerapporteerd, zie tabel 1 en bijlage 1.

In de rapportage is aangegeven waarom er 3 deelcomponenten zijn gegeven voor de LCAqua-447. Daarnaast is beschreven wat de reden is dat voor de onbekende componenten LCAqua 560, 512 en 471 nog geen exacte massa en bruto formule bekend is. Het onderzoek naar deze 3 onbekende componenten, aangevuld met LCAqua-196, LCAqua-510, LCAqua-191 en LCAqua-571 wordt continu voortgezet totdat de gegevens voldoende onderbouwd gerapporteerd kunnen worden. Hoe lang dit gaat duren is afhankelijk van de aanwezigheid van deze componenten in het effluent van de IAZI. Van de component LCAqua-191 is de veronderstelling dat het de stof 2-phenylbenzimidazole sulfonzuur betreft, dit moet nog definitief bevestigd worden.

Tabel 1 : Exacte massa en bruto formule LCAqua componenten

LC-UV screening AQZ					
Component	Kreti	M	Bruto formule	2021 gem. gehalte [$\mu\text{g/l}$]	gemeld WL
LCAqua-447*	10,61	190,08545	C9H10N4O	5,3	2-feb-21
		122,04852	C6H6N2O		
		69,02133	C3H3NO		
LCAqua-560*	11,07	te weinig info		1,5	2-feb-21
LCAqua-558*	12,59	268,08811	C12H16N2O3S	1,6	2-feb-21
LCAqua-539*	13,40	177,07871	C10H11NO2	2,7	2-feb-21
LCAqua-512*	15,45	te weinig info		3,5	2-feb-21
LCAqua-471*	19,60	te weinig info		2,1	2-feb-21
LCAqua-436*	40,31	250,1542	C15H22O3	1,6	2-feb-21
LCAqua-295*	42,95	278,18897	C17H26O3	2,5	2-feb-21
LCAqua-196*	18,47	te weinig info		3,7	16-apr-21
LCAqua-510*	29,43	te weinig info		2,3	8-jun-21
LCAqua-191*	13,11	te weinig info		3,2	27-aug-21
LCAqua-571	13,10			5,6	16-nov-21

Zie bijlage A voor het verdere overzicht van de onbekenden uit de non-target screening van AQZ en KWR

1. Beoordelen aan de hand van de exacte massa en bruto formule van de onbekende piek of dit een component van de stoffenlijst zoals opgenomen in de watervergunning betreft:

Op basis van de gerapporteerde exacte massa en bruto formule van de 6 LCAqua componenten is vastgesteld dat deze niet voorkomen op de stoffenlijst (bijlage 4 uit de vergunning).

Wel is vastgesteld dat de grootse van de 3 deelcomponenten van de LCAqua-447 op 16 april als een extra onbekende component uit de 'non target screening' (NTS) van AQZ onder de code QTOF_20_0013 valt.

Het is duidelijk dat er een overlap is tussen de verschillende screeningsmethodes waar op gelet wordt bij het melden van nieuwe onbekende componenten. Echter op basis van de gegevens van de LCAqua componenten is niet direct vast te stellen of dit dubbelingen betreft ten opzichte van de overige methodes.

2. Indien de gegevens niet overeenkomen met componenten op de stoffenlijst wordt identificatie van de onbekende component gestart.

Status 16 november 2021:

AQZ heeft het influent en het afvalwater van 6 hoofdriolen op de aanwezigheid van de te identificeren 25 onbekende componenten met de UPLC-Qtof methode uitgevoerd.

Ook KWR heeft het influent en het afvalwater van 6 hoofdriolen op de aanwezigheid van de te identificeren 29 onbekende componenten met de UPLC-Qtof methode uitgevoerd.

Voortgangsplanning:

Op basis van het feit dat nog niet voor alle componenten duidelijk is of ze in het influent of een van de hoofdriolen aanwezig is, zijn nogmaals week mengmonsters van in- en effluent en 6 hoofdriolen voor screening op de 60 onbekende componenten aangeboden aan AQZ en KWR.

Het resultaat is dat, voor enkele onbekende componenten meer inzicht is verkregen in het deel van de Chemelot site waar de bron van de component is gelegen.

Indien een of meerdere van de te identificeren onbekende componenten bewezen, niet met een enkele analyse definitief te bepalen, niet in het influent aanwezig zijn, is de betreffende onbekende component mogelijk een afbraak brokstuk van een groter molecuul in de IAZI.

Zie bijlage B voor de kwalitatieve weergave van de aanwezigheid van onbekende componenten in het in- en effluent en de hoofdriolen van de Chemelot site.

3. Herkomst (fabriek en proces) van de onbekende componenten

Status 16 november 2021:

De analyse van het influent en hoofdriool monsters van de weken 25 t/m 18 is uitgevoerd en loopt door, volgens de planning welke beschreven is in hoofdstuk 2, tot dat de bron van de component bekend is. Het moment van definitief vast stellen van de bron kan voor elke component verschillend zijn. Het is op voorhand niet zeker dat een identificatie van een onbekende component tot het verwachte resultaat leidt.

De bepaling van de bron van de onbekende component gebeurt met de uitvoering van onderstaande stappen:

1. Bemonstering en analyse van Influent, totaal Elserheide, totaal Kerensheide, zuid riool, midden riool, procesriool zuid en procesriool noord .
2. Indien het deel van de locatie van herkomst bekend is worden, in overleg met de fabrieken welke lozen op dat riool, monsters stroom opwaarts richting genomen en geanalyseerd.
3. Op basis van de resultaten van stap 2 is het meestal mogelijk een fabriek als bron te benoemen.

De verwachting is dat in december 2021 overleg met de fabriek(en) gestart kan worden met stappen 4 t/m 7.

4. Samen met de fabriek wordt de basis informatie (exacte massa en bruto formule) beoordeeld om in te schatten in welk deel van het proces de onbekende componenten eventueel afkomstig kan zijn.
5. Op basis van de inschatting worden afvalwater stromen van de fabriek bemonsterd om de inschatting te onderbouwen.
6. Als de verwachte component bevestigd is, is het noodzakelijk om een standaard van deze component te bestellen of indien niet verkrijgbaar te laten synthetiseren, dit kan enkele maanden duren.
7. Met de standaard kan de juiste concentratie van de onbekende component in het effluent van de IAZI bepaald worden.

4. Beoordelen geïdentificeerde nieuwe stof.

Indien een onbekende component geïdentificeerd is, wordt deze als nieuwe stof beoordeeld.

Elke nieuwe stof wordt volgens het acceptatie beleid beoordeeld waarbij onderstaande stappen worden doorlopen:

1. Bepalen stoffeigenschappen.
Mocht de standaard van de geïdentificeerde component commercieel verkrijgbaar zijn, is er in de meeste gevallen ook een CAS nummer beschikbaar op basis waarvan de stoffeigenschappen opgezocht kunnen worden; dit is echter niet altijd het geval.
Indien er geen stof eigenschappen beschikbaar zijn moeten deze via QSAR modellering afgeleid worden.
2. Op basis van de stoffeigenschappen wordt de ABM2016 toetsing uitgevoerd.
3. De ECO- en drinkwaternormen worden opgezocht en indien deze niet beschikbaar zijn worden deze conform de door het RIVM goedgekeurde systematiek afgeleid.
4. Op basis van de gemeten effluent concentratie kan het effect van de lozing met de immissietoets beoordeeld worden.
5. Indien uit de immissietoets blijkt dat de lozing niet voldoet moet in samenwerking met de lozende fabriek bepaald worden welke (BBT) maatregelen mogelijk zijn om de lozing te reduceren.

5. Bijlagen

- A. Overzicht van de 39 componenten waarvoor de identificatie gestart is.
- B. Tracering onbekende componenten

LC-UV screening AQZ						Non target screening AQZ						Non target screening KVR						
Component	Kroci	M	Bruteformuls	2021 gem. gehalte [µg/l]	gemeld WL	Component	M	Bruteformuls	RT	2021 gem. gehalte [µg/l]	gemeld WL	Component	M	Bruteformuls	RT	2021 gem. gehalte [µg/l]	gemeld WL	
LCAqua-447*	10,61	190,08545	C9H10N4O	5,3	2-feb-21	GTOF_20_0014	190,08545	C9H10N4O	4,893	1,7		20-apr-21	ST_ZPS_POS_004	122,0479	C6H6N2O	3,41	8,8	
						GTOF_20_0012	122,0486	C6H6N2O	4,89	10,0								
						GTOF_SIT_21_0435	69,02133	C3H3NO	4,893									
LCAqua-560*	11,07	to uciniaqifa		1,5	2-feb-21	LCAqua-560*		to uciniaqifa										
LCAqua-558*	12,59	268,08811	C12H16N2O3S	1,6	2-feb-21	GTOF_SIT_21_0074	268,08811	C12H16N2O3S	5,97									
LCAqua-529*	13,40	177,07871	C10H11NO2	2,7	2-feb-21	GTOF_SIT_21_0575	177,07871	C10H11NO2	5,24	0,4								
LCAqua-512*	15,45	to uciniaqifa		3,5	2-feb-21	LCAqua-512*		to uciniaqifa										
LCAqua-471*	19,60	to uciniaqifa		2,1	2-feb-21	LCAqua-471*		to uciniaqifa										
LCAqua-436*	40,21	250,1542	C15H22O3	1,6	2-feb-21	GTOF_SIT_21_0576	250,15618	C15H22O3	11,44									
LCAqua-295*	42,95	278,18897	C17H26O3	2,5	2-feb-21	GTOF_SIT_21_0006	278,18837	C17H26O3	12,05									
LCAqua-196*	18,47	to uciniaqifa		3,7	16-apr-21	GTOF_SIT_21_0097	218,1169	C11H14N4O	5,941	1,2								
LCAqua-510*	29,43	to uciniaqifa		2,3	8-jun-21	LCAqua-510*		naq goonqifa										
LCAqua-191*	13,11	to uciniaqifa		3,2	27-aug-21	LCAqua-191*		naq goonqifa										
LCAqua-571	13,10			5,6	16-nov-21	LCAqua-571*		naq goonqifa										
totaal	12	onbekende stoffen gemeld																
						GTOF_SIT_21_0175	187,06644	C8H12NO2S	3,267	0,4		20-apr-21						
						GTOF_20_0010	166,06324	C9H10O3	4,493	3,8		20-apr-21						
						GTOF_SIT_21_0132	166,12625	C9H16N2O	4,772	0,7		20-apr-21	ST_ZPS_POS_007	168,1261	C9H16N2O	4,63	7,0	
						GTOF_SIT_21_0194	150,07953	C8H16N2O	5,542	1,0		20-apr-21						
						GTOF_SIT_21_0243	135,04313	C6H5N3O	4,412	2,0		7-mei-21						
						GTOF_SIT_21_0103	236,127	C10H20O6	5,038	3,4		7-mei-21						
						GTOF_SIT_21_0178	140,1073	C8H12NO	6,476	1,5		7-mei-21						
						GTOF_SIT_21_0120	183,13718	C9H17N3O	2,811	1,0		8-jun-21						
						GTOF_SIT_21_0164	185,11648	C8H15N3O2	2,877	0,6		8-jun-21						
						GTOF_SIT_21_0233	192,05664	C6H12N2O3S	3,642	0,6		8-jun-21						
						GTOF_SIT_21_0187	132,058	C9H8O	5,251	1,6		8-jun-21						
						GTOF_SIT_21_0130	166,1106	C9H14N2O	6,485	0,4		6-jul-21						
						GTOF_SIT_21_0149	149,08412	C9H11NO	5,249	0,5		6-jul-21						
						GTOF_SIT_21_0047	222,18409	C12H22N4	4,542	0,8		20-sep-21						
						GTOF_SIT_21_0242	107,06092	C6H6N2	5,550	1,5		20-sep-21						
						GTOF_SIT_21_0565	191,09235	C8H14O5	4,835	2,7		20-sep-21						
						GTOF_SIT_21_0597	138,06668	C6H7N3O	2,648	2,1		20-sep-21						
						GTOF_SIT_21_0268	135,04372	C6H5N3O	4,397	2,5		16-nov-21						
						GTOF_SIT_21_0587	123,06442	C7H7N3	7,028	1,2								
						GTOF_SIT_21_0599	194,11634	C9H14N4O	3,11	1,0		16-nov-21						
						totaal	20	onbekende stoffen gemeld - GTOF_SIT_21_0038										
													ST_ZPS_POS_005	228,1473	C11H20N2O3	10,37	9,3	6-jul-21
													ST_ZPS_POS_006	220,13285	C11H16N4O	5,10	3,4	22-apr-21
													ST_ZPS_POS_008	206,14175	C12H19N2O	2,90	5,1	22-apr-21
													ST_ZPS_POS_009	186,11556	C12H14N2	5,63	4,1	22-apr-21
													ST_ZPS_POS_012	236,12716	C11H16N4O2	3,50	2,9	22-apr-21
													ST_ZPS_POS_023	201,98967	nab	9,88	4,1	7-mei-21
													ST_ZPS_POS_085	194,95131	nab	10,15	5,2	7-mei-21
													ST_ZPS_NEG_003	170,91595	nab	2,89	16,5	20-sep-21
													ST_ZPS_NEG_004	230,0902	C9H14N2O5	3,95	7,6	7-mei-21
													ST_ZPS_NEG_005	210,01973	C6H10O6S	2,84	11,5	22-apr-21
													ST_ZPS_NEG_007	231,9226	nab	2,80	8,6	7-mei-21
													ST_ZPS_NEG_008	257,98675	nab	5,16	9,5	22-apr-21
													ST_ZPS_NEG_009	212,07966	C9H12N2O4	4,86	7,0	22-apr-21
													ST_ZPS_NEG_010	212,07966	C9H12N2O4	4,11	6,0	22-apr-21
													ST_ZPS_NEG_011	260,00233	nab	4,86	9,1	22-apr-21
													ST_ZPS_NEG_012	230,0902	C9H14N2O5	3,50	3,7	7-mei-21
													ST_ZPS_NEG_013	226,02668	nab	7,85	5,1	6-jul-21
													ST_ZPS_NEG_014	220,04042	C8H12O5S	6,92	6,2	22-apr-21
													ST_ZPS_NEG_016	138,03066	C5H4N3O2	7,07	4,0	6-jul-21
													ST_ZPS_NEG_018	181,9286	nab	9,62	6,9	20-sep-21
													ST_ZPS_NEG_019	232,89044	nab	9,49	10,5	20-sep-21
													ST_ZPS_NEG_020	212,07964	C9H12N2O4	5,64	5,4	22-apr-21
													ST_ZPS_NEG_021	237,99685	nab	2,83	4,6	6-jul-21
													ST_ZPS_NEG_023	212,07964	C9H12N2O4	5,20	4,1	6-jul-21
													ST_ZPS_NEG_024	232,89044	nab	9,57	16,6	27-aug-21
													ST_ZPS_NEG_041	304,02770	nab	4,18	7,7	6-jul-21
													ST_ZPS_NEG_042	260,0018	nab	4,29	6,8	7-mei-21
													ST_ZPS_NEG_046	279,92195	nab	9,88	5,4	6-jul-21
													ST_ZPS_NEG_059	232,09551	C11H12N4O2	4,47	6,1	16-nov-21
													totaal	29	onbekende stoffen gemeld			

Bijlage B : Tracering onbekende componenten

Component	volg nummer	Component	M	Bruta formul	RT	2021 gem. effl. gehalten [µg]	Maartozz influent en huifdrinles uk 25-26-27-28											
							Aangetoand in effluent [µg]	Aangetoand in Influent [µg]	Aangetoand Eberheid [µg]	Aangetoand Korenheid [µg]	Aangetoand zuidriem [µg]	Aangetoand priaal zuid [µg]	Aangetoand middenriem [µg]	Aangetoand priaal noord [µg]				
LOAqua-447*	1	QTOF_20_0014	190,08545	C9H10N4O	4,893	1,7	ja											
	2	QTOF_20_0012	122,0496	C6H6N2O	4,89	10,0	ja											
		QTOF_SIT_21_0435	69,02133	C3H3NO	4,893		nee											
LOAqua-560*	3	LOAqua-560*	te uienig info															
LOAqua-558*	4	QTOF_SIT_21_0074	268,98811	C12H16N2O3	5,97		nee	ja			ja							
LOAqua-539*	5	QTOF_SIT_21_0575	177,07871	C10H11NO2	5,24	2,0	ja											
LOAqua-512*	6	LOAqua-512*	te uienig info															
LOAqua-471*	7	LOAqua-471*	te uienig info															
LOAqua-436*	8	QTOF_SIT_21_0576	250,15618	C15H22O3	11,44		nee											
LOAqua-295*	9	QTOF_SIT_21_0006	278,18837	C17H26O3	12,05		nee											
LOAqua-196*	10	QTOF_SIT_21_0097	218,11619	C11H14N4O	5,541	3,4	ja											
LOAqua-510*	11	LOAqua-510*	naq geen info															
LOAqua-191*	12	LOAqua-191*	naq geen info															
	13	QTOF_20_0010	166,06324	C9H10O3	4,493	3,8	ja											
	14	QTOF_SIT_21_0047	222,18409	C12H22N4	4,662	0,8	ja	ja	ja	ja	ja							
	15	QTOF_SIT_21_0103	236,127	C10H20O6	5,038	1,1	nee											
	16	QTOF_SIT_21_0128	183,13718	C9H17N3O	2,811	1,2	ja											
ST_ZPS_POS_007	17	QTOF_SIT_21_0132	168,12625	C9H16N2O	4,772	4,3	ja	ja										ja
	18	QTOF_SIT_21_0133	166,1186	C9H14N2O	6,485	1,2	ja	ja										ja
	19	QTOF_SIT_21_0149	149,03412	C9H11NO	5,269	1,6	nee											
	20	QTOF_SIT_21_0157	122,050	C9H8O	5,251	1,4	ja											
	21	QTOF_SIT_21_0164	185,11648	C8H15N3O2	2,877	1,5	ja											
	22	QTOF_SIT_21_0175	187,06644	C8H13N2O2S	3,267	3,4	ja											
	23	QTOF_SIT_21_0178	140,1073	C8H13NO	6,476	1,5	ja											
	24	QTOF_SIT_21_0194	150,07953	C8H10N2O	5,542	1,9	ja											
	25	QTOF_SIT_21_0233	192,05664	C8H12N2O3S	3,692	2,0	ja	ja			ja	ja						
	26	QTOF_SIT_21_0242	107,06092	C6H6N2	5,550	1,5	ja	ja										ja
	27	QTOF_SIT_21_0243	125,04313	C6H5H3O	4,412	1,8	ja											
	28	QTOF_SIT_21_0565	191,09235	C8H14O5	4,885	2,7	nee											
	29	QTOF_SIT_21_0597	138,06648	C6H7N3O	2,648	2,1	ja											
QTOF_SIT_21_008	30	ST_ZPS_POS_005	228,1473	C11H20N2O3	10,37	9,3	ja	ja										ja
	31	ST_ZPS_POS_006	220,13225	C11H16N4O	5,10	3,4	ja	ja										Ja
	32	ST_ZPS_POS_008	206,14175	C12H18N2O	2,90	5,1	ja	ja			ja	ja						
	33	ST_ZPS_POS_009	186,11556	C12H14N2	5,68	4,1	ja	ja			ja	ja						
	34	ST_ZPS_POS_012	236,12716	C11H16N4O2	3,50	2,9	ja											
	35	ST_ZPS_POS_023	201,93947	nnb	9,88	4,1	ja	ja	ja	ja	ja	ja						
	36	ST_ZPS_POS_055	194,95121	nnb	10,12	5,2	ja	ja	ja	ja	ja	ja						
	37	ST_ZPS_NEG_003	170,91595	nnb	2,89	16,5	ja	ja	ja	ja	ja+	ja+						
	38	ST_ZPS_NEG_004	230,0902	C9H14N2O5	3,95	7,6	ja	ja	ja	ja	ja	ja						ja
	39	ST_ZPS_NEG_005	210,01973	C8H10O6S	2,84	11,5	ja	ja	ja	ja	ja	ja						
	40	ST_ZPS_NEG_007	231,9226	nnb	2,80	9,6	ja	ja	ja	ja	ja	ja						
	41	ST_ZPS_NEG_008	257,98675	nnb	5,16	9,5	ja	ja	ja	ja	ja	ja						ja
	42	ST_ZPS_NEG_009	212,07966	C9H12N2O4	4,86	7,0	ja	ja	ja	ja	ja	ja						ja
	43	ST_ZPS_NEG_010	212,07966	C9H12N2O4	4,11	6,0	ja	ja	ja	ja	ja	ja						ja
	44	ST_ZPS_NEG_011	260,00233	nnb	4,86	9,1	ja	ja	ja	ja	ja	ja						
	45	ST_ZPS_NEG_012	230,0902	C9H14N2O5	3,50	3,7	ja	ja	ja	ja	ja	ja						ja
	46	ST_ZPS_NEG_013	226,02648	nnb	7,85	5,1	ja-	ja	ja	ja	ja	ja			ja			
	47	ST_ZPS_NEG_014	220,04042	C8H12O5S	6,92	5,2	ja											
	48	ST_ZPS_NEG_016	138,03066	C8H4N3O2	7,07	4,0	ja-	ja	ja	ja	ja	ja			ja			
	49	ST_ZPS_NEG_018	181,9296	nnb	9,62	5,9	ja	ja	ja	ja	ja	ja			ja			
	50	ST_ZPS_NEG_019	233,89048	nnb	9,49	10,5	ja	ja	ja	ja	ja	ja			ja			
	51	ST_ZPS_NEG_020	212,07944	C9H12N2O4	5,64	5,4	ja	ja	ja	ja	ja	ja						ja
	52	ST_ZPS_NEG_021	237,99685	nnb	2,82	4,6	ja											
	53	ST_ZPS_NEG_023	212,07944	C9H12N2O4	5,20	4,1	ja	ja	ja	ja	ja	ja						ja
	54	ST_ZPS_NEG_036	233,89044	nnb	9,57	16,4	ja	ja	ja	ja	ja	ja			ja-			
	55	ST_ZPS_NEG_041	304,02778	nnb	4,18	7,7	ja	ja	ja	ja	ja	ja						
	56	ST_ZPS_NEG_042	260,0018	nnb	4,39	6,8	ja	ja	ja	ja	ja	ja						
	57	ST_ZPS_NEG_046	279,92195	nnb	9,88	5,4	ja	ja	ja	ja	ja	ja			ja			