

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

<b>Datum</b>	24-02-2022	<b>Behandeld door</b>	5.1.2e
<b>Kenmerk</b>	2022-WTW-IAZI0017	<b>E-mailadres</b>	5.1.2e @sitech.nl
<b>Onderwerp</b>	rapportage 2021 voorschrift 27	<b>Telefoonnummer</b>	+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 27, lid 5, van de Watervergunning dient Jaarlijks binnen 8 weken na het verstrijken van een kalenderjaar een rapportage van de monitoringsgegevens van het effluent als bedoeld in het eerste lid van dit voorschrift aan het dagelijks bestuur te worden overgelegd.

Bijgevoegd is de rapportage van 2021.

Hopende u voldoende te hebben geïnformeerd,

In afwachting van uw reactie.

Sitech Services,

5.1.2e

5.1.2e

## MEMO

Datum 28.02.2022  
 Kenmerk IAZ-007585  
 Behandeld door 5.1.2e 5.1.2e

### Rapportage monitoringsgegevens chemische screening effluent IAZI volgens voorschrift 27 lid 5 en 6

#### Inleiding

Conform voorschrift 27 lid 1 van de vigerende watervergunning met kenmerk 2019-Z4532, dd. 15 december 2020 worden de screeningen van het effluent van de IAZI uitgevoerd.

Met de wijziging van de vergunning met kenmerk 2021-Z4273, dd. 15 februari 2022 is voorschrift 27 lid 1 aangepast.

De omschrijving en frequentie van de screeningen van het effluent zijn gegeven in onderstaande tabel.

Stofgroepen	Frequentie	Analysemethode	Referentievloeistof
Apolaire stoffen	1 maal per kwartaal een weekmengmonster	LC-DAD D3	Linuron CAS-nr. 330-55-2
Niet vluchtig	1 maal per kwartaal een weekmengmonster	GC-MS	4,4-difluorbifenyl CAS-nr. 398-23-2
Vluchtig	1 maal per week een steekmonster	GC-MS	Fluorbenzeen CAS-nr 462-06-6
Matig polair tot polair	1 maal per week een weekmengmonster	LC-UV	Chlooroxuron CAS-nr 1982-47-4
Polaire stoffen	1 maal per week een weekmengmonster	UPLC-Q-tof met C18 kolom	Voor positieve ionisatie atrazine-d5 CAS nr. 163165-75-1 Voor negatieve ionisatie bentazon-d6 CAS nr. 25057-89-0
Zeer polaire stoffen	1 maal per week een weekmengmonster	UPLC-Orbitrap met HILIC kolom	Voor positieve ionisatie chloormequat-d9 CAS nr. 1219257-11-0 Voor negatieve ionisatie Sotalol-d7 en PFBA-13C3 CAS nr. 1398065-65-0/CAS nr ongelabelde stof: 375-22-4 (PFBA)

In deze rapportage is per stofgroep de in voorschrift 27 lid 6 gevraagde informatie gegeven.

## 1. Apolaire stoffen (D3-analyse LC-DAD)

De lozing van persistente en bioaccumulerende (PB) stoffen wordt sinds 2005 met een eigen LC-DAD methode (D3 methode) bepaald in het effluent van de IAZI. De D3 analyse wordt éénmaal per kwartaal uitgevoerd van een week mengmonster.

De rapportage van componenten met een log Kow >3 bestaat uit de somparameter van alle gedetecteerde componenten in µg/l en het aantal individuele componenten met een concentratie > 10 µg/l.

Zie ook aanvraag watervergunning IAZI voor resultaten van 2016 tem 2019.

### 1.1 Monitoringsgegevens apolaire stoffen 2021

Monster	Monstername datum	COMPONENT	RESULT UNITS
Effluent	25-1-2021	D3 individuele piekwaarde.	<10 ug/l
Effluent	26-4-2021	D3 individuele piekwaarde.	<10 ug/l
Effluent	26-7-2021	D3 individuele piekwaarde.	<10 ug/l
Effluent	25-10-2021	D3 individuele piekwaarde	<10 ug/l

Monster	Monstername datum	COMPONENT	RESULT UNITS
Effluent	25-1-2021	D3 somparameter t.o.v. Linuron	20 ug/L
Effluent	26-4-2021	D3 somparameter t.o.v. Linuron	23 ug/L
Effluent	26-7-2021	D3 somparameter t.o.v. Linuron	18 ug/L
Effluent	25-10-2021	D3 somparameter t.o.v. Linuron	22 ug/L

### 1.2 Bijzondere constatering en/of afwijkingen apolaire stoffen 2021

N.v.t.

### 1.3 Oorzaak van bijzondere constatering en/of afwijkingen apolaire stoffen 2021

Alle waardes liggen in het verlengde van voorgaande jaren.

### 1.4 Genomen maatregelen bij bijzondere constatering en/of afwijkingen apolaire stoffen 2021

N.v.t.

### 1.5 Trendbeschrijving apolaire stoffen 2021

De resultaten van de D3 somparameter van afgelopen jaren 2016 tem 2021 heeft een maximum van 92 µg/l en een minimum van 10 µg/l. Voor 2021 liggen de resultaten stabiel aan de lage kant van voorgaande range, met een maximum van 23 µg/l en een minimum van 18 µg/l.

## 2. Niet vluchtige stoffen (GC-MS)

De GC-MS screening niet-vluchtig wordt maandelijks uitgevoerd op basis van een week mengmonster effluent. Het mengmonster wordt geëxtraheerd met petroleumether en het extract wordt dan geïnjecteerd op een GC met een hoger temperatuur programma. De componenten die met deze methode bepaald kunnen worden hebben een kookpunt tussen 200 en 400°C; dit zijn apolaire componenten.

### 2.1 Monitoringsgegevens niet vluchtige stoffen 2021

Component	ABM stof	CAS nr.	n metingen	Min	Max	Gemiddelde
Cetene	A1 pZZS	629-73-2	10	2	2	0,2
Cholesterol	A1	57-88-5	10	1	1	0,2
Octocrylene	niet in SL	6197-30-4	10	2	10	2,2
2-Ethylhexyl salicylate	niet in SL	118-60-5	10	2	2	0,4
Dodecene	A1	112-41-4	10	2	2	0,2
Stigmasterol	niet in SL	83-48-7	10	3	3	0,3
2-Propanol, 1-chloro-, phosphate (3:1)	B3 pZZS	13674-84-5	10	1	1	0,1
Squalene	A4	111-02-4	10	3	3	0,6
n-Hexadecanoic acid	A4	57-10-3	10	1	5	0,6
Octadecanoic acid	A4	57-11-4	10	2	2	0,2
α-Tocopheryl acetate / Vitamin E acetate	niet in SL	58-95-7	10	1	1	0,1

\* niet in SL: Betekend; niet in stoffenlijst bijlage 4 vergunning.

Zie bijlage "B. Monitoringsgegevens niet vluchtige stoffen 2021" voor uitgebreide gegevens.

### 2.2 Bijzondere constatering en/of afwijkingen niet vluchtige stoffen 2021

Er zijn 4 stoffen onbekende (niet in vergunning) teruggevonden uit de niet vluchtige screening. Deze worden hieronder kort beschreven. Zie bijlage B voor meetgegevens.

**Octocrylene:** Staat op pZZS lijst. Is een populair toevoegmiddel aan zonnecrème omwille van de neutraliserende werking op UV radiatie van zonlicht. Door de aangetoonde effectiviteit is deze stof wereldwijd goedgekeurd voor cosmetica en huidverzorging producten tot 10-12% in concentratie.

Bron: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/22571>

**2-Ethylhexyl salicylate:** Staat op pZZS lijst. Komt voor in cosmetica, persoonlijke hygiënische producten. Is een natuurlijk product in Homo sapiens (mens) en Lonicera japonica (japanse Kamperfoelie, sierplant)

Bron: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/8364>

Stigmasterol: Geen ZZS of pZZS stof. Stigmasterol is een onverzadigde plantensterol, waarvan de chemische structuur veel lijkt op die van cholesterol. Wordt gevonden in vet en oliën van sojabonen, calabar bonen en raapzaadolie alsook verschillende groenten, noten, zaden en niet gepasteuriseerde melk.

Bron: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/5280794>

a-Tocopheryl acetate / Vitamin E acetate: Geen ZZS of pZZS stof. Alpha-tocopherol is de primaire vorm van vitamin E dat bij voorkeur gebruikt wordt door het menselijk lichaam ter opname van dieet benodigdheden.

Bron: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/alpha-Tocopherol-acetate>

2.3 Oorzaak van bijzondere constatering en/of afwijkingen niet vluchtige stoffen 2021

Stoffen die via sanitair water naar IAZI komen, in zeer lage concentraties.

2.4 Genomen maatregelen bij bijzondere constatering en/of afwijkingen niet vluchtige stoffen 2021

De 4 onbekende stoffen worden gemeld aan WL via deze rapportage.

2.5 Trendbeschrijving niet vluchtige stoffen 2021

Gelijkaardige trend van 2021 t.o.v. voorgaande jaren met variatie tussen 10 en 100 µg/l totale niet vluchtige componenten.

### 3. Vluchtige stoffen (GC-MS)

Omdat het vluchtige componenten betreft is het werken met dag opbouwmonsters niet mogelijk. De GC-MS vluchtig-methode wordt uitgevoerd aan momentmonsters, waarbij een monsterfles geheel gevuld wordt om een gaskap te vermijden waardoor vluchtige stoffen kunnen ontwijken. Omdat het momentmonsters betreft wordt deze analyse wekelijks uitgevoerd. De componenten die met deze methode bepaald kunnen worden zijn mid-polaire tot apolaire componenten met kookpunten tussen -15 en 200°C. Een grotere hoeveelheid effluent van 5 – 10 ml wordt in een klein vaatje geïnjecteerd van waaruit de vluchtige componenten met stikstof worden gestript alvorens deze op de kolom gebracht worden. Door de grotere hoeveelheid monster wordt een lage detectiegrens gehaald van ca. 0,1 µg/l.

#### 3.1 Monitoringsgegevens vluchtige stoffen 2021

Component	ABM stof	CAS nr.	n metingen	Min	Max	Gemiddelde
2-butanon	B5 pZS	78-93-3	52	0,60	0,8	0,04
2-butene	B3	107-01-7	52	0,38	0,99	0,04
3-methyl-3-buten-1-ol	niet in SL	763-32-6	52	0,60	0,8	0,04
2-methyl-1-propeen	A3	115-11-7	52	0,50	1,6	0,20
2-methyl-2-propanol	B4	75-65-0	52	0,50	10	0,72
4-vinylcyclohexeen	A2	100-40-3	52	0,50	0,5	0,01
Acrylonitril	Z2	meth	52	1,00	1	0,02
Butadieen	Z2	106-99-0	52	1,00	1	0,02
Di-cyclopentadien DCPD	pZS	77-73-6	52	0,20	1	0,08
ETBE	niet in SL	637-92-3	52	0,50	2	0,11
Koolstofdisulfide	B2 pZS	75-15-0	52	0,70	2	0,05
methyl tertiair butyl ether	A3 pZS	1634-04-4	52	0,50	15	1,37
Oxazool	B4	288-42-6	52	0,60	120	19,54
Tetrahydrofuraan THF	niet in SL	109-99-9	52	0,70	1,5	0,06
propyleenoxide	Z2	75-56-9	52	2,00	2	0,04

\* niet in SL: Betekend; niet in stoffenlijst bijlage 4 vergunning.

#### 3.2 Bijzondere constatering en/of afwijkingen vluchtige stoffen 2021

Er zijn 3 onbekenden stoffen gemeten die niet zijn opgenomen in vergunning. Verder heeft oxazool een variërende concentratie doorheen het jaar en komt deze in iets hogere concentraties voor in 2021. Oxazool is verantwoordelijk voor meer dan 85% van de totale concentratie van vluchtige componenten. De rest van de aparte componenten zijn lager of in gelijke trend met voorgaande jaren. Zie bijlage "C. Monitoringsgegevens vluchtige stoffen 2021".

**3-methyl-3-buten-1-ol:** Geen ZS of pZS. Metaboliet in organismes. Komt natuurlijk voor in *Bistorta manshuriensis* (kruidachtige plant uit boekweitfamilie) en *Dactylanthus taylorii* (parasitaire plant).

Bron: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/12988>

ETBE / ethyl tert-butyl ether: Geen ZZS of pZZS. Wordt gebruikt als toevoeg middel in brandstof ter reductie van emissie in roet en koolstofoxide. Wordt ook natuurlijk teruggevonden in Tuber borchii (witte truffel).

Bron: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/12512>

Tetrahydrofuraan THF: Geen ZZS of pZZS. Stond in tabel 7.9 aanvraag watervergunning onder hoofdstuk 7.2.8.3, maar is niet in vergunning opgenomen. Is een cyclisch ether aprotisch solvent. Komt natuurlijk voor in Coffea Arabica (koffieplant) en Castanopsis cuspidata (plant).

Bron: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/8028>

### 3.3 Oorzaak van bijzondere constatering en/of afwijkingen vluchtige stoffen 2021

N.v.t.

### 3.4 Genomen maatregelen bij bijzondere constatering en/of afwijkingen vluchtige stoffen 2021

De 4 onbekende stoffen worden gemeld aan WL via deze rapportage.

### 3.5 Trendbeschrijving vluchtige stoffen 2021

Voorgaande jaren is het gemiddelde van vluchtige componenten altijd <100 µg/l geweest. In 2021 was het gemiddelde van totaal vluchtige componenten 22.4 µg/l per week. Waarvan het grootste gedeelte >85% oxazool was.

#### 4. Matig polair tot polaire stoffen (LC-UV)

Deze methode wordt toegepast voor de aansluiting met de methodes die gebruikt worden voor de screening van het oppervlaktewater ten behoeve van de inname voor de bereiding van drinkwater. Met de resultaten van deze methode wordt inzicht verkregen in de aanwezigheid van onbekende componenten die in het Maaswater aanwezig zijn; de zogenaamde LCAqua-xxx componenten.

Conform vergunning wordt deze analyse elke week uitgevoerd op basis van een week mengmonster dat naar het laboratorium Aqua Lab Zuid (AQZ) wordt gebracht. AQZ is een waterlaboratorium dat de LC-UV methode frequent gebruikt voor de analyse van monsters oppervlaktewaters in opdracht van drinkwater bedrijven.

##### 4.1 Monitoringsgegevens matig polair tot polaire stoffen 2021

Naam	Kreti	2021					Opmerking
		n	n > 2,2	gem. [µg/l]	max [µg/l]	min [µg/l]	
LCAqua-440	7,87	50	50	58	103	9,9	Wordt met LC-MS bepaald (zie rapportage gecalibreerde stoffen)
LCAqua-181	32,56	13	13	30	153	3	Component uit monstername slang deze is niet geloosd met effluent
LCAqua-033	7,49	1	1	6,5	6,5	6,5	Pyrazool
LCAqua-571*	13,10	7	7	5,2	7,0	3,1	2-phenylbenzimidazole sulfonzuur
LCAqua-184	45,25	2	1	2,5	3,3	1,6	Component uit monstername slang deze is niet geloosd met effluent
LCAqua-186	47,72	3	1	2,2	3,6	1,2	Component uit monstername slang deze is niet geloosd met effluent
LCAqua-185	46,04	2	1	2,0	2,7	1,3	Component uit monstername slang deze is niet geloosd met effluent
LCAqua-447*	10,41	44	34	5,5	14,0	1,2	identificatie loopt
LCAqua-196*	18,47	15	10	3,7	6,2	1,4	identificatie loopt
LCAqua-512*	15,46	50	36	3,6	9,7	1,1	identificatie loopt
LCAqua-191*	13,11	8	5	3,2	4,9	2,1	identificatie loopt
LCAqua-539*	13,36	26	17	2,7	4,5	1,1	identificatie loopt
LCAqua-510*	29,43	32	14	2,5	6,9	1,1	nog geen basis gegevens
LCAqua-295*	43,04	48	15	2,3	20,0	1,0	identificatie loopt
LCAqua-471*	19,70	7	3	2,1	2,8	1,1	nog geen basis gegevens
LCAqua-436*	40,41	39	5	1,6	5,0	1,0	identificatie loopt
LCAqua-560*	10,97	9	1	1,5	2,2	1,1	nog geen basis gegevens
LCAqua-558*	12,88	14	1	1,5	2,8	1,0	identificatie loopt

Zie bijlage "D. Monitoringsgegevens matig polair tot polaire stoffen 2021" voor uitgebreide gegevens.

##### 4.2 Bijzondere constatering en/of afwijkingen matig polair tot polaire stoffen 2021

In totaal zijn er 36 componenten (LCAqua's) gevonden.

De onbekende componenten LCAqua-181/184/185/186 zijn in week 41 plotseling in sterk verhoogde relatieve concentraties aangetoond. Ter tracerings van deze bijzondere constatering is onderzocht hoe dit mogelijk zou zijn. Aqua Lab Zuid heeft aangegeven dat ze dit al eerder hadden gezien na onderhoud van het monstername systeem. Er bleek dat bij Sitech in week 41 ook onderhoud gepleegd is aan de



monsternamekast voor het effluent waarbij flexibele monsternameslang vervangen zijn. Als verificatie van bron is een stukje slang in milli-Q water (ultra puur water) opgestuurd. Als conclusie kwam uit deze analyse ook de voorgenoemde LCAqua's naar voren; zie onderstaande rapportage van AQZ van het resultaat van de LC-UV screening van het water waarin een stukje van dezelfde nieuwe slang van de monsternamekast was opgestuurd. Deze componenten waren dus alleen in het genomen effluent monster aanwezig, maar zijn niet met het effluent op de zijtak Ur geloosd.

<b>Monsternummer</b> : 5887745 <b>Locatie</b> : Sitech Manufacturing Services CV, Geleen <b>Monsterpunt</b> : Monsternameslang in demiwater <b>Monstermatrix</b> : Oppervlaktewater <b>Monsterpuntcode</b> : <b>Reden monstereming</b> : Ad hoc aangeleverd monster. <b>Opmerking bij monsterontvangst</b> :				
<b>Organische microparameters</b>				
<u>Screening HPLC-UV</u>	17-11-2021 - 15:51			
LCAqua-181		5900	µg/l Clox	
LCAqua-181-KRetl		32.42		
LCAqua-184		180	µg/l Clox	
LCAqua-184-KRetl		45.25		
LCAqua-185		200	µg/l Clox	
LCAqua-185-KRetl		46.00		
LCAqua-186		120	µg/l Clox	
LCAqua-186-KRetl		47.75		

a) Geïdentificeerde LCAqua componenten:

- LCAqua-033  
Deze onbekende component is in 2015 geïdentificeerd als Pyrazool.
- LCAqua-571  
Deze onbekende component is in 2021 door AQZ geïdentificeerd als 2-phenylbenzimidazole sulfonzuur.

b) Identificatietraject voor 11 andere LCAqua componenten:

Gebleken is dat de LC-UV methode niet te gebruiken is voor de afvalwatermonsters van het influent en de hoofdriolen omdat de aanwezige matrix te complex is om met een UV-detector bruikbare informatie te krijgen over de afzonderlijke componenten.

De UPLC-Qtof methode is daar wel geschikt voor. Om de UPLC-Qtof methode te kunnen gebruiken zijn de basis gegevens exacte massa, de bruto formule en de brokstukken nodig van de LCAqua-componenten. Voor het verkrijgen van deze benodigde informatie is het chromatografie deel van de LC-UV methode gekoppeld aan de Qtof. In het AQZ rapport "20211512\_Sitech\_LCAquas" dd. 23 december 2021, zijn de werkwijze en de resultaten van dit onderzoek beschreven (zie bijlage E). In onderstaande tabel is samengevat het resultaat weergegeven.

LCAqua	KRetl HPLC-UV	Exacte massa [Da]	Bruto formule	Retentietijd NTS	Code NTS
447	10,61	190,08545	C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O	4,89	QTOF_20_0014
		122,04852	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O		QTOF_20_0013
		69,02133	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> NO		QTOF_SIT_21_0435
560	11,07	<i>Te lage concentraties</i>			
558	12,59	268,08811	C <sub>12</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub> S	5,97	QTOF_SIT_21_0074
539	13,40	194,10524	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	5,24	QTOF_SIT_21_0575
512	15,45	212,95372	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> BrN <sub>3</sub> O	5,40	QTOF_SIT_21_0650
471	19,60	<i>Te lage concentraties</i>			
436	40,31	250,1542	C <sub>15</sub> H <sub>22</sub> O <sub>3</sub>	11,44	QTOF_SIT_21_0576
295	42,95	278,18897	C <sub>17</sub> H <sub>26</sub> O <sub>3</sub>	12,05	QTOF_SIT_21_0006
196	18,45	218,11636	C <sub>11</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O	5,54	QTOF_SIT_21_0097
510	29,62	<i>Geen massa's gevonden, noch met positieve, noch met negatieve ionisatie</i>			
571	13,24	250,07520	C <sub>9</sub> H <sub>17</sub> NO <sub>3</sub> S	4,92	QTOF_SIT_21_0266
191	13,14	274,04096	C <sub>13</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub> S	5,88	QTOF_SIT_21_0651
					2-phenylbenzimidazolesulfonzuur

Samengevat is het resultaat:

- LCAqua-191 geïdentificeerd als 1-phenylbenzimidazolesulfonzuur
  - Voor LCAqua-560 en -471 waren de concentraties te laag voor de afleiding van betrouwbare basis gegevens.
  - Voor LCAqua-510 zijn geen massa's gevonden omdat deze component zeer massa-ongevoelig is.
  - Het identificatie traject voor de 8 LCAqua componenten wordt voortgezet met 10 QTOF-codes voor de UPLC-Qtof methode zoals gegeven in de laatste kolom van bovenstaande tabel. Hierin is de component LCAqua-447 opgesplitst in drie aan elkaar gerelateerde componenten.
- c) In 2021 zijn nog 19 andere LCAquas gemeten buiten deze lijst, maar deze niet meer 4 maal >2,2 ug/l aangetoond in het effluent van de IAZI.

#### 4.3 Oorzaak van bijzondere constatering en/of afwijkingen matig polair tot polaire stoffen 2021

De gemelde LCAqua componenten welke gemeld zijn volgens voorschrift 29 lid 3 zijn altijd al aanwezig geweest in het effluent van de IAZI.

#### 4.4 Genomen maatregelen bij bijzondere constatering en/of afwijkingen matig polair tot polaire stoffen 2021

Het identificatie plan wordt afgewerkt zoals beschreven in de meldingen uitgevoerd volgens voorschrift 29.

#### 4.5 Trendbeschrijving matig polair tot polaire stoffen 2021

De LC-UV screening van matig polair tot polaire stoffen wordt al uitgevoerd vanaf 2019. De resultaten van deze screening in deze drie jaar geeft onderstaande trend.

Naam	Kreti	2019			2020			2021		
		n	n > 2,2	gem. [µg/l]	n	n > 2,2	gem. [µg/l]	n	n > 2,2	gem. [µg/l]
LCAqua-512*	15,46	36	25	3,2	49	26	2,5	50	36	3,6
LCAqua-447*	10,41	52	52	14,2	52	49	7,3	44	34	5,5
LCAqua-539*	13,36	7	7	3,8	21	7	2,1	26	17	2,7
LCAqua-295*	43,04	44	16	2,1	46	18	2,4	48	15	2,3
LCAqua-510*	29,43	31	8	1,9	17	4	1,7	32	14	2,5
LCAqua-196*	18,47	0	0	0,0	6	3	2,9	15	10	3,7
LCAqua-571*	13,10	0	0	0,0	0	0	0,0	7	7	5,2
LCAqua-436*	40,41	42	4	1,6	45	7	1,7	39	5	1,6
LCAqua-191*	13,11	8	6	3,3	0	0	0,0	8	5	3,2
LCAqua-471*	19,70	39	16	2,2	23	6	2,0	7	3	2,1
LCAqua-530	8,63	8	7	3,2	3	0	1,7	3	2	2,7
LCAqua-560*	10,97	0	0	0,0	5	5	4,0	9	1	1,5
LCAqua-558*	12,88	0	0	0,0	13	4	2,1	14	1	1,5
LCAqua-524	13,54	9	9	3,4	0	0	0,0	0	0	0,0
LCAqua-531	16,99	5	5	3,7	0	0	0,0	0	0	0,0
LCAqua-533	27,24	5	5	4,1	0	0	0,0	0	0	0,0

\* = jaar van melding start identificatie

Het aantal onbekende LCAquas 4 of meer keren gemeten met een concentratie > 2,2 µg/l is in de drie jaren van uitvoering is afgenomen van 12 in 2019 naar 9 in 2020 en 2021. Daarbij de aantekening dat 3 van de reeds in 2020 gemelde onbekenden (LCAqua-471, -560 en -558) in 2021 duidelijk minder aangetoond zijn. Van deze drie onbekende componenten is de basis informatie dan ook nog niet beschikbaar. Daarnaast zijn er 3 nieuwe aangetoond in 2021 (LCAqua 196, -571 en -191), waarvan de component LCAqua-191 inmiddels door AQZ geïdentificeerd is.

## 5. Polaire stoffen (UPLC-Qtof)

Deze methode wordt toegepast voor de aansluiting met de methodes die gebruikt worden voor de screening van het oppervlaktewater ten behoeve van de inname voor de bereiding van drinkwater. Met de resultaten van deze methode wordt inzicht verkregen in de aanwezigheid van onbekende componenten die in het Maaswater aanwezig zijn; de zogenaamde QTOF\_20\_0xxx of QTOF\_SIT\_21\_0xxx componenten.

Conform vergunning wordt deze analyse elke week uitgevoerd op basis van een week mengmonster dat naar het laboratorium Aqua Lab Zuid (AQZ) wordt gebracht. AQZ is een waterlaboratorium dat de UPLC-Qtof methode frequent gebruikt voor de analyse van monsters oppervlaktewaters in opdracht van drinkwater bedrijven.

### 5.1 Monitoringsgegevens polaire stoffen 2021

Tabel monitoringsgegevens UPLC-Qtof methode negatieve mode

Name	Column1	RT [min]	M meas.	Opmerking	Molecular Formula	Identificatie	totaal aantal n	aantal >2,2 ug/l n	gemiddeld (µg/L)	max (µg/L)	min (µg/L)	
QTOF_SIT_21_0593	QTOF_NEG053		3,442	78,02174 Fumaronitril	C4H2N2		3	33	0	0,28	1,29	0,11
QTOF_SIT_21_0266	QTOF_NEG012		4,915	251,08239 LCAqua-571	C9H17NO5S		5	51	0	1,36	2,20	0,15

Tabel monitoringsgegevens UPLC-Qtof methode positieve mode

Name	Column1	RT [min]	M meas.	Opmerking	Molecular Formula	Identificatie niveau	totaal aantal n	aantal >2,2 ug/l n	gemiddeld (µg/L)	max (µg/L)	min (µg/L)
QTOF_SIT_21_0567	QTOF_POS0631	5,297	113,08466	caprolactam	C6H11NO	4	31	17	2,43	31,13	0,30
QTOF_SIT_21_0587	QTOF_POS0650	7,028	133,06442	1,2,4-Tricyanobutaan	C7H7N3	5	26	4	0,62	4,48	0,48
QTOF_20_0013	QTOF_POS0012	4,899	122,04856	LCAqua-447	C6H6N2O	4	51	38	8,96	28,52	0,23
QTOF_SIT_21_0132	QTOF_POS0250	4,713	168,12627		C9H16N2O	5	50	36	5,23	14,00	0,31
QTOF_20_0010	QTOF_POS0010	4,477	166,06307		C9H10O3	5	51	42	3,80	6,49	0,54
QTOF_SIT_21_0175	QTOF_POS0293	3,218	187,06658		C8H13NO2S	5	48	26	3,45	11,00	0,15
QTOF_SIT_21_0097	QTOF_POS0216	5,538	218,11636	LCAqua-196	C11H14N4O	4	47	28	3,27	11,00	0,22
QTOF_SIT_21_0243	QTOF_POS0362	4,419	135,0437		C6H5N3O	5	50	22	1,93	3,34	0,74
QTOF_SIT_21_0233	QTOF_POS0351	3,692	192,05664		C6H12N2O3S	5	42	19	1,82	6,80	0,58
QTOF_SIT_21_0194	QTOF_POS0312	5,54	150,07993		C8H1N2O	5	40	16	1,69	5,70	0,17
QTOF_SIT_21_0178	QTOF_POS0296	6,484	139,10008		C8H13NO	5	51	14	1,67	4,90	0,17
QTOF_SIT_21_0164	QTOF_POS0282	2,877	185,11648		C8H15N3O2	1	38	13	1,45	12,00	0,16
QTOF_SIT_21_0128	QTOF_POS0247	2,811	183,13718		C9H17N3O	5	45	14	1,39	4,90	0,16
QTOF_20_0014	QTOF_POS0013	4,898	190,08508	LCAqua-447	C9H1N4O	4	41	7	1,32	4,22	0,73
QTOF_SIT_21_0138	QTOF_POS0256	6,485	166,1106		C9H14N2O	5	51	10	1,32	3,20	0,27
QTOF_SIT_21_0575	QTOF_POS0639	5,249	177,0788		C11H11N2O	4	32	13	1,23	3,63	0,49
QTOF_SIT_21_0157	QTOF_POS0275	5,251	132,058		C9H8O	5	47	11	1,18	3,18	0,16
QTOF_SIT_21_0242	QTOF_POS0361	5,55	106,05354		C6H6N2	5	43	8	1,15	5,42	0,22
QTOF_SIT_21_0103	QTOF_POS0222	5,045	236,12751		C11H2O6	5	46	8	1,03	3,72	0,12
QTOF_SIT_21_0583	QTOF_POS0646	5,494	220,13196		C11H16N4O	5	37	5	0,92	4,00	0,27
QTOF_SIT_21_0047	QTOF_POS0165	4,662	222,18409		C12H22N4	5	51	6	0,92	2,89	0,12
QTOF_SIT_21_0061	QTOF_POS0179	10,57	193,14635		C12H19NO	5	51	4	0,84	5,23	0,11
QTOF_SIT_21_0333	QTOF_POS0400	6,786	229,13121		C11H19NO4	5	47	6	0,84	6,10	0,12
QTOF_20_0017	QTOF_POS0016	5,365	183,12581		C11H17NO2	5	34	6	0,83	3,74	0,20
QTOF_SIT_21_0149	QTOF_POS0267	5,269	149,08412		C9H11NO	5	22	10	0,79	3,30	0,36
QTOF_SIT_21_0581	QTOF_POS0644	3,117	221,1526		C12H19N3O	5	16	4	0,66	9,40	0,55
QTOF_SIT_21_0079	QTOF_POS0198	10,559	189,11482		C12H15NO	5	23	4	0,57	5,53	0,24
QTOF_SIT_21_0435	QTOF_POS0501	4,902	69,02136	LCAqua-447	C3H3NO	4	48	0	0,50	1,00	0,12
QTOF_SIT_21_0597	QTOF_POS0659	2,648	137,0594		C6H7N3O	5	19	4	0,45	3,92	0,19
QTOF_SIT_21_0599	QTOF_POS0661	3,11	194,11631		C9H14N4O	5	19	4	0,36	2,78	0,11
QTOF_SIT_21_0565	QTOF_POS0630	4,885	190,08508		C8H14O5	5	6	5	0,31	4,23	1,27
QTOF_SIT_21_0006	QTOF_POS0124	12,078	278,18829	LCAqua-295	C17H26O3	4	50	0	0,25	0,92	0,13
QTOF_SIT_21_0074	QTOF_POS0193	5,976	268,08861	LCAqua-558	C12H16N2O3S	5	41	0	0,23	0,96	0,11
QTOF_SIT_21_0576	QTOF_POS0640	11,435	250,15618	LCAqua-436	C15H22O3	4	14	0	0,12	0,68	0,22
QTOF_SIT_21_0086	QTOF_POS0205	2,624	228,1473	ST-ZPS-POS-005	C11H2N2O3	5	45	18	2,18	13,00	0,25

Tabel monitoringsgegevens UPLC-Qtof bibliotheek

AQZ screening UPLC-QTOF - bibliotheek									
Component	CAS nummer	Op stoffenlijst?	Effluent IAZI 2021					opmerking	
			n	n > 2,2	gem. [µg/l]	max [µg/l]	min [µg/l]		
Melamine	108-78-1	ja	51	49	8,971	31,000	1,000	norm in voorschrift 18	
Melam	0	ja	51	-	1,007	2,100	0,110	norm in voorschrift 18	
Melem	1502-47-2	ja	32	-	0,260	0,640	0,130	norm in voorschrift 18	
4- en/of 5-Methyl-1H-benzotriazole natriumzout	64665-57-2	ja	49	4	0,769	4,200	0,190	24 kg intrek KW; 23 kg lozing	
1H-benzotriazole kaliumzout	51126-65-9	ja	49	1	0,722	2,400	0,210	27 kg intrek KW; 22 kg lozing	
Triglyme	112-49-2	ja	49	-	0,294	0,990	0,039	allerteringswaarde = 5 µg/l	
Diglyme	111-96-6	ja/nee	48	-	0,248	0,940	0,062	aanvraag wijziging vergunning loopt	
Tetraglyme	143-24-8	ja/nee	49	1	0,419	3,900	0,073	aanvraag wijziging vergunning loopt	
Nicotinamide	98-92-0		1	1	16,000	16,000	16,000	eenmalig hoge waarde gemeten	
MDAI	132741-81-2		10	6	2,920	4,600	1,800	alleen in Q1 2021 gemeten.	
2- en/of 4-nitrofenol	0	0	14	1	1,661	19,000	0,038	eenmalig hoge waarde gemeten	
2,3- en/of 2,4- en/of 2,6-dinitrofenol	0	0	6	1	1,352	7,400	0,032	eenmalig hoge waarde gemeten	

Tabel monitoringsgegevens UPLC-Qtof gekalibreerde componenten

Screening UPLC-QTOF - gekalibreerde componenten									
LC-Aqua440-MS	2688-77-9	ja	44	14	1,608	3,400	0,100	allerteringswaarde = 0,8 µg/l	

Zie bijlage "F1 t/m F3. Monitoringsgegevens polaire stoffen 2021" voor uitgebreide gegevens.

## 5.2 Bijzondere constatering en/of afwijkingen polaire stoffen 2021

### Samenvatting monitoringsgegevens UPLC-Qtof screening polaire stoffen

Stofgroep	Screening	Totaal aantal componenten	bekend in vergunning	Niet in vergunning	aantal met maximale relatieve concentratie < 1 µg/l
Polair	bibliotheek en gekalibreerde screening AQZ	86	8*	78	76
Polair	AQZ UPLC-Qtof positieve mode	615	2	613	399
Polair	AQZ UPLC-Qtof negatieve mode	62	1	61	43
<b>totaal</b>		<b>763</b>	<b>11*</b>	<b>752</b>	<b>518</b>

\* twee in aanvraag

### Aantal onbekende componenten in identificatie van de UPLC-Qtof screening polaire stoffen

Stofgroep	Screening	gemeld volgens vs 29 lid 3 (4 x > 2,2 µg/l)	aantal te melden indien (4 x > 22 µg/l)	dubbel telling LC-UV en UPLC-Qtof pos	gemiddelde concentratie range [µg/l]
Polair	bibliotheek en gekalibreerde screening AQZ	0	0	0	
Polair	AQZ UPLC-Qtof positieve mode	26	0	1	0,8 - 9
Polair	AQZ UPLC-Qtof negatieve mode	1	0	1	3 - 39
<b>totaal</b>		<b>27</b>	<b>0</b>	<b>2</b>	

Het aantal onbekende componenten met een maximaal gemeten relatieve concentratie < 1 µg/l is 68% van het totale aantal.

In één jaar zijn er 27 onbekende componenten uit de screening polaire stoffen gemeld omdat deze vier of meerdere keren een concentratie is gemeten > 2,2 µg/l in het effluent van de IAZI. Bij deze melding is een plan van aanpak gegeven voor de identificatie van deze 27 componenten.

## 5.3 Oorzaak van bijzondere constatering en/of afwijkingen polaire stoffen 2021

Het doel van de polaire screening is inzicht te krijgen in het aantal en onbekende polaire componenten.

## 5.4 Genomen maatregelen bij bijzondere constatering en/of afwijkingen polaire stoffen 2021

De onbekende polaire componenten uit de polaire screening die 4 keer of meer in een relatieve concentratie > 2,2 µg/l zijn gemeten is een identificatie plan gestart wordt volgens voorschrift 29 lid 3.

#### 5.5 Trendbeschrijving polaire stoffen 2021

Er zijn enkele onbekende componenten in de polaire screening welke regelmatig in het effluent aanwezig zijn er zijn er echter ook veel die niet altijd aanwezig zijn.

#### 6. Zeer polaire stoffen (UPLC-Qtof)

Deze methode wordt toegepast als uitbreiding op de methodes die gebruikt worden voor de screening van het oppervlaktewater ten behoeve van de inname voor de bereiding van drinkwater. Met de resultaten van deze methode wordt inzicht verkregen in de aanwezigheid van onbekende zeer polaire componenten die met het effluent van de IAZI op de zijtak Ur geloosd worden; de zogenaamde ST\_ZPS\_POS\_xxx of ST\_ZPS\_NEG\_xxx componenten.

Conform vergunning wordt deze analyse elke week uitgevoerd op basis van een week mengmonster dat naar het laboratorium KWR wordt gebracht. KWR is een waterlaboratorium dat de UPLC-Orbitrap fusion methode uitvoert.

6.1 Monitoringsgegevens zeer polaire stoffen 2021

Monitoringsgegevens screening UPLC-Orbitrap fusion methode positieve mode

Polaire stoffen screening - gedetecteerde stoffen per week							RT IS (chloormequat-d9)					
Resultaten positieve mode							Area IS (chloormequat-d9)					
Identificatiecode	Stofnaam	ID Ivl	Formule	Molecuulmassa (Da)	RT (min)	rel. RT (min)	totaal aantal		gemiddeld	max	min	
							n	n				
							>2,2 µg/L	(µg/L)	(µg/L)	(µg/L)		
ST_ZPS_POS_002	Melamine	1	C3H6N6	126,0653	6,27	0,718	23	23	38,5	96,2	10,9	
ST_ZPS_POS_007	QTOF_SIT_21_0132 (AQZ)	4	C9H16N2O	168,1261	4,63	0,530	21	21	14,2	46,4	2,6	
ST_ZPS_POS_003	LCAqua-440 + QTOF_SIT_21_0577 (AQZ)	4	C12H16N2O	204,1261	4,55	0,521	21	18	9,0	26,2	1,7	
ST_ZPS_POS_032	LCAqua-447 = QTOF_20_0014	4	C9H10N4O	190,0852	3,56	0,406	14	14	5,9	23,6	3,0	
ST_ZPS_POS_010	Melem	1	C6H6N10	218,0775	5,86	0,671	20	19	4,2	10,5	1,8	
ST_ZPS_POS_004	LCAqua-447 = QTOF_20_0013 (AQZ)	4	C6H6N2O	122,0479	3,41	0,390	11	11	4,2	17,1	2,8	
ST_ZPS_POS_011	Ureidomelamine	3	C4H7N7O	169,0711	2,68	0,307	20	17	4,0	10,3	1,3	
ST_ZPS_POS_016	QTOF_SIT_21_0575	4	C10H11NO2	177,0788	2,69	0,308	16	11	3,9	13,3	0,7	
ST_ZPS_POS_040	Melam	1	C6H9N11	235,1041	7,95	0,910	16	13	2,3	6,0	1,7	
ST_ZPS_POS_018	QTOF_SIT_21_0149	4	C9H11NO	149,0840	2,69	0,308	17	13	2,3	4,4	1,4	
ST_ZPS_POS_029	Cyanomelamine	3	C4H5N7	151,0605	8,00	0,916	14	5	1,3	2,8	1,3	
ST_ZPS_POS_019	Guanylurea	1	C2H6N4O	102,0540	7,07	0,810	10	5	1,1	4,3	1,2	
ST_ZPS_POS_075	2'-Deoxyadenosine	2	C10H13N5O3	251,10159	4,97	0,566	12	3	0,9	4,1	0,8	
ST_ZPS_POS_097	Adenosine	1	C10H13N5O4	267,09667	4,612	0,52231	11	0	0,6	1,9	0,8	
ST_ZPS_POS_111	Guanine	1	C5H5N5O	151,04929	5,794	0,656172	9	1	0,4	2,3	0,5	
ST_ZPS_POS_167	Urotropine	1	C6H12N4	140,10611	11,372	1,283521	6	1	0,4	2,8	0,6	
ST_ZPS_POS_117	Cytosine	1	C4H5N3O	111,04315	6,767	0,766365	5	1	0,2	2,4	0,6	
ST_ZPS_POS_129	Choline	1	C5H13NO	103,09953	9,923	1,12213	4	0	0,2	1,7	0,9	
ST_ZPS_POS_118	Ammeline	1	C3H5N5O	127,04929	7,07	0,80068	5	0	0,2	2,2	0,5	
ST_ZPS_POS_005		4	C11H20N2O3	228,1473	10,37	1,188	18	18	10,8	25,4	2,6	
ST_ZPS_POS_006		4	C11H16N4O	220,1323	5,10	0,584	20	19	6,2	19,5	2,1	
ST_ZPS_POS_017		4	C8H12N2O2	168,0898	5,61	0,643	12	12	5,1	30,0	3,2	
ST_ZPS_POS_012		4	C11H16N4O2	236,1272	3,50	0,401	16	15	3,9	11,4	1,2	
ST_ZPS_POS_057		4	C11H13N3O2	219,1003	3,48	0,398	9	9	3,7	15,5	4,8	
ST_ZPS_POS_062		5		283,9901	4,85	0,549	14	12	3,6	10,3	1,4	
ST_ZPS_POS_026		4	C10H12N4O2	220,0954	3,64	0,412	14	13	3,3	8,7	1,9	
ST_ZPS_POS_023		5		201,9897	9,88	1,132	20	15	3,0	6,8	0,6	
ST_ZPS_POS_009		4	C12H14N2	186,1156	5,68	0,651	17	14	2,8	6,6	1,3	
ST_ZPS_POS_008		4	C12H18N2O	206,1418	2,90	0,332	18	12	2,5	7,3	0,6	
ST_ZPS_POS_050		4	C10H16N2O2	196,1210	10,33	1,182	9	7	2,5	20,5	0,5	
ST_ZPS_POS_144		4	C7H9NO3S	187,03024	3,411	0,384989	8	7	2,1	11,7	1,9	
ST_ZPS_POS_063		4	C11H18N2O2	210,1363	10,40	1,179	14	9	1,6	4,5	1,0	
ST_ZPS_POS_055		5		194,9513	10,13	1,160	7	7	1,6	10,7	2,3	
ST_ZPS_POS_033		4	C10H17NO3	199,1206	11,12	1,274	14	5	1,5	8,4	0,5	
ST_ZPS_POS_015		4	C10H15NO	165,1152	9,53	1,092	12	7	1,4	8,3	0,5	
ST_ZPS_POS_064		5		217,9672	10,19	1,165	10	4	1,3	7,8	0,6	
ST_ZPS_POS_021		4	C9H17N3O	183,1370	10,01	1,146	14	4	1,2	7,1	0,7	
ST_ZPS_POS_020		4	C10H12F2N2	198,0967	6,87	0,787	11	6	1,0	3,8	0,8	
ST_ZPS_POS_037		4	C13H18F2N2	240,1437	6,87	0,786	10	5	1,0	4,6	0,7	
ST_ZPS_POS_024		4	C5H5N5	135,0544	5,55	0,635	10	5	0,9	4,8	0,5	
ST_ZPS_POS_086		4	C7H12N2O3S	204,05674	3,412	0,38641	7	4	0,9	5,0	1,0	

Monitoringsgegevens screening UPLC-Orbitrap fusie methode negatieve mode

Polaire stoffen screening - gedetecteerde stoffen per week				RT IS (sotalol-d7)									
Resultaten negatieve mode				Area IS (PFBA-13C3)									
Identificatiecode	Stofnaam	ID lvi	Formule	Molecuulmassa (Da)	RT (min)	rel. RT (min)	totaal		gemiddeld (µg/L)	max (µg/L)	min (µg/L)		
							aantal n	aantal >2,2 µg/L n					
ST_ZPS_NEG_001	H2SO4	4	H2O4S	97,9673	9,52	1,312	23	23	931,0	1562,7	224,5		
ST_ZPS_NEG_002	Sulfaminezuur	1	H3NO3S	96,9834	2,71	0,374	23	23	273,8	550,5	77,7		
ST_ZPS_NEG_003	Adduct van sulfaminezuur	5		170,9160	2,89	0,398	5	5	3,6	20,1	11,4		
ST_ZPS_NEG_007	Adduct van sulfaminezuur	5		231,9226	2,80	0,386	4	4	1,5	10,9	6,8		
ST_ZPS_NEG_082	Ammelide	1	C3H4N4O2	128,03345	3,45	0,469	4	1	0,3	2,8	0,7		
ST_ZPS_NEG_004		4	C9H14N2O5	230,0902	3,95	0,544	18	17	6,2	11,2	1,3		
ST_ZPS_NEG_005		4	C6H10O6S	210,0197	2,84	0,390	21	21	24,2	83,0	4,1		
ST_ZPS_NEG_006		5		237,9113	2,72	0,374	7	7	2,9	13,3	7,3		
ST_ZPS_NEG_008		5		257,9868	5,16	0,711	16	15	7,4	24,6	2,1		
ST_ZPS_NEG_009		4	C9H12N2O4	212,0797	4,86	0,670	19	17	4,2	11,6	0,9		
ST_ZPS_NEG_010		4	C9H12N2O4	212,0797	4,11	0,566	7	7	1,8	10,6	2,6		
ST_ZPS_NEG_011		5		260,0023	4,86	0,669	16	16	9,0	40,7	5,0		
ST_ZPS_NEG_012		4	C9H14N2O5	230,0902	3,50	0,482	19	17	3,9	6,5	1,0		
ST_ZPS_NEG_013		5		226,0267	7,85	1,081	8	4	1,1	9,0	0,8		
ST_ZPS_NEG_014		4	C8H12O5S	220,0404	6,92	0,953	21	21	7,3	12,5	3,0		
ST_ZPS_NEG_016		4	C5H4N3O2	138,0307	7,07	0,973	14	4	1,1	7,3	0,7		
ST_ZPS_NEG_018		5		181,9286	9,62	1,325	4	4	1,2	19,4	2,3		
ST_ZPS_NEG_019		5		233,8904	9,49	1,307	5	4	2,3	21,3	2,1		
ST_ZPS_NEG_020		4	C9H12N2O4	212,0796	5,64	0,776	6	6	1,4	10,0	2,2		
ST_ZPS_NEG_021		5		237,9969	2,83	0,390	10	8	1,8	9,0	1,6		
ST_ZPS_NEG_023		4	C9H12N2O4	212,0796	5,30	0,730	5	4	0,9	7,1	1,5		
ST_ZPS_NEG_024		4	C8H14O6S	238,0510	2,98	0,411	17	14	3,1	7,3	1,2		
ST_ZPS_NEG_027		5		168,8438	10,16	1,369	10	8	1,6	5,4	0,9		
ST_ZPS_NEG_028		4	C9H11N3O3	209,0799	6,45	0,870	11	9	2,0	9,8	1,5		
ST_ZPS_NEG_036		5		233,8904	9,57	1,319	13	9	4,8	50,5	1,4		
ST_ZPS_NEG_041		5		304,0278	4,18	0,576	4	4	1,3	9,4	5,5		
ST_ZPS_NEG_042		5		260,0018	4,39	0,604	14	14	5,0	22,6	2,6		
ST_ZPS_NEG_046		5		279,9220	9,88	1,361	18	15	4,7	13,7	1,7		
ST_ZPS_NEG_058		5		257,9868	4,95	0,678	5	4	1,2	11,9	1,3		
ST_ZPS_NEG_059		4	C11H12N4O2	232,0955	4,47	0,614	14	12	3,0	13,7	1,0		
ST_ZPS_NEG_060		4	C8H10N2O5S	246,0306	2,41	0,332	10	7	3,3	35,8	1,9		
ST_ZPS_NEG_061		5		330,0437	5,52	0,744	7	6	2,7	13,6	2,2		
ST_ZPS_NEG_063		4	C3H3NO4S	148,97801	2,557	0,344609	6	6	1,4	6,9	4,4		
ST_ZPS_NEG_070		5		264,06645	4,045	0,552747	5	5	0,7	3,5	2,4		
ST_ZPS_NEG_071		4	C9H11N3O2	193,0851	2,701	0,36909	5	5	0,9	5,9	3,1		
ST_ZPS_NEG_075		4	C9H14O5S	234,05597	6,244	0,853239	13	10	1,3	3,6	0,7		
ST_ZPS_NEG_076		4	C8H10N2O5S	246,03087	2,502	0,341897	13	12	12,9	66,9	0,8		
ST_ZPS_NEG_078		5		141,96822	3,23	0,441	10	7	2,9	23,9	1,2		
ST_ZPS_NEG_080		5		178,02989	5,19	0,706	15	14	5,3	21,4	1,7		
ST_ZPS_NEG_084		5		238,05084	5,472	0,73253	8	8	3,4	18,6	5,3		
ST_ZPS_NEG_087		5		182,98372	2,705	0,364065	12	4	1,0	3,6	0,8		
ST_ZPS_NEG_088		4	C9H14O5S	171,94993	2,779	0,374024	12	8	1,5	4,8	1,3		
ST_ZPS_NEG_091		4	C9H12N2O4	212,07959	5,212	0,70148	12	6	1,4	5,9	0,9		
ST_ZPS_NEG_092		5		178,02984	4,329	0,582638	8	8	2,0	11,1	3,0		
ST_ZPS_NEG_093		5		283,99051	4,394	0,591386	12	8	1,7	5,1	0,7		
ST_ZPS_NEG_094		4	C14H10N4O4S	330,04208	5,35	0,720054	4	4	0,7	4,4	3,8		
ST_ZPS_NEG_096		5		219,0616	6,244	0,840377	12	6	1,0	3,4	0,6		
ST_ZPS_NEG_097		4	C4H6N2O4S	178,00463	2,528	0,33842	8	5	1,3	6,9	0,6		
ST_ZPS_NEG_098		4	C8H12O4S	204,04535	2,505	0,335341	8	7	1,4	5,2	1,2		
ST_ZPS_NEG_100		4	C6H11NO4S	193,04097	5,774	0,772959	8	5	1,7	10,8	1,1		
ST_ZPS_NEG_108		4	C7H11NO4S	205,04056	4,439	0,594244	7	4	1,2	9,2	0,6		
ST_ZPS_NEG_110		4	C10H11N2O3P	238,05089	6,109	0,817805	4	4	0,6	4,5	2,6		
ST_ZPS_NEG_122		5		304,02839	4,372	0,586924	4	4	4,0	29,8	17,1		
ST_ZPS_NEG_090	QTOF_20_0014	4	C9H10N4O	190,08529	3,579	0,481696	12	10	1,8	7,4	1,7		

Zie bijlage "G1 en G32 Monitoringsgegevens polaire stoffen 2021" voor uitgebreide gegevens.



## 6.2 Bijzondere constatering en/of afwijkingen zeer polaire stoffen 2021

Samenvatting monitoringsgegevens UPLC-Orbitrap screening polaire stoffen

Stofgroep	Screening	Totaal aantal componenten	bekend in vergunning	Niet in vergunning	aantal met maximale relatieve concentratie < 1 µg/l
Zeepolair	KWR UPLC-Orbitrap positieve mode	174	5	169	49
Zeepolair	KWR UPLC-Orbitrap negatieve mode	114	3	111	1
<b>totaal</b>		<b>288</b>	<b>8</b>	<b>280</b>	<b>50</b>

Aantal onbekende componenten in identificatie van de UPLC-Qtof screening polaire stoffen

Stofgroep	Screening	gemeld volgens vs 29 lid 3 (4 x > 2,2 µg/l)	dubbel telling LC-UV en UPLC-Qtof pos	gemiddelde concentratie range [µg/l]
Zeepolair	KWR UPLC-Orbitrap positieve mode	22	0	0,9 - 11
Zeepolair	KWR UPLC-Orbitrap negatieve mode	50	0	1,9 - 27
<b>totaal</b>		<b>114</b>	<b>1</b>	

Het aantal onbekende componenten met een maximaal gemeten relatieve concentratie < 1 µg/l is 18% van het totale aantal (KWR heeft alleen bij de rapportage vanaf week 41 alle gevonden onbekende zeer polaire componenten gerapporteerd).

In één jaar zijn er 114 onbekende componenten uit de screening zeer polaire stoffen gemeld omdat deze vier of meerdere keren een concentratie is gemeten > 2,2 µg/l in het effluent van de IAZI. Bij deze melding is een plan van aanpak gegeven voor de identificatie van deze 114 componenten.

## 6.3 Oorzaak van bijzondere constatering en/of afwijkingen zeer polaire stoffen 2021

Het doel van de polaire screening is inzicht te krijgen in het aantal en onbekende polaire componenten.

## 6.4 Genomen maatregelen bij bijzondere constatering en/of afwijkingen zeer polaire stoffen 2021

De onbekende polaire componenten uit de polaire screening die 4 keer of meer in een relatieve concentratie > 2,2 µg/l zijn gemeten is een identificatie plan gestart wordt volgens voorschrift 29 lid 3.

## 6.5 Trendbeschrijving zeer polaire stoffen 2021

Er zijn enkele onbekende componenten in de polaire screening welke regelmatig in het effluent aanwezig zijn er zijn er echter ook veel die niet altijd aanwezig zijn.

7. Bijlagen

- A. Monitoringsgegevens apolaire stoffen 2021
- B. Monitoringsgegevens niet vluchtige stoffen 2021
- C. Monitoringsgegevens vluchtige stoffen 2021
- D. Monitoringsgegevens matig polair tot polaire stoffen 2021
- E. AQZ rapport "20211512\_Sitech\_LCAQuas", dd. 23 december 2021
- F. 1 t/m 3 Monitoringsgegevens polaire stoffen 2021
- G. 1 en 2 Monitoringsgegevens zeer polaire stoffen 2021

### A. Monitoringsgegevens apolaire stoffen 2021

CUSTOI	SAMPLE	PRODUC	TEST_SCHEDU	SAMPLED_DAT	ANALYSES	COMPONENT	RESU	UNITS
1009	23125645	AFWA6002	AFWA6002K	25-1-2021 07:00	LCPLCL3374/1	D3 individuele piekwaarde	<10	ug/l
1009	23125645	AFWA6002	AFWA6002K	25-1-2021 07:00	LCPLCL3374/1	D3 individuele piekwaarde.	<10	ug/l
1009	23125645	AFWA6002	AFWA6002K	25-1-2021 07:00	LCPLCL3374/1	D3 somparameter t.o.v. Linuron	20	ug/L
1009	23157582	AFWA6002	AFWA6002K	26-4-2021 07:00	LCPLCL3374/1	D3 somparameter t.o.v. Linuron	23	ug/L
1009	23187374	AFWA6002	AFWA6002K	26-7-2021 07:00	LCPLCL3374/1	D3 somparameter t.o.v. Linuron	18	ug/L
1009	23205098	AFWA6002	AFWA6002K	25-10-2021 23:59	LCPLCL3374/1	D3 individuele piekwaarde	<10	ug/l
1009	23205098	AFWA6002	AFWA6002K	25-10-2021 23:59	LCPLCL3374/1	D3 somparameter t.o.v. Linuron	22	ug/L

## B. Monitoringsgegevens niet vluchtige stoffen 2021

Component	ABM stof	CAS nr.	techniek	AFWA Stroom	week 1 [µg/l]	week 15 [µg/l]	week 19 [µg/l]	week 23 [µg/l]	week 27 [µg/l]	week 31 [µg/l]	week 36 [µg/l]	week 40 [µg/l]	week 44 [µg/l]	week 49 [µg/l]	n metingen	n >2,2	Min	Max	Gemiddelde
benzylalcohol	B5 pZZS	100-51-6	PTV-GC-MS	effluent	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	10	0	<1	<1	<1
Eicosane	A3	112-95-8	PTV-GC-MS	effluent	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	10	0	<1	<1	<1
13-Docosamide, (Z)-		112-84-5	PTV-GC-MS	effluent	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	10	0	<1	<1	<1
Dibenzyltolueen	A1 pZZS	53585-53-8	PTV-GC-MS	effluent	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	10	0	<1	<1	<1
Cetene	A1 pZZS	629-73-2	PTV-GC-MS	effluent	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	2	10	0	2	2	0,2
C6 koolwaterstoffen, isoalkanen en <5% n-hexaan	Z2	64742-49-0	PTV-GC-MS	effluent	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	10	0	<1	<1	<1
Distillates (petroleum), solvent- dewaxed heavy paraffinic	Z1	64742-65-0	PTV-GC-MS	effluent	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	10	0	<5	<5	<5
Naphtha (petroleum), hydrodesulfurized heavy	Z1	64742-82-1	PTV-GC-MS	effluent	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	10	0	<5	<5	<5
2,4,6-tri-tert-butylphenol	Z1	732-26-3	PTV-GC-MS	effluent	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	10	0	<1	<1	<1
biphenyl	A1 pZZS	92-52-4	PTV-GC-MS	effluent	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	10	0	<1	<1	<1
Cholesterol		57-88-5	PTV-GC-MS	effluent	<1	<1	<1	<1	<1	1	<1	<1	<1	1	10	0	1	1	0,2
1-tetradecene		1120-36-1	PTV-GC-MS	effluent	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	10	0	<1	<1	<1
Octocrylene	Nt in stoffenlijst pZZS	6197-30-4	PTV-GC-MS	effluent	<1	2	<1	4	7	<1	<1	2	2	5	10	3	2	10	2,2
2 Ethylhexyl salicylate	Nt in stoffenlijst pZZS	118 60 5	PTV-GC-MS	effluent	<1	<1	2	<1	2	<1	<1	<1	<1	<1	10	0	2	2	0,4
Octadecane	A3	593-45-3	PTV-GC-MS	effluent	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	10	0	<1	<1	<1
Hexadecane	A4	544-76-3	PTV-GC-MS	effluent	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	10	0	<1	<1	<1
Dodecene	A1	112-41-4	PTV-GC-MS	effluent	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	2	10	0	2	2	0,2
Stigmasterol	Nt in stoffenlijst	83-48-7	PTV-GC-MS	effluent	<1	<1	<1	<1	<1	3	<1	<1	<1	<1	10	1	3	3	0,3
2-Propanol, 1-chloro-, phosphate (3:1)	B3 pZZS	13674-84-5	PTV-GC-MS	effluent	<1	<1	<1	<1	1	<1	<1	<1	<1	<1	10	0	1	1	0,1
Squalene	A4	111-02-4	PTV-GC-MS	effluent	<1	<1	<1	3	<1	<1	<1	<1	<1	3	10	2	3	3	0,6
Benzotriazole	A2 pZZS	95-14-7	PTV-GC-MS	effluent	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	10	0	<1	<1	<1
4,4-thio-bis-2-tert-butyl-5- methylfenol	A1 pZZS	96-69-5	PTV-GC-MS	effluent	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	10	0	<1	<1	<1
2,4-Di-tert-butylphenol	A1 pZZS	96-76-4	PTV-GC-MS	effluent	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	10	0	<1	<1	<1
Benzenepropanoic acid, 3,5- bis(1,1-dimethylethyl)-4- hydroxy-, octadecyl ester		2082-79-3	PTV-GC-MS	effluent	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	10	0	<1	<1	<1
n-Hexadecanoic acid		57-10-3	PTV-GC-MS	effluent	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	1	5	10	1	1	5	0,6
Octadecanoic acid		57-11-4	PTV-GC-MS	effluent	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	2	10	0	2	2	0,2
α-Tocopheryl acetate / Vitamin E acetate	Nt in stoffenlijst	58-95-7	PTV-GC-MS	effluent	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	1	10	0	1	1	0,1
4-tert-butylpyrocatechol	A1 pZZS	98-29-3	PTV-GC-MS	effluent	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	10	0	<1	<1	<1

### C. Monitoringsgegevens vluchtige stoffen 2021

Component	ABM stof	CAS nr.	techniek	AFWA Stroom	methode	week 1 [µg/l]	week 2 [µg/l]	week 3 [µg/l]	week 4 [µg/l]	week 5 [µg/l]	week 6 [µg/l]	week 7 [µg/l]	week 8 [µg/l]	week 9 [µg/l]	week 10 [µg/l]	week 11 [µg/l]	week 12 [µg/l]	week 13 [µg/l]
1,2-dichloorbenzeen	A1 pZZS	95-50-1	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
1,2-dichloroethane	Z1	107-06-2	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
1,3-dichloorbenzeen	A1 pZZS	106-46-7	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
1,3-Pentadiene	B3 pZZS	504-60-9	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
1,4-dichloorbenzeen	A1 pZZS	541-73-1	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
1-methylnaphtalene	Z1	91-57-6	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
2-butanon	B5 pZZS	78-93-3	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
2-butene	B3	107-01-7	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,2	0,38	0,99	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2
3-methyl-3-buten-1-ol	niet in SL	763-32-6	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
Di-2-ethyl-peroxycarbonaat	B2	16111-62-9	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
2-methyl-1-propeen	A3	115-11-7	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	0,9	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
2-methyl-2-propanol	B4	75-65-0	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	1	0,9	2	1	<0,5	<0,5	0,6	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	0,9
2-methylnaphtalene	Z1	91-57-6	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
4-vinylcyclohexeen	A2	100-40-3	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2
Acrylonitril	Z2	meth	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
Benzeen	Z2	71-43-2	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1
Butadien	Z2	106-99-0	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
Di-cyclopentadien DCPD	pZZS	77-73-6	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	1	<0,2
Distillates (petroleum), light distillate hydrotreating process, low-boiling	Z1	68410-97-9	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0
ETBE	niet in SL	637-92-3	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,5	0,5	2	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	0,8
Ethylbenzeen	B2	100-41-4	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2
Indene	Z1	95-13-6	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
Isoamyl alcohol	B5 pZZS	123-51-3	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
Koolstofdisulfide	B2 pZZS	75-15-0	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
methyl tertiar butyl ether	A3 pZZS	1634-04-4	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,5	<0,5	0,7	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	2	7	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5

Component	ABM stof	CAS nr.	techniek	AFWA Stroom	methode	week 14 [µg/l]	week 15 [µg/l]	week 16 [µg/l]	week 17 [µg/l]	week 18 [µg/l]	week 19 [µg/l]	week 20 [µg/l]	week 21 [µg/l]	week 22 [µg/l]	week 23 [µg/l]	week 24 [µg/l]	week 25 [µg/l]	week 26 [µg/l]
1,2-dichloorbenzeen	A1 pZZS	95-50-1	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
1,2-dichloroethane	Z1	107-06-2	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
1,3-dichloorbenzeen	A1 pZZS	106-46-7	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
1,3-Pentadiene	B3 pZZS	504-60-9	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
1,4-dichloorbenzeen	A1 pZZS	541-73-1	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
1-methylnaphtalene	Z1	91-57-6	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
2-butanon	B5 pZZS	78-93-3	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	0,6	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	0,8	0,6	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
2-butene	B3	107-01-7	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2
3-methyl-3-buten-1-ol	niet in SL	763-32-6	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	0,7	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
Di-2-ethyl- peroxidecarbonaat	B2	16111-62-9	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
2-methyl-1-proppeen	A3	115-11-7	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	1	1	<0,5	1,3	1,15	0,6	0,7	0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
2-methyl-2-propanol	B4	75-65-0	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	1	<0,5	1	2	3	1	2	3	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
2-methylnaphtalene	Z1	91-57-6	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
4-vinylcyclohexeen	A2	100-40-3	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	0,5	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2
Acrylonitril	Z2	meth	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	1	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
Benzeen	Z2	71-43-2	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1
Butadien	Z2	106-99-0	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
Di-cyclopentadien DCPD	pZZS	77-73-6	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2
Distillates (petroleum), light distillate hydrotreating process, low-boiling	Z1	68410-97-9	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0
ETBE	niet in SL	637-92-3	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	0,6	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
Ethylbenzeen	B2	100-41-4	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2
Indene	Z1	95-13-6	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
Isoamyl alcohol	B5 pZZS	123-51-3	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
Koolstofdisulfide	B2 pZZS	75-15-0	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	2	<0,5	<0,5	0,7	<0,5	<0,5
methyl tertiair butyl ether	A3 pZZS	1634-04-4	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	5	2	<0,5	15	3	4	2	6	<0,5	1	1	1	1

Component	ABM stof	CAS nr.	techniek	AFWA Stroom	methode	week 27 [µg/l]	week 28 [µg/l]	week 29 [µg/l]	week 30 [µg/l]	week 31 [µg/l]	week 32 [µg/l]	week 33 [µg/l]	week 34 [µg/l]	week 35 [µg/l]	week 36 [µg/l]	week 37 [µg/l]	week 38 [µg/l]	week 39 [µg/l]
1,2-dichloorbenzeen	A1 pZZS	95-50-1	P&T-GC-MS	effluent	GCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
1,2-dichloroethane	Z1	107-06-2	P&T-GC-MS	effluent	GCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
1,3-dichloorbenzeen	A1 pZZS	106-46-7	P&T-GC-MS	effluent	GCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
1,3-Pentadiene	B3 pZZS	504-60-9	P&T-GC-MS	effluent	GCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
1,4-dichloorbenzeen	A1 pZZS	541-73-1	P&T-GC-MS	effluent	GCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
1-methylnaphtalene	Z1	91-57-6	P&T-GC-MS	effluent	GCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
2-butanon	B5 pZZS	78-93-3	P&T-GC-MS	effluent	GCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
2-butene	B3	107-01-7	P&T-GC-MS	effluent	GCHE2042	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2
3-methyl-3-buten-1-ol	niet in SL	763-32-6	P&T-GC-MS	effluent	GCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
Di-2-ethyl- peroxidecarbonaat	B2	16111-62-9	P&T-GC-MS	effluent	GCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
2-methyl-1-propene	A3	115-11-7	P&T-GC-MS	effluent	GCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
2-methyl-2-propanol	B4	75-65-0	P&T-GC-MS	effluent	GCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
2-methylnaphtalene	Z1	91-57-6	P&T-GC-MS	effluent	GCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
4-vinylcyclohexeen	A2	100-40-3	P&T-GC-MS	effluent	GCHE2042	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2
Acrylonitril	Z2	meth	P&T-GC-MS	effluent	GCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
Benzeen	Z2	71-43-2	P&T-GC-MS	effluent	GCHE2042	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1
Butadien	Z2	106-99-0	P&T-GC-MS	effluent	GCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
Di-cyclopentadien DCPD	pZZS	77-73-6	P&T-GC-MS	effluent	GCHE2042	<0,2	0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	0,2	<0,2	<0,2	<0,2	0,3	0,5	<0,2
Distillates (petroleum), light distillate hydrotreating process, low-boiling	Z1	68410-97-9	P&T-GC-MS	effluent	GCHE2042	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0
ETBE	niet in SL	637-92-3	P&T-GC-MS	effluent	GCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
Ethylbenzeen	B2	100-41-4	P&T-GC-MS	effluent	GCHE2042	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2
Indene	Z1	95-13-6	P&T-GC-MS	effluent	GCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
Isoamyl alcohol	B5 pZZS	123-51-3	P&T-GC-MS	effluent	GCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
Koolstofdisulfide	B2 pZZS	75-15-0	P&T-GC-MS	effluent	GCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
methyl tertiair butyl ether	A3 pZZS	1634-04-4	P&T-GC-MS	effluent	GCHE2042	0,8	<0,5	2	4	0,7	1	<0,5	0,5	2	0,5	1	0,7	<0,5

Component	ABM stof	CAS nr.	techniek	AFWA Stroom	methode	week 40 [µg/l]	week 41 [µg/l]	week 42 [µg/l]	week 43 [µg/l]	week 44 [µg/l]	week 45 [µg/l]	week 46 [µg/l]	week 47 [µg/l]	week 48 [µg/l]	week 49 [µg/l]	week 50 [µg/l]	week 51 [µg/l]	week 52 [µg/l]
1,2-dichloorbenzeen	A1 pZZS	95-50-1	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
1,2-dichloroethane	Z1	107-06-2	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
1,3-dichloorbenzeen	A1 pZZS	106-46-7	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
1,3-Pentadiene	B3 pZZS	504-60-9	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
1,4-dichloorbenzeen	A1 pZZS	541-73-1	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
1-methylnaphtalene	Z1	91-57-6	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
2-butanon	B5 pZZS	78-93-3	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
2-butene	B3	107-01-7	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	0,6	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2
3-methyl-3-buten-1-ol	niet in SL	763-32-6	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	0,8	<0,5	<0,5	<0,5	0,6	<0,5
Di-2-ethyl- peroxidecarbonaat	B2	16111-62-9	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
2-methyl-1-propeen	A3	115-11-7	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	0,9	0,6	1,6	<0,5
2-methyl-2-propanol	B4	75-65-0	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	10	<0,5	2	0,5	0,5	2	<0,5	3	<0,5	<0,5	<0,5
2-methylnaphtalene	Z1	91-57-6	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
4-vinylcyclohexeen	A2	100-40-3	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2
Acrylonitril	Z2	meth	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
Benzeen	Z2	71-43-2	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	0,1
Butadien	Z2	106-99-0	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	1	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
Di-cyclopentadien DCPD	pZZS	77-73-6	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	0,6	0,2	0,3	0,3	0,3	<0,2
Distillates (petroleum), light distillate hydrotreating process, low-boiling	Z1	68410-97-9	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0
ETBE	niet in SL	637-92-3	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	2	<0,5	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0
Ethylbenzeen	B2	100-41-4	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2
Indene	Z1	95-13-6	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
Isoamyl alcohol	B5 pZZS	123-51-3	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
Koolstofdisulfide	B2 pZZS	75-15-0	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
methyl tertiair butyl ether	A3 pZZS	1634-04-4	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	0,7	<0,5	0,6	0,7	0,7	0,7	0,7	1	0,6	<0,5	0,8	1	<0,5



Component	ABM stof	CAS nr.	techniek	AFWA Stroom	methode	week 1 [µg/l]	week 2 [µg/l]	week 3 [µg/l]	week 4 [µg/l]	week 5 [µg/l]	week 6 [µg/l]	week 7 [µg/l]	week 8 [µg/l]	week 9 [µg/l]	week 10 [µg/l]	week 11 [µg/l]	week 12 [µg/l]	week 13 [µg/l]
monovinylchloride	Z2	75-01-4	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
nafta	Z2	8030-30-6	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0
naftaleen	Z2	91-20-3	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
Oxazool	B4	288-42-6	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	20	95	50	1	15	65	<0,5	50	3	0,6	0,7	0,9	30
o-xyleen	B1 pZZS	95-47-6	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
p,m-xyleen	B1 pZZS	106-42-3	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2
Tetrahydrofuraan THF	niet in SL	109-99-9	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	0,78	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
propyleenoxide	Z2	75-56-9	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	2	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
Tolueen	B2	108-88-3	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2
Vinylacetaat	B3 pZZS	108-05-4	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0

Component	ABM stof	CAS nr.	techniek	AFWA Stroom	methode	week 14 [µg/l]	week 15 [µg/l]	week 16 [µg/l]	week 17 [µg/l]	week 18 [µg/l]	week 19 [µg/l]	week 20 [µg/l]	week 21 [µg/l]	week 22 [µg/l]	week 23 [µg/l]	week 24 [µg/l]	week 25 [µg/l]	week 26 [µg/l]
monovinylchloride	Z2	75-01-4	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
nafta	Z2	8030-30-6	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0
naftaleen	Z2	91-20-3	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
Oxazool	B4	288-42-6	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	15	2	10	30	15	8	0,9	8	5	10	2	25	15
o-xyleen	B1 pZZS	95-47-6	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
p,m-xyleen	B1 pZZS	106-42-3	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2
Tetrahydrofuraan THF	niet in SL	109-99-9	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	1,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
propyleenoxide	Z2	75-56-9	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
Tolueen	B2	108-88-3	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2
Vinylacetaat	B3 pZZS	108-05-4	P&T-GC-MS	effluent	GCCHE2042	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0

Component	ABM stof	CAS nr.	techniek	AFWA Stroom	methode	week 27 [µg/l]	week 28 [µg/l]	week 29 [µg/l]	week 30 [µg/l]	week 31 [µg/l]	week 32 [µg/l]	week 33 [µg/l]	week 34 [µg/l]	week 35 [µg/l]	week 36 [µg/l]	week 37 [µg/l]	week 38 [µg/l]	week 39 [µg/l]
monovinylchloride	Z2	75-01-4	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
nafta	Z2	8030-30-6	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0
naftaleen	Z2	91-20-3	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
Oxazool	B4	288-42-6	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	20	10	7	6	3	15	3	40	5	20	3	15	4
o-xyleen	B1 pZZS	95-47-6	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
p,m-xyleen	B1 pZZS	106-42-3	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2
Tetrahydrofuraan THF	niet in SL	109-99-9	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
propyleenoxide	Z2	75-56-9	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
Tolueen	B2	108-88-3	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2
Vinylacetaat	B3 pZZS	108-05-4	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0

Component	ABM stof	CAS nr.	techniek	AFWA Stroom	methode	week 40 [µg/l]	week 41 [µg/l]	week 42 [µg/l]	week 43 [µg/l]	week 44 [µg/l]	week 45 [µg/l]	week 46 [µg/l]	week 47 [µg/l]	week 48 [µg/l]	week 49 [µg/l]	week 50 [µg/l]	week 51 [µg/l]	week 52 [µg/l]
monovinylchloride	Z2	75-01-4	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
nafta	Z2	8030-30-6	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0
naftaleen	Z2	91-20-3	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
Oxazool	B4	288-42-6	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	30	8	20	120	0,9	8	3	40	25	40	2	6	85
o-xyleen	B1 pZZS	95-47-6	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
p,m-xyleen	B1 pZZS	106-42-3	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2
Tetrahydrofuraan THF	niet in SL	109-99-9	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	0,7	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
propyleenoxide	Z2	75-56-9	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
Tolueen	B2	108-88-3	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2
Vinylacetaat	B3 pZZS	108-05-4	P&T-GC-MS	effluent	GCACHE2042	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0	<5,0

D. Monitoringsgegevens matig polair tot polaire componenten 2021.

Naam	Kret	Week 1	Week 2	Week 3	Week 4	Week 5	Week 6	Week 7	Week 8	Week 9	Week 10	Week 11	Week 12	Week 13	Week 14	Week 15	Week 16	Week 17	Week 18	Week 19	Week 20	Week 21	Week 22	Week 23	Week 24	Week 25	Week 26
		2021	ppb <sup>+</sup>	ppb <sup>+</sup>	ppb <sup>+</sup>	ppb <sup>+</sup>	ppb <sup>+</sup>	ppb <sup>+</sup>	ppb <sup>+</sup>	ppb <sup>+</sup>	ppb <sup>+</sup>	ppb <sup>+</sup>	ppb <sup>+</sup>	ppb <sup>+</sup>	ppb <sup>+</sup>	ppb <sup>+</sup>	ppb <sup>+</sup>	ppb <sup>+</sup>	ppb <sup>+</sup>	ppb <sup>+</sup>	ppb <sup>+</sup>	ppb <sup>+</sup>	ppb <sup>+</sup>	ppb <sup>+</sup>	ppb <sup>+</sup>	ppb <sup>+</sup>	ppb <sup>+</sup>
LCAqua-033	7,49									6,5																	
LCAqua-440	7,87	56	53	59	53	60	64	59	73	69	58	54	31	66	60	50	50	41		70	61	48	61	32	40	43	38
LCAqua-530	8,63											1,4	3,6				3,0										
LCAqua-448	8,93									4,4																	
LCAqua-492	10,21																										
LCAqua-447*	10,41	3,5	2,5	2,1	1,5	2,9	4,8	3,5	3,4	5,7		2,4		4,3	3	2,2			2,1	6,1	1,4	5,3		1,2	1,4	3,2	1,9
LCAqua-560*	10,97	1,7			1,5	2,2	1,4				1,1	1,5	1,2				1,3										
LCAqua-558*	12,88	2,1	1,3	1,5	1,6	2,2	1,2			1,1	2,8		1,3	1,4	1,3	1,1	1,2	1									
LCAqua-571*	13,10																										
LCAqua-191*	13,11																2,2						4,4		2,3	2,1	
LCAqua-539*	13,36	2,1	1,4	2,5	2,4	2,4	2,5	3,2	4,5	2,9	1,1			2,9	1,5	2,0	1,8	4,4	3,7	3,5	3,3	2,8	1,9				
LCAqua-572	13,43																										
LCAqua-524	13,54																										
LCAqua-476	13,83																										
LCAqua-543	14,98					2,5																					
LCAqua-512*	15,46	3,0	2,9	1,6	1,2	1,5	1,5		3,4	3,7	2,3	2,0	2,2	3,3	2,2	2,6	2,1	2,2	2,5	4,6	4,2	3,0	3,3	4,7	2,0	2,0	4,0
LCAqua-570	16,45																										
LCAqua-580	16,55																										
LCAqua-525	16,77																										
LCAqua-531	16,99																										
LCAqua-368	17,20																										
LCAqua-538	17,27																										
LCAqua-542	17,31																										
LCAqua-526	17,81 (17,76)																			1,5		1,1	2				
LCAqua-144	18,22																										
LCAqua-527	18,26																										
LCAqua-196*	18,47								2,8	6,2	5,3	3,7	2,1	1,6	1,5	1,8		5,3	4,0	5,0	1,4						
LCAqua-411	19,62																										
LCAqua-471*	19,70									1,1					2,1	2,5	2,3	2,0	2,0	2,8							
LCAqua-172	20,16													3,5	3,9			1,9		2,1	2,1	1,8		1,6	1,5		
LCAqua-528	20,74																										
LCAqua-537	23,62																										
LCAqua-013	24,15																										
LCAqua-515	27,10																										
LCAqua-533	27,24																										
LCAqua-550	27,85																										
LCAqua-483	27,78																										
LCAqua-529	27,86	1,6	1,8																		1,3						
LCAqua-551	28,61																										
LCAqua-510*	29,43			1,1		2,9	1,4	1,1		1,6			1,3	2,3	2,7	2,1		2,9	1,4	2,0	1,6	1,5				1,6	
LCAqua-563	31,01				4,1											2,2	1,1										
LCAqua-048	32,55																										
LCAqua-181	32,56																		4,2								
LCAqua-564	33,29				1,8																						
LCAqua-132	33,47				2,8																						
LCAqua-534	34,12																										
LCAqua-294	39,29																										
LCAqua-509	39,45																										
LCAqua-436*	40,41	1,2	1,2	1,1	5	1,6	1,0		1,5	1,1		1,0			1,2	1,6	1,8			1,6	1,0		1,5	1,4	1,4	1,1	
LCAqua-399	42,69																										
LCAqua-460	42,93																			1,2							
LCAqua-295*	43,04	1,6	2,3	3,1	20	2,0	1,7		2,3	2,5	1,9	2,1	1,8	1,7	1,8	2,1		1,6		2,4	2,8	2,4	1,6	1,2	1,4	1,3	2,3
LCAqua-429	44,27																										
LCAqua-184	45,25																										
LCAqua-185	46,04																										
LCAqua-186	47,72																										
LCAqua-488	47,80																										
LCAqua-489	49,04																										
som		73	66	72	95	80	80	66	92	147	70	67	46	81	81	73	67	66	18	108	79	66	71	46	50	53	47

Naam	Kretl	Week 27	Week 28	Week 29	Week 30	Week 31	Week 32	Week 33	Week 34	Week 35	Week 36	Week 37	Week 38	Week 39	Week 40	Week 41	Week 42	Week 43	Week 44	Week 45	Week 46	Week 47	Week 48	Week 49	Week 50	Week 51	Week 52	
		ppb <sup>1</sup>	ppb <sup>1</sup>	ppb <sup>1</sup>	ppb <sup>1</sup>	ppb <sup>1</sup>	ppb <sup>1</sup>	ppb <sup>1</sup>	ppb <sup>1</sup>	ppb <sup>1</sup>	ppb <sup>1</sup>	ppb <sup>1</sup>	ppb <sup>1</sup>	ppb <sup>1</sup>	ppb <sup>1</sup>	ppb <sup>1</sup>	ppb <sup>1</sup>	ppb <sup>1</sup>	ppb <sup>1</sup>	ppb <sup>1</sup>	ppb <sup>1</sup>	ppb <sup>1</sup>	ppb <sup>1</sup>	ppb <sup>1</sup>	ppb <sup>1</sup>	ppb <sup>1</sup>	ppb <sup>1</sup>	
LCAqua-033	7,49																											
LCAqua-440	7,87	48	68	64	103	9,9	24	56	66	60	44	70	47	71		41	75	69	40	102	100	63	65	99	97	18	60	
LCAqua-530	8,63																											
LCAqua-448	8,93																											
LCAqua-492	10,21																											
LCAqua-447*	10,41	2,3		2,2	2,2	7,5	3,7	6,7	9	13	14	11	12	11	14	13		4,9		2,5	8,7	5,0	6,0	12	4,9	5,4	6,8	
LCAqua-560*	10,97																1,8											
LCAqua-558*	12,88																											
LCAqua-571*	13,10												5,3	7,0	5,3	5,8		4,6			5,2					3,1		
LCAqua-191*	13,11	3,3	2,2			3,9						4,9																
LCAqua-539*	13,36	2,2								1,3											4,3							
LCAqua-572	13,43												3,7	4,9						2,9								
LCAqua-524	13,54																											
LCAqua-476	13,83										1,7	3,2	1,8							1,3	1,8							
LCAqua-543	14,98																											
LCAqua-512*	15,46	5,9	4,7	2,4	1,8	2,7	1,1	2,8		5,5	4,6	3,4	4,7	8,9	9,7	6,3	6,0	5,3	6,6	6,9	6,4	3,9	4,3	3,6	3,2	1,3	2,3	
LCAqua-570	16,45										2,4																	
LCAqua-580	16,55									1,4																		
LCAqua-525	16,77																											
LCAqua-531	16,99																											
LCAqua-368	17,20																											
LCAqua-538	17,27																	2,8										
LCAqua-542	17,31																											
LCAqua-526	17,81 (17,76)							1,3	1,7	2,7		1,4		1,2		1,0	2,0		1,3	1,6	2,1		1,9	1,5	1,6			
LCAqua-144	18,22																											
LCAqua-527	18,26																											
LCAqua-196*	18,47							4	4,4	5,9																		
LCAqua-411	19,62																											
LCAqua-471*	19,70																											
LCAqua-172	20,18																											
LCAqua-528	20,74																											
LCAqua-537	23,62																											
LCAqua-013	24,15																											
LCAqua-615	27,10							1,7							3,6													
LCAqua-533	27,24																											
LCAqua-990	27,69																											
LCAqua-483	27,78	4,4	3,2																									
LCAqua-529	27,88																											
LCAqua-551	28,61																											
LCAqua-510*	29,43	3,4				4,7	1,6	1,7	1,8	2,5	6,9	2,7	4,2	1,3	1,9		2,9	3,0	2,2				6,5	4,9	1,3			
LCAqua-563	31,01																											
LCAqua-048	32,55																											
LCAqua-181	32,56														153	72	40	25	21	21	16	10	8,4	7,7	4,5	2,9		
LCAqua-564	33,29																											
LCAqua-132	33,47																											
LCAqua-534	34,12																											
LCAqua-294	39,29																											
LCAqua-509	39,45	1,1										6,2																
LCAqua-436*	40,41	1,7		1,7		1,4		1,4	1,2	1,0	2,5	1,9	1,1	1,7	2,3	1,4	1,1	1,9	2,7	2,5	2,1	1,8	2,0	1,8	1,7			
LCAqua-399	42,69					2,5																						
LCAqua-480	42,93																											
LCAqua-295*	43,04	1,3	1,6	2,5	1	1,2	1,5	3	2,2	2,1	3,0		1,3	2,5	3,4	1,8	1,7	2,1	3,0	2,0	1,2	1,5	1,2	1,2	1,7	1,8	1,7	
LCAqua-429	44,27																											
LCAqua-184	45,25															3,3	1,6											
LCAqua-185	46,04															2,7	1,3											
LCAqua-186	47,72															3,6	1,9	1,2										
LCAqua-488	47,80																											
LCAqua-489	49,04																											
<b>som</b>		74	80	73	108	29	35	79	68	96	72	109	80	112	43	238	168	135	86	152	142	91	90	134	123	35	74	

E. AQZ rapport "20211512\_Sitech\_LCAQuas", dd. 23 december 2021.

Aan 5.1.2e 5.1.2e Datum 23-12-2021

## Rapportage

Van 5.1.2e 5.1.2e

### Rapportage bepaling exacte massa en bruto formule voor onbekenden uit HPLC-UV screening Introductie

In het kader van de lozingsvergunning voert AQZ al een aantal jaar de HPLC-UV screening uit op het effluent van IAZI Sitech Services. In de vergunning is de regel opgenomen dat wanneer een onbekende stof vier maal (hoeft niet opeenvolgend) met een relatieve concentratie van meer dan 2,2 µg/l wordt aangetroffen, er nader onderzoek uitgevoerd moet worden om te komen tot identificatie en informatie over de herkomst, eigenschappen en uiteindelijk normering. In het kader van dit vergunningsonderdeel zijn acht onbekende stoffen geselecteerd die voldoen aan dit criterium. AQZ is gevraagd te bepalen wat de exacte massa en bruto formule zijn. Het doel is dus om te komen tot identificatieniveau 4, zie tabel 1.

Detectie met UV geeft weinig tot geen mogelijkheden om stoffen te identificeren. Detectie met hoge resolutie massa spectrometrie (HR-MS) geeft wel mogelijkheden, de exacte massa leidt in veel gevallen tot een brutoformule en fragmentatie geeft meer inzicht in de opbouw van de component. In het kader van dit project zijn fracties opgevangen van de HPLC-UV, die zijn geanalyseerd met de UPLC-QTOF. Uiteindelijk is ook een directe koppeling van de HPLC-UV met de QTOF massaspectrometer gerealiseerd. In dit rapport worden de resultaten beschreven voor vijf van de acht aangevraagde LCAqua-onbekenden.

**Tabel 1.** Niveaus voor identificatie m.b.v. HRMS

Niveau Subniveau	Identificatie betrouwbaarheid	Accurate massa	RT (RTI)	MS2 data	MS2 referentie- spectrum	MS2 in silico
1	Bevestigde structuur	✓	✓	✓	✓	?
2 / a	Eenduidige structuur	✓	✓	✓	✓	?
2 / b	Waarschijnlijke structuur	✓	✓	✓	✗	?
3	Voorlopige structuren	✓	?	✗	✗	✓
4	Eenduidige brutoformule	✓	✗	✗	✗	✗

5	Interessante feature	✓	x	x	x	x
Legenda:	x	Is niet beschikbaar	?	Kan beschikbaar zijn	✓	Moet beschikbaar zijn

## Werkwijze

Wekelijks wordt een IAZI effluent sample geanalyseerd m.b.v. de HPLC-UV screeningsmethode. De relatieve concentraties van de LCAqua-onbekenden zijn hiermee bepaald. Wanneer een van de onbekenden die geïdentificeerd dient te worden, in relatief hoge concentratie aanwezig is in een weekmonster, kan dit monster geselecteerd worden om te meten m.b.v. HPLC-UV-QTOF. Hierbij wordt de uitlaat van de HPLC-UV aangesloten op de QTOF. Met een (vaste) vertraging van zo'n 1,5 minuut worden alle UV-pieken ook gemeten met de massaspectrometer. Dit levert een lijstje met features op die voorkomen in het specifieke retentietijdgebied. Gemiddeld worden er zo'n 10 features gevonden die in aanmerking komen om de UV-piek te veroorzaken. Met behulp van trendanalyses kunnen de meeste van deze features uitgesloten worden. Het kan zijn dat er meerdere massa's verantwoordelijk zijn voor de UV-piek; de pieken zijn breed en er is vaker sprake van mengsels. Ook kan het zijn dat een component wel UV-actief is, maar niet ioniseert in de massaspectrometer waardoor hij geen MS-sigitaal geeft.

In december zijn er vier effluent weeksamples gemeten met HPLC-UV-QTOF, namelijk de samples van de weken 37, 39, 40 en 45. De vier samples zijn allen gemeten m.b.v. positieve ionisatie; daarnaast is week 45 ook gemeten m.b.v. negatieve ionisatie. Hierbij lag de focus op LCAqua-510, 512 en 571. Ook is gekeken naar LCAqua-181, waarvan het vermoeden bestaat dat dit uit slangmateriaal afkomstig is. Deze componenten zullen onder de paragraaf Resultaten apart besproken worden. Ook wordt aandacht besteed aan LCAqua-191; hiervoor was al eerder werk gedaan om deze component te identificeren.

Tot slot is er met behulp van trendanalyses van de wekelijkse non-target screening (2021) en de mierenzuurmethode (tot maart 2021), die elke maand wordt gemeten, bevestigd dat het om de juiste m/z waarden ging. De exacte massa is ook teruggezocht in de data van de uitgevoerde non-targetscreening (NTS), om ook met deze data trendanalyses te kunnen uitvoeren.

De exacte massa is gebruikt om de brutoformule te berekenen, met hulp van het fragmentatiespectrum. Hierdoor zijn alle brutoformules met hoge waarschijnlijkheid vastgesteld. De reeds bestaande code vanuit de NTS is vanaf nu gekoppeld aan de LCAqua-code, of er is een nieuwe QTOF-code aangemaakt.

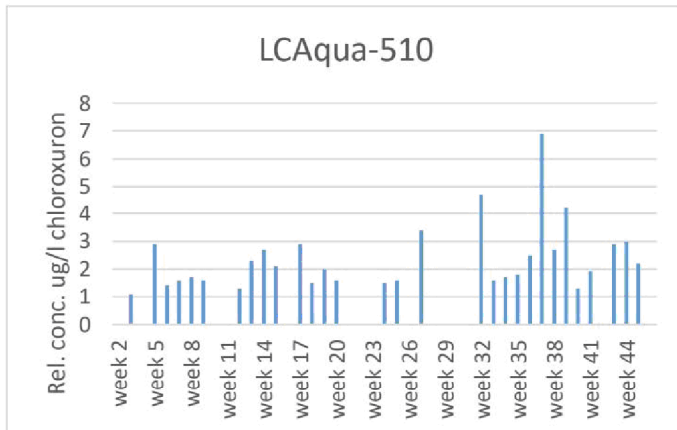
## Resultaten

In tabel 2 is een overzicht weergegeven van de verkregen resultaten. De LCAqua-componenten zijn gerangschikt op retentietijd op de HPLC. De exacte massa, die past bij de retentietijd en de trends van de relatieve concentraties van de afgelopen weken, is weergegeven. Tevens zijn de brutoformule, de retentietijd en de code in de NTS in de tabel opgenomen. Hierna worden de vijf tot op identificatielevel 4 geïdentificeerde LCAqua-componenten één voor één besproken.

**Tabel 2.** Overzicht resultaten voor de LCAqua-componenten.

LCAqua	KRetI HPLC-UV	Exacte massa [Da]	Bruto formule	Retentietijd NTS	Code NTS
<b>447</b>	10,61	190,08545 122,04852 69,02133	C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> NO	4,89	QTOF_20_0014 QTOF_20_0013 QTOF_SIT_21_0435
<b>560</b>	11,07	<i>Te lage concentraties</i>			
<b>558</b>	12,59	268,08811	C <sub>12</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub> S	5,97	QTOF_SIT_21_0074
<b>539</b>	13,40	194,10524	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	5,24	QTOF_SIT_21_0575
<b>512</b>	15,45	212,95372	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> BrN <sub>3</sub> O	5,40	QTOF_SIT_21_0650
<b>471</b>	19,60	<i>Te lage concentraties</i>			
<b>436</b>	40,31	250,1542	C <sub>15</sub> H <sub>22</sub> O <sub>3</sub>	11,44	QTOF_SIT_21_0576
<b>295</b>	42,95	278,18897	C <sub>17</sub> H <sub>26</sub> O <sub>3</sub>	12,05	QTOF_SIT_21_0006
<b>196</b>	18,45	218,11636	C <sub>11</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O	5,54	QTOF_SIT_21_0097
<b>510</b>	29,62	<i>Geen massa's gevonden, noch met positieve, noch met negatieve ionisatie</i>			
<b>571</b>	13,24	250,07520	C <sub>9</sub> H <sub>17</sub> NO <sub>3</sub> S	4,92	QTOF_SIT_21_0266
<b>191</b>	13,14	274,04096	C <sub>13</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub> S	5,88	QTOF_SIT_21_0651 2-phenylbenzimidazolesulfonzuur

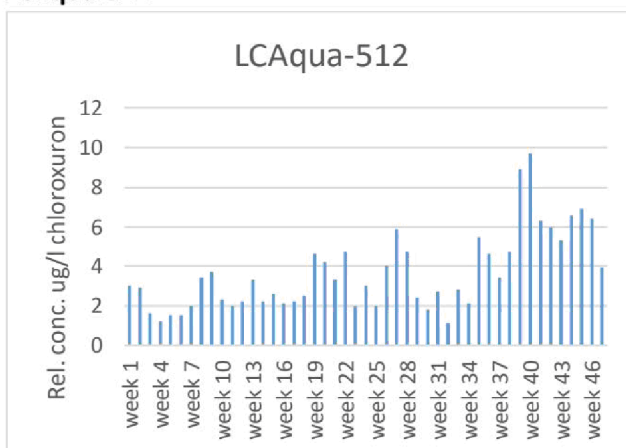
### LCAqua-510



Zoals te zien is in bovenstaand diagram, was de relatieve concentratie van LCAqua-510 sterk verhoogd in week 37. In iets mindere mate ook in week 32 en 39. Zowel het weeksample van week 37 als die van week 39 zijn gemeten met HPLC-UV-QTOF. Er is geen enkele massa gevonden die voldoet aan de verwachtingen wat betreft de trend bij de HPLC-UV. In het betreffende gebied zijn helemaal geen massa's gevonden die een significante piek opleveren, omgerekend naar een relatieve concentratie blijven alle pieken  $<0,05 \mu\text{g/l}$  chloroxuron. Ook met negatieve ionisatie, alleen toegepast voor week 45, is geen enkel relevant MS-siginaal gevonden.

Hieruit kan de conclusie getrokken worden dat de component die de UV-piek veroorzaakt in de HPLC-UV screening zeer massa-ongevoelig is. Het zou bijvoorbeeld kunnen gaan om een volledig aromatische verbinding zonder heteroatomen. Deze kunnen een zeer sterk UV-siginaal geven, maar niet ioniseren.

### LCAqua-512



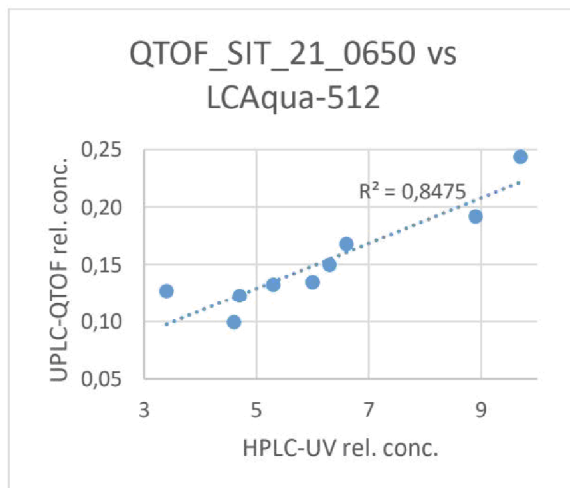
LCAqua-512 is, zoals te zien is in bovenstaand diagram, altijd aanwezig in het effluent. Wel zijn de relatieve concentraties in de laatste weken significant hoger dan in de eerste helft van het jaar. Met name de weekmonsters van de weken 39 en 40 boden perspectief om de bijbehorende massa te kunnen bepalen.

In dit gebied werden een heel aantal massa's aangetroffen, maar van geen ervan kwam de trend overeen met de concentraties van de HPLC-UV screening. De meest waarschijnlijke massa heeft een lage intensiteit,



maar de trend tussen HPLC-UV en non-target screening komt goed overeen. Het gaat om een broomhoudende component, dit is direct zichtbaar in het massaspectrum dus hierover is geen twijfel. Waarschijnlijk betreft het een heterocyclische aromaat, dit zou kunnen verklaren waarom de component zo weinig massa-gevoelig is.

De massa 212,95372 heeft de code QTOF\_SIT\_21\_0650 gekregen en zal voortaan worden meegenomen in de NTS-rapportages. De brutoformule is vastgesteld als  $C_6H_4BrN_3O$ .



### LCAqua-571

LCAqua-571 wordt pas sinds de laatste paar weken aangetroffen in het effluent. De hoogste relatieve concentratie was in week 39  $7 \mu\text{g/l}$  chloroxuron. Dit zou voldoende moeten zijn om een bijbehorende massa te kunnen bepalen m.b.v. HPLC-UV-QTOF. Complicerende factor hierbij is wel dat de UV-piek geen zuivere piek is; het is zeker dat dit een mengsel van stoffen betreft.

Met positieve ionisatie is een mogelijke massa gevonden, namelijk 141,0659 Da. Deze massa is echter helemaal niet teruggevonden in de non-target screening. De trend in de vier gemeten samples met de koppeling klopt ook niet tussen UV en QTOF. Deze mogelijkheid valt daarom af.

Met negatieve ionisatie is een mogelijke massa gevonden, namelijk 250,0749. Deze massa is wel bekend vanuit de NTS, deze heeft de code QTOF\_SIT\_21\_266. De bruto formule die bij deze massa hoort is  $C_9H_{17}NO_5S$ . De relatieve concentratie is steeds rond  $1 - 1,5 \mu\text{g/l}$  atrazine-d5. Er is geen enkele trend te ontdekken tussen de UV-metingen en de NTS data. Om deze reden is het lastig om met zekerheid te zeggen dat de massa 250,0749 tenminste een deel van de UV-piek van LCAqua-571 verklaard.

### LCAqua-191

LCAqua-191 is geïdentificeerd als 2-phenylbenzimidazole sulfonzuur (ensulizole) en bevestigd tot identificatieniveau 1 m.b.v. een standaard. Dit is een wateroplosbaar bestanddeel van zonnebrandcrème en absorbeert als zodanig sterk UV-licht. Het is daarom niet verbazingwekkend dat deze component een sterk

signaal geeft in de HPLC-UV screening. Het MS-signaal is veel lager. De massa 274,041214 Da die hoort bij  $C_{13}H_{10}N_2O_3S$  is in de non-target screening teruggevonden bij een retentietijd van 5,877 min als 274,04096 Da. Een zeer grove schatting, op basis van een meting met een standaard van 10  $\mu\text{g/l}$ , is dat in het sample van 18 augustus 10  $\mu\text{g/l}$  2-phenylbenzimidazole sulfonzuur aanwezig was. De relatieve concentratie van het signaal in de NTS was toen 0,06  $\mu\text{g/l}$  atrazine-d5. Begin september was de concentratie in het effluent gehalveerd, vanaf oktober is de component niet meer aangetroffen. Overigens ook niet meer m.b.v. LCUV-screening.

## Discussie & conclusie

Voor LCAqua-512 is het gelukt om de bijbehorende exacte massa en brutoformule te vinden omdat de relatieve concentratie sterk verhoogd was in de afgelopen weken. De concentraties met HPLC-UV en QTOF correleren goed met elkaar. Dat het niet eerder gelukt is om de exacte massa te vinden, komt door de zeer lage massa-gevoeligheid van de component. De hoogst gemeten relatieve concentratie m.b.v. UPLC-QTOF is 0,24  $\mu\text{g/l}$  atrazine-d5, tegenover een concentratie van 9,7  $\mu\text{g/l}$  chloroxuron m.b.v. HPLC-UV.

Voor LCAqua-510 en 571 was het niet eenvoudig tot onmogelijk om de exacte massa te achterhalen. LCAqua-510 is niet teruggevonden in de massaspectrometer, zowel niet met positieve als met negatieve ionisatie. Dit terwijl de concentraties ook voor deze component sterk verhoogd waren in de gemeten samples. Het zal slechts zinvol zijn om opnieuw te kijken naar deze component wanneer de relatieve concentratie  $>20 \mu\text{g/l}$  is m.b.v. HPLC-UV.

LCAqua-571 gaf geen duidelijk resultaat. Het is mogelijk dat massa 250,0749 onderdeel is van het mengsel van de UV-piek, maar dit is niet zeker. De component (het mengsel) is alleen nog maar dit najaar aangetroffen in het effluent, mogelijk ontstaan er nog meer mogelijkheden om deze UV-piek nader te bestuderen.

Van LCAqua-191 is vastgesteld dat dit 2-phenylbenzimidazole sulfonzuur betreft, ofwel ensulizole. Dit is een bestanddeel van zonnebrandcrème, wat correspondeert met de observatie dat de betreffende component met name in de zomermaanden wordt aangetroffen. Ook deze component is zeer massa-ongevoelig. De hoogst gemeten relatieve concentratie m.b.v. UPLC-QTOF is 0,06  $\mu\text{g/l}$  atrazine-d5, tegenover een concentratie van 3,9  $\mu\text{g/l}$  chloroxuron m.b.v. HPLC-UV. De werkelijke concentratie zal destijds (half augustus) mogelijk rond 10  $\mu\text{g/l}$  hebben gelegen.

Inmiddels zijn voor 8 van de 12 gevraagde LCAqua-componenten duidelijke exacte massa's vastgesteld. Voor 2 componenten is de relatieve concentratie in heel 2021 laag geweest (LCAqua-471 en 560). Voor LCAqua-510 bestaat er twijfel of deze component mogelijk helemaal niet ioniseert in de massaspectrometer, in ieder geval niet in de omstandigheden zoals momenteel gebruikt worden (ESI). Voor LCAqua-571 is mogelijk meer onderzoek nuttig; wel moet daarbij aan de HPLC-UV kant goed in de gaten gehouden worden of de samenstelling van de piek gelijk blijft.

Een score van 2/3 van de gevraagde componenten is zeker niet slecht; dit onderzoek heeft goed duidelijk gemaakt dat veel van de met HPLC-UV gevonden pieken veel hogere UV-absorptie vertonen dan dat ze massagevoelig zijn. Andersom blijkt uit de NTS-data dat er ook veel onbekende componenten zijn met hoge massagevoeligheid die niet leiden tot hoge specifieke UV-signalen.







F2 Monitoringsgegevens UPLC-Qtof screening polaire componenten positieve mode 2021

Table with columns for Sample, Comp, Ret Time, and various numerical values for 48 different runs.

















