

Waterschap Limburg

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

Datum	23.02.2023	Behandeld door	5.1.2e
Kenmerk	2023_WTW_IAZI0023	E-mailadres	5.1.2e@sitech.nl
Onderwerp	Rapportage 2022 voorschrift 27	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 27, lid 5 en 6, van de Watervergunning dient Jaarlijks binnen 8 weken na het verstrijken van het 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 jaar 2022.

Hopende u voldoende te hebben geïnformeerd.

Sitech Services,

5.1.2e

5.1.2e

Bijlage: Rapportage 2022 voorschrift 27

MEMO

Datum 23.02.2023
 Kenmerk IAZ-006360
 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 screenings 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 screenings 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-difluorbifenyyl 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 2022

Monster	Monstername datum	COMPONENT	RESULT UNITS
Effluent A6002	23-1-2022	D3 individuele piekwaarde	<10 ug/l
Effluent A6002	24-4-2022	D3 individuele piekwaarde	<10 ug/l
Effluent A6002	25-7-2022	D3 individuele piekwaarde	<10 ug/l
Effluent A6002	24-10-2022	D3 individuele piekwaarde	<10 ug/l
Effluent A6002	23-1-2022	D3 somparameter t.o.v. Linuron	11 ug/l
Effluent A6002	24-4-2022	D3 somparameter t.o.v. Linuron	14 ug/l
Effluent A6002	25-7-2022	D3 somparameter t.o.v. Linuron	27 ug/l
Effluent A6002	24-10-2022	D3 somparameter t.o.v. Linuron	<10 ug/l

1.2 Bijzondere constatering en/of afwijkingen apolaire stoffen 2022

N.v.t.

1.3 Oorzaak van bijzondere constatering en/of afwijkingen apolaire stoffen 2022

Alle waardes liggen in het verlengde van voorgaande jaren.

1.4 Genomen maatregelen bij bijzondere constatering en/of afwijkingen apolaire stoffen 2022

N.v.t.

1.5 Trendbeschrijving apolaire stoffen 2022

De resultaten van de D3 somparameter van afgelopen jaren 2016 tem 2022 heeft een maximum van 92 µg/l en een minimum van 10 µg/l. Voor 2022 liggen de resultaten stabiel aan de lage kant van voorgaande range, met een maximum van 27 µg/l en een minimum van 11 µg/l.

2. Niet vluchtige stoffen (GC-MS)

De GC-MS screening niet-vluchtig wordt ca. 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 2022

Component	ABM stof	CAS nr.	n metingen	n >2,2	Min	Max	Gemiddelde
benzylalcohol	B5 pZZS	100-51-6	10	0	<1	<1	<1
Eicosane	A3	112-95-8	10	0	<1	<1	<1
13-Docosamide, (Z)-		112-84-5	10	0	<1	<1	<1
Dibenzyltolueen	A1 pZZS	53585-53-8	10	0	<1	<1	<1
Cetene	A1 pZZS	629-73-2	10	0	<1	<1	<1
C6 koolwaterstoffen, isoalkanen en <5% n-hexaan	Z2	64742-49-0	10	0	<1	<1	<1
Distillates (petroleum), solvent-dewaxed heavy paraffinic	Z1	64742-65-0	10	0	<5	<5	<5
Naphtha (petroleum), hydrodesulfurized heavy	Z1	64742-82-1	10	0	<5	<5	<5
2,4,6-tri-tert-butylphenol	Z1	732-26-3	10	0	<1	<1	<1
biphenyl	A1 pZZS	92-52-4	10	0	<1	<1	<1
Cholesterol		57-88-5	10	0	<1	<1	<1
Octocrylene	Nt in stoffenlijst	6197-30-4	10	1	<1	3	0,6
Octadecane	A3	593-45-3	10	0	<1	<1	<1
Hexadecane	A4	544-76-3	10	0	<1	<1	<1
Dodecene	A1	112-41-4	10	0	<1	<1	<1
2-Propanol, 1-chloro-, phosphate (3:1)	B3 pZZS	13674-84-5	10	0	<1	<1	<1
Squalene	A4	111-02-4	10	0	<1	<1	<1
Benzotriazole	A2 pZZS	95-14-7	10	0	<1	<1	<1
4,4-thio-bis-2-tert-butyl-5-methylfenol	A1 pZZS	96-69-5	10	0	<1	<1	<1
2,4-Di-tert-butylphenol	A1 pZZS	96-76-4	10	0	<1	<1	<1
Benzenepropanoic acid, 3,5-bis(1,1-dimethylethyl)-4-hydroxy-, octadecyl ester		2082-79-3	10	0	<1	<1	<1
n-Hexadecanoic acid		57-10-3	10	0	<1	<1	<1
Octadecanoic acid		57-11-4	10	0	<1	<1	<1
4-tert-butylpyrocatechol	A1 pZZS	98-29-3	10	0	<1	<1	<1

Zie bijlage "B. Monitoringsgegevens niet vluchtige stoffen 2022" voor uitgebreide gegevens.

2.2 Bijzondere constatering en/of afwijkingen niet vluchtige stoffen 2022

Er is 1 stof een onbekende, nog niet in vergunning opgenomen, teruggevonden uit de niet vluchtige screening. Deze wordt hieronder kort beschreven. Zie bijlage B voor uitgebreide meetgegevens.

Deze onbekende stof wordt reeds meegenomen in wijzigingsvergunning stamkaarten, ter legalisatie.

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>

2.3 Oorzaak van bijzondere constatering en/of afwijkingen niet vluchtige stoffen 2022

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 2022

De stof wordt meegenomen in wijzigingsaanvraag "stamkaarten 2021" ter opnemen bijlage 4 vergunning.

2.5 Trendbeschrijving niet vluchtige stoffen 2022

Gelijkaardige trend van 2022 t.o.v. voorgaande jaren met variatie tussen 10 en 35 µg/l totale niet vluchtige componenten. Dit is gemiddeld lager dan 2021. 3 van de 4 stoffen die vorig jaar als onbekende naar voor kwamen uit de screening zijn dit jaar niet meer opgemerkt.

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 2022

In onderstaande tabel zijn enkel de stoffen opgenomen die minimaal één maal boven detectiegrens zijn waargenomen. Zie bijlage "C. Monitoringsgegevens vluchtige stoffen 2022" voor uitgebreide gegevens.

	ABM stof	CAS nr.	Min	Max	Gemiddeld
3-methyl-3-buten-1-ol	niet in SL	763-32-6	<0,5	1	0,053
Di-2-ethyl-peroxidecarbonaat analyse op onledingsproduct 2-ethylhexanol (104-76-7)	B2	16111-62-9	<0,5	5	0,106
2-methyl-1-proppeen	A3	115-11-7	<0,5	3	0,24
2-methyl-2-propanol	B4	75-65-0	<0,5	1	0,029
Di-cyclopentadien DCPD	pZS	77-73-6	<0,2	1	0,20
ETBE	niet in SL	637-92-3	<0,5	2	0,23
Koolstofdioxide	B2 pZS	75-15-0	<0,5	1	0,029
methyl tertiair butyl ether	A3 pZS	1634-04-4	<0,5	10	1,20
Oxazool	B4	288-42-6	<0,5	200	25,3
Tetrahydrofuraan THF	niet in SL	109-99-9	<0,5	2,2	0,097
Tolueen	B2	108-88-3	<0,2	0,3	0,0095

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

3.2 Bijzondere constatering en/of afwijkingen vluchtige stoffen 2022

Er zijn 3 onbekende 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 2022. 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 2022".

3-methyl-3-buten-1-ol: Geen ZS of pZS. Metaboliet in organismes. Komt natuurlijk voor in *Bistorta manshuriensis* (kruidachtige plant uit boekweïtfamilie) 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 2022

N.v.t.

3.4 Genomen maatregelen bij bijzondere constatering en/of afwijkingen vluchtige stoffen 2022

De 3 onbekende stoffen worden gemeld aan WL via deze rapportage.

3.5 Trendbeschrijving vluchtige stoffen 2022

Voorgaande jaren is het gemiddelde van vluchtige componenten altijd <100 µg/l geweest. In 2022 was het gemiddelde van totaal vluchtige componenten 27.4 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 2022

Naam	2022						Opmerking
	Kreti	n	n > 2,2	gem. [µg/l]	max [µg/l]	min [µg/l]	
LCAqua-440	7,87	52	51	31	77,0	2,1	Wordt met LC-MS bepaald (zie rapportage gecalibreerde stoffen)
LCAqua-191*	13,11	1	1	2,4	2,4	2,4	2-phenylbenzimidazolesulfonzuur
LCAqua-181	32,56	19	10	13,1	110,9	1,0	Component uit nieuwe slag monstemamekast, is niet geloosd.
LCAqua-184	45,25	3	1	1,9	2,9	1,2	Component uit nieuwe slag monstemamekast, is niet geloosd.
LCAqua-185	46,04	2	1	1,8	2,4	1,2	Component uit nieuwe slag monstemamekast, is niet geloosd.
LCAqua-186	47,72	3	1	2,0	3,3	1,2	Component uit nieuwe slag monstemamekast, is niet geloosd.
LCAqua-033	7,49	0	0	0,0	0,0	0	Pyrazool
LCAqua-447*	10,41	48	38	4,4	15,7	1,1	Identificatie loopt o.b.v. de codes; QTOF_POS0013; QTOF_POS0012 en QTOF_POS0501 nog geen basisgegevens UPLC-QTOF methode
LCAqua-560*	10,97	3	1	1,7	2,5	1,3	Identificatie loopt o.b.v. de code; QTOF_POS0193
LCAqua-558*	12,88	1	0	1,2	1,2	1,2	Identificatie loopt o.b.v. de code; QTOF_SIT_21_0266
LCAqua-571*	13,10	27	21	3,5	6,6	1,0	Identificatie loopt o.b.v. de code; QTOF_POS0639
LCAqua-539*	13,36	15	2	1,6	2,7	1,2	Identificatie loopt o.b.v. de code; QTOF_SIT_21_0650
LCAqua-512*	15,46	50	39	3,1	7,1	1,2	Identificatie loopt o.b.v. de code; QTOF_POS0216
LCAqua-196*	18,47	0	0	0,0	0,0	0	Identificatie loopt o.b.v. de code; QTOF_POS0216 nog geen basisgegevens UPLC-QTOF methode
LCAqua-471*	19,70	5	2	2,3	4,0	1,1	Geen massa's gevonden, noch met positieve, noch met negatieve ionisatie
LCAqua-510*	29,43	21	8	2,2	5,6	1,0	Identificatie loopt o.b.v. de code; QTOF_POS0640
LCAqua-436*	40,41	36	2	1,6	3,1	1,0	Identificatie loopt o.b.v. de code; QTOF_POS0124
LCAqua-295*	43,04	36	12	2,2	6,8	1,0	

Zie bijlage "D. Monitoringsgegevens matig polair tot polaire stoffen 2022" voor uitgebreide gegevens.

4.2 Bijzondere constatering en/of afwijkingen matig polair tot polaire stoffen 2022

In 2022 zijn er 25 componenten (LCAqua's) aangetoond.

De onbekende componenten LCAqua-181/184/185/186 zijn in week 39 plotseling in sterk verhoogde relatieve concentraties aangetoond, gelijk aan 2021 toen deze onbekende componenten na het onderhoud in week 41 waargenomen werden.

In 2021 is onderzocht wat de herkomst van deze 4 onbekende componenten was:

Ter tracersing 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 monstername slangen 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.

Monsternummer : 5887745 Locatie : Sitech Manufacturing Services CV, Geleen Monsterpunt : Monsternameslang in demiwater Monstermatrix : Oppervlaktewater Monsterpuntcode : Reden monstereming : Ad hoc aangeleverd monster. Opmerking bij monsterontvangst :					
Organische microparameters					
<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-440
Deze component wordt met behulp van de UPLC-QTOF methode als gekalibreerde stof bepaald zien voor resultaten paragraaf 5.1
- LCAqua-191
Deze onbekende component is in 2021 door AQZ geïdentificeerd als 2-phenylbenzimidazole sulfonzuur.

b) Identificatietraject voor 11 andere LCAqua componenten:

Gebleden 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 122,04852 69,02133	C ₉ H ₁₀ N ₄ O C ₆ H ₈ N ₂ O C ₃ H ₃ NO	4,89	QTOF_20_0014 QTOF_20_0013 QTOF_SIT_21_0435
560	11,07	<i>Te lage concentraties</i>			
558	12,59	268,08811	C ₁₂ H ₁₆ N ₂ O ₃ S	5,97	QTOF_SIT_21_0074
539	13,40	194,10524	C ₁₀ H ₁₄ N ₂ O ₂	5,24	QTOF_SIT_21_0575
512	15,45	212,95372	C ₆ H ₄ BrN ₃ O	5,40	QTOF_SIT_21_0650
471	19,60	<i>Te lage concentraties</i>			
436	40,31	250,1542	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	11,44	QTOF_SIT_21_0576
295	42,95	278,18897	C ₁₇ H ₂₆ O ₃	12,05	QTOF_SIT_21_0006
196	18,45	218,11636	C ₁₁ H ₁₄ N ₄ 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 ₉ H ₁₇ NO ₅ S	4,92	QTOF_SIT_21_0266
191	13,14	274,04096	C ₁₃ H ₁₀ N ₂ O ₃ 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. Deze situatie is in 2022 onveranderd aanwezig; zie onderstaande reactie van AQZ op navraag van Sitech.

"Beste 5.1.2e

mbt je vraag over de identificaties.

De onbekenden LCAqua-471 en LCAqua-560 zijn de afgelopen maanden niet of slechts in lage concentraties aangetoond in de routinematig gemeten monsters. Vanaf die kant zijn er geen extra acties ingezet.

Met vriendelijke groet,

5.1.2e

- Voor LCAqua-510 zijn geen massa's gevonden omdat deze component zeer massa-ongevoelig is.
- Het identificatie traject oor 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 2022 zijn nog 9 andere LCAqua's gemeten buiten deze lijst (in 2021 waren dat er 19), 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 2022

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 2022

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

4.5 Trendbeschrijving matig polair tot polaire stoffen 2022

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			2022		
		n	> 2,2	gem. [µg/l]	n	> 2,2	gem. [µg/l]	n	> 2,2	gem. [µg/l]	n	> 2,2	gem. [µg/l]
LCAqua-530	8,63	8	7	3,2	3	0	1,7	3	2	2,7	0	0	#DIV/0!
LCAqua-447*	10,41	52	52	14,2	52	49	7,3	44	34	5,5	48	38	4,4
LCAqua-560*	10,97	0	0	0,0	5	5	4,0	9	1	1,5	3	1	1,7
LCAqua-568*	12,88	0	0	0,0	13	4	2,1	14	1	1,5	1	0	1,2
LCAqua-571*	13,10	0	0	0,0	0	0	0,0	7	7	5,2	27	21	3,5
LCAqua-191*	13,11	8	6	3,3	0	0	0,0	8	5	3,2	1	1	2,4
LCAqua-539*	13,36	7	7	3,8	21	7	2,1	26	17	2,7	15	2	1,6
LCAqua-524	13,54	9	9	3,4	0	0		0	0	0,0	0	0	0
LCAqua-512*	15,46	36	25	3,2	49	26	2,5	50	36	3,6	50	39	3,1
LCAqua-531	16,99	5	5	3,7	0	0		0	0	0,0	0	0	0
LCAqua-196*	18,47	0	0	0,0	6	3	2,9	15	10	3,7	0	0	0,0
LCAqua-471*	19,70	39	16	2,2	23	6	2,0	7	3	2,1	5	2	2,3
LCAqua-510*	29,43	31	8	1,9	17	4	1,7	32	14	2,5	21	8	2,2
LCAqua-436*	40,41	42	4	1,6	45	7	1,7	39	5	1,6	36	2	1,6
LCAqua-295*	43,04	44	16	2,1	46	18	2,4	48	15	2,3	36	12	2,2

* = jaar van melding en start identificatie

Het aantal onbekende LCAqua's welke 4 of meer keren gemeten zijn met een concentratie > 2,2 µg/l is in de drie jaren van uitvoering is afgenomen van 12 in 2019 en 9 in 2020 en 2021 naar 5 in 2022. Daarbij de aantekening dat 3 van de reeds in 2020 gemelde onbekenden (LCAqua-471, -560 en -558) in 2021 en 2022 duidelijk minder aangetoond zijn. Van deze drie onbekende componenten is de basis informatie dan ook nog niet beschikbaar.

In 2022 is geen nieuwe LCAqua component meer dan 4 x met een concentratie > 2,2 µg/l aangetoond.

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_POSxxxx of QTOF_NEGxxxx 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 NTS-screening van monsters oppervlaktewaters in opdracht van drinkwater bedrijven.

5.1 Monitoringsgegevens polaire stoffen 2022

Tabel monitoringsgegevens van de onbekende stoffen welke 4 x of meer > 2,2 µg/l zijn aangetoond met de UPLC-Qtof methode positieve mode

nieuwe naam	RT [min]	m/z me _z	M meas.	Moleculair Formula	Opmerking	identificatie niveau	totaal aantal n	aantal 2022 >2,2 ug/l n	door tellend >2,2 ug/l n	Doortellend gemiddeld (µg/L)	max (µg/L)	min (µg/L)
QTOF_POS0631	5,297	114,09194	113,08466	C6H11NO	caprolactam	4	31	18	35	2,4	31,1	0,3
QTOF_POS0694	5,636	205,13314	204,12586	C12H16N2O	LCAqua440	5	18	3	4	0,2	3,4	0,1
QTOF_POS0012	4,899	123,05584	122,04856	C6H6N2O	LCAqua447	4	46	46	84	7,8	28,5	0,2
QTOF_POS0010	4,477	167,07035	166,06307	C9H10O3		0	5	51	35	3,4	7,8	0,0
QTOF_POS0016	5,365	184,13309	183,12581	C10H17NO2		0	5	0	6	0,4	3,7	0,2
QTOF_POS0126	3,764	324,23945	323,23218	C16H29N5O2		0	5	46	4	0,5	5,6	0,0
QTOF_POS0136	9,774	235,11431	234,10703	C14H18O5		0	5	33	3	0,6	3,9	0,1
QTOF_POS0155	8,743	221,09904	220,09177	C13H16O5		0	5	47	5	0,8	3,5	0,1
QTOF_POS0161	6,068	284,20656	286,17257	C12H26O6		0	5	47	3	1,2	35,0	0,0
QTOF_POS0165	4,662	223,19137	222,18409	C12H22N4		0	5	43	9	1,5	4,7	0,0
QTOF_POS0179	10,57	194,15363	193,14635	C12H19NO		0	5	52	4	1,0	17,0	0,1
QTOF_POS0198	10,559	190,12229	189,11482	C12H15NO		0	5	42	0	0,5	5,5	0,0
QTOF_POS0205	2,624	225,15458	228,1473	C11H22N2O3		0	5	6	6	1,7	15,0	0,3
QTOF_POS0222	5,045	237,13411	236,12751	C11H20F6		0	5	13	0	0,6	3,7	0,0
QTOF_POS0231	5,37	184,13294	183,12566	C11H17NO2		0	5	51	26	1,4	8,1	0,1
QTOF_POS0238	2,705	166,12292	165,11564	C11H15NO		0	5	7	3	0,4	4,4	0,1
QTOF_POS0247	2,811	184,14445	183,13718	C9H17N3O		0	5	21	4	1,0	4,9	0,1
QTOF_POS0250	4,713	169,13355	168,12627	C9H16N2O		0	5	50	8	3,2	14,0	0,1
QTOF_POS0256	6,485	167,11788	166,1106	C9H14N2O		0	5	48	0	1,0	3,2	0,2
QTOF_POS0267	5,269	150,09158	149,08412	C9H11NO		0	5	22	1	0,6	3,3	0,1
QTOF_POS0275	5,251	150,09157	132,058	C9H8O		0	5	38	1	1,0	3,2	0,1
QTOF_POS0282	2,877	186,12375	185,11648	C8H15N3O2		0	1	33	1	1,0	12,0	0,0
QTOF_POS0293	3,218	188,07386	187,06658	C8H13NO2S		0	5	52	12	2,4	11,0	0,0
QTOF_POS0296	6,484	140,10736	139,10008	C8H13NO		0	5	1	0	0,8	4,9	0,2
QTOF_POS0312	5,54	151,0872	150,07993	C8H12NO		0	5	11	1	0,9	5,7	0,0
QTOF_POS0351	3,692	193,06397	192,05664	C6H12N2O3S		0	5	51	1	1,4	6,8	0,1
QTOF_POS0361	5,55	107,06082	106,05354	C6H6N2		0	5	47	4	1,0	5,4	0,1
QTOF_POS0362	4,419	136,05097	135,0437	C6H5N3O		0	5	45	4	1,5	3,3	0,1
QTOF_POS0400	6,786	230,13829	229,13121	C11H19NO4		0	5	21	8	0,9	7,4	0,0
QTOF_POS0630	4,885	191,09235	190,08508	C8H14O5		0	5	0	0	0,2	4,2	1,3
QTOF_POS0639	5,249	195,11257	177,0788	C11H11NO2		0	4	27	4	1,0	3,6	0,1
QTOF_POS0644	3,117	222,15988	221,1526	C12H19N3O		0	5	0	0	0,3	9,4	0,5
QTOF_POS0646	5,494	221,13924	220,13196	C11H16N4O		0	5	48	0	0,6	4,0	0,0
QTOF_POS0668	6,781	255,20629	254,199	C14H26N2O2		0	5	19	2	0,4	9,8	0,0
QTOF_POS0659	2,648	138,06668	137,0594	C6H7N3O		0	5	6	0	0,3	3,9	0,0
QTOF_POS0661	3,11	195,12358	194,11631	C9H14N4O		0	5	7	0	0,2	2,8	0,0
QTOF_POS0671	3,174	203,17508	202,16839	C10H22N2O2		0	5	22	1	0,4	2,9	0,0
QTOF_POS0675	3,831	179,09117	178,08379	C7H14O5		0	5	14	4	0,9	40,0	0,0
QTOF_POS0676	3,835	133,08641	132,07913	C6H12O3		0	5	15	4	1,2	52,0	0,0
QTOF_POS0921	3,364	99,05544	98,04817	C4H6N2O		0	5	22	4	0,3	3,3	0,2
QTOF_POS0013	4,898	191,09249	190,08508	C9H14NO	LCAqua447	4	52	3	10	1,3	4,2	0,4
QTOF_POS0124	12,078	296,22189	278,18829	C17H26O3	LCAqua295	4	45	0	0	0,2	1,6	0,1
QTOF_POS0193	5,976	269,09645	268,08851	C12H16N2O3S	LCAqua558	5	6	0	0	0,1	1,0	0,0
QTOF_POS0216	5,538	219,12364	218,11636	C11H14N4O	LCAqua196	4	48	6	34	2,2	11,0	0,1
QTOF_POS0501	4,902	70,02864	69,02136	C3H9NO	LCAqua447	4	46	0	0	0,3	1,0	0,0
QTOF_POS0640	11,435	251,16346	250,15618	C15H22O3	LCAqua436	4	34	0	0	0,1	0,7	0,0
QTOF_POS0652	6,901	211,09406	188,10485	C9H16O4	LCAqua539	5	0	0	1	0,0	2,5	0,3

Tabel monitoringsgegevens van de onbekende stoffen welke 4 x of meer > 2,2 µg/l zijn aangetoond met de UPLC-Qtof methode negatieve mode

nieuwe naam	RT [min]	m/z meas.	M meas.	Molecular Formula	Opmerking	totaal aantal n	aantal 2022 >2,2 ug/l n	door tellend >2,2 ug/l n	Doortellend gemiddeld (µg/l)	max (µg/l)	min (µg/l)
QTOF_NEG012	4,915	250,07512	251,08239	C9H17NO5S	2-phenylbenzimidazole sulfonzuur	52	2	2	1,16	2,90	0,08
QTOF_NEG053	3,442	77,0157	78,02174	C4H2N2	Fumaronitril	50	0	0	0,23	1,29	0,01

Tabel monitoringsgegevens UPLC-Qtof bibliotheek en gekalibreerde componenten welke 4 x of meer > 2,2 µg/l zijn aangetoond.

Screening UPLC-QTOF - bibliotheek						Effluent IAZI 2022				
Component	CAS nummer	referentie stof	Op stoffen lijst?	n	n > 2,2	gem. (µg/l)	max (µg/l)	min (µg/l)		
Kojic acid	#N/A	bentazon-D6		10	10	13,400	22,000	7,600		
Melamine	108-78-1	antrazine-D5	ja	52	50	8,808	28,000	0,800		
Screening UPLC-QTOF - gekalibreerde componenten										
LC-Aqua440-MS		ClOx	ja	51	7	0,723	4,300	0,050		

Zie bijlage "F1 t/m F3. Monitoringsgegevens polaire stoffen 2022" voor uitgebreide gegevens.

5.2 Bijzondere constatering en/of afwijkingen polaire stoffen 2022

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	91	8*	83	78
Polair	AQZ UPLC-Qtof positieve mode	818	2	816	352
Polair	AQZ UPLC-Qtof negatieve mode	80	1	79	62
totaal		989	11*	978	492

* 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 [ug/l]
Polair	bibliotheek en gekalibreerde screening AQZ	0	0	0	
Polair	AQZ UPLC-Qtof positieve mode	36	0	1	0,2 – 7,8
Polair	AQZ UPLC-Qtof negatieve mode	1	0	1	0,1 – 1,2
totaal		37	0	2	

Het aantal onbekende componenten met een maximaal gemeten relatieve concentratie < 1 µg/l is 50% van het totale aantal.

In 2022 jaar zijn er 17 nieuwe 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 17 componenten.

5.3 Oorzaak van bijzondere constatering en/of afwijkingen polaire stoffen 2022

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 2022

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. De voortgang van de identificatie wordt regelmatig gerapporteerd conform voorschrift 29 lid 6.

5.5 Trendbeschrijving polaire stoffen 2022

Het aantal nieuwe onbekende componenten neemt af en ook de gemiddelde relatieve concentratie neemt af.

De onbekende componenten in de polaire screening in het effluent van de IAZI zijn niet altijd aanwezig wat het identificeren bemoeilijkt.

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 fusie methode uitvoert.

6.1 Monitoringsgegevens zeer polaire stoffen 2022

Monitoringsgegevens screening UPLC-Orbitrap fusie methode positieve mode van de onbekende stoffen welke 1 x of meer in een concentratie > 2,2 µg/l zijn aangetoond.

Polaire stoffen screening - gedetecteerde stoffen per week				RT IS (chloormequat-d9)		7	90	91	92	93	94	95
Resultaten positieve mode				Area IS (chloormequat-d9)		2022						
Identificatiecode	Stofnaam	ID vl	Formule	Molecuulmassa	RT	rel. RT	aantal		doortellend		max	min
							>2,2 µg/L	>2,2 µg/L	gemiddeld	gemiddeld		
							n	n	(µg/L)	(µg/L)	(µg/L)	(µg/L)
ST_ZPS_POS_002	Melamine	1	C3H6N6	126,0653	6,27	0,718	52	52	75	81,5	126,3	25,7
ST_ZPS_POS_003	LCaqua-440	4	C12H16N2O	204,1261	4,55	0,521	48	19	37	10,2	23,3	0,5
ST_ZPS_POS_010	Melam	1	C6H8N10	218,0775	5,86	0,671	45	37	56	10,1	19,9	0,7
ST_ZPS_POS_011	Ureidomelamine	3	C4H7N7O	169,0711	2,68	0,307	48	29	46	5,9	11,7	0,8
ST_ZPS_POS_019	Guanylurea	1	C2H6N4O	102,0540	7,07	0,810	23	5	10	1,6	3,0	0,5
ST_ZPS_POS_022	LCaqua-440	4	C12H16N2O	204,1260	3,24	0,371	15	2	3	0,9	2,4	0,6
ST_ZPS_POS_024	Adenine CAS# 73-24-5	4	C5H5N5	135,0544	5,55	0,635	37	11	16	2,0	4,7	0,6
ST_ZPS_POS_029	Cyanmelamine CAS# 3496-98-8	1	C4H5N7	151,0605	8,00	0,916	36	11	16	2,4	3,9	0,7
ST_ZPS_POS_039	Diguanidine CAS# 56-93-1	1	C2H7N5	101,0700	8,58	0,983	36	3	6	1,8	2,6	0,5
ST_ZPS_POS_040	Melam	1	C6H8N11	235,1041	7,95	0,910	37	13	26	2,9	3,8	0,5
ST_ZPS_POS_075	2-Deoxyadenosine	2	C10H13N5O3	251,10159	4,97	0,565	24	2	5	1,2	3,7	0,6
ST_ZPS_POS_097	Adenosine	1	C10H13N5O4	267,09667	4,612	0,5231	24	1	1	1,6	2,7	0,5
ST_ZPS_POS_111	Guanine	1	C5H5N5O	151,04929	5,794	0,656172	29	0	1	0,9	2,2	0,5
ST_ZPS_POS_117	Cytosine	1	C4H5N3O	111,04315	6,267	0,756365	16	0	1	0,4	0,9	0,5
ST_ZPS_POS_118	Adonine	1	C3H5N5O	127,04929	7,07	0,8068	22	0	0	0,6	1,2	0,5
ST_ZPS_POS_129	Choline	1	C5H13NO	103,09953	9,923	1,2213	0	0	0	0,2	0,6	0,0
ST_ZPS_POS_138	Pentaglyme	3	C12H26O6	266,17905	2,479	0,279797	14	5	5	43,3	89,6	0,6
ST_ZPS_POS_142	Hexaglyme	3	C14H30O7	310,19915	2,902	0,32754	13	5	5	38,0	84,4	0,6
ST_ZPS_POS_167	Urotropine	1	C6H12N4	140,10611	11,372	1,283521	8	0	1	0,4	1,5	0,6
ST_ZPS_POS_232	Heptaglyme	3	C16H34O8	354,2254	3,65	0,411	6	4	4	23,9	483,9	2,1
ST_ZPS_POS_249	Octaglyme	3	C18H38O9	398,2516	4,47	0,504	4	3	3	8,6	186,4	0,6
ST_ZPS_POS_266	N-Methyldiethanolamine	1	C5H13NO2	119,0947	9,49	1,07	3	2	2	1,8	11,5	1,0
ST_ZPS_POS_267	Piperazine	4	C4H10N2	86,0844	11,32	1,276	4	4	4	0,8	29,4	2,8
ST_ZPS_POS_159	Xylometazoline CAS# 526-36-3	1	C16H24N2	244,1938	7,092	0,800451	27	8	8	1,3	6,2	0,5
ST_ZPS_POS_001		4	C14H26N2O2	254,1993	3,278	0,375	2	2	4	12,0	61,4	38,1
ST_ZPS_POS_004		4	C6H8N2O	122,0479	3,41	0,390	3	1	12	2,0	4,1	1,7
ST_ZPS_POS_005		4	C11H20N2O3	228,1473	10,37	1,188	40	33	51	13,3	44,7	0,9
ST_ZPS_POS_006		4	C11H16N4O	220,1323	5,10	0,584	40	15	34	4,9	6,8	0,5
ST_ZPS_POS_007		4	C9H16N2O	168,1261	4,63	0,530	40	23	44	10,9	21,7	0,7
ST_ZPS_POS_008		4	C12H18N2O	206,1418	7,90	0,332	15	8	20	2,2	4,2	0,6
ST_ZPS_POS_009		4	C12H14N2	186,1156	5,68	0,651	51	18	32	4,4	8,8	0,5
ST_ZPS_POS_012		4	C11H16N4O2	236,1272	3,50	0,401	25	15	30	4,0	12,2	0,6
ST_ZPS_POS_015		4	C10H15NO	165,1152	9,53	1,092	35	12	19	2,4	9,6	0,5
ST_ZPS_POS_017		4	C8H12N2O2	168,0898	5,61	0,643	26	12	24	5,0	13,8	0,6
ST_ZPS_POS_020		4	C10H12F2N2	198,0967	6,87	0,787	36	8	14	2,2	4,7	0,8
ST_ZPS_POS_023		4	C9H17N3O	183,1170	10,01	1,146	41	3	7	1,8	4,0	0,5
ST_ZPS_POS_025		5	C10H18N2O	201,0897	9,88	1,132	44	35	50	5,8	12,2	0,7
ST_ZPS_POS_026		4	C12H22N4O	238,1791	11,28	1,292	26	30	11	1,7	7,8	0,5
ST_ZPS_POS_028		4	C10H12N4O2	220,0954	3,64	0,412	57	46	59	7,6	11,6	1,6
ST_ZPS_POS_031		4	C16H29N5O2	323,2320	11,45	1,211	19	7	7	1,1	5,2	0,6
ST_ZPS_POS_032		4	C9H10N4O	190,0852	3,96	0,406	47	46	60	11,8	24,4	1,7
ST_ZPS_POS_033		4	C10H17NO3	199,1206	11,12	1,274	23	10	15	5,4	7,0	0,5
ST_ZPS_POS_035		5	C6H2O8	362,0082	9,52	1,090	44	17	17	2,3	4,3	1,0
ST_ZPS_POS_037		4	C13H18F2N2	240,1437	6,87	0,786	38	13	18	2,5	3,9	0,7
ST_ZPS_POS_055		5	C11H13N3O2	194,9513	10,13	1,160	0	0	7	0,9	0,0	0,0
ST_ZPS_POS_057		4	C11H13N3O2	219,1003	3,48	0,398	0	0	9	1,7	0,0	0,0
ST_ZPS_POS_060		4	C10H16N2O2	196,1210	10,33	1,182	13	0	7	1,5	1,0	0,5
ST_ZPS_POS_061		5	C13H18N2O	137,0585	8,40	0,953	2	1	4	0,7	3,0	1,2
ST_ZPS_POS_062		5	C13H18N2O	283,9901	4,85	0,549	8	4	16	2,3	6,8	1,0
ST_ZPS_POS_063		4	C11H18N2O2	210,1363	10,40	1,179	34	9	18	2,2	4,6	0,5
ST_ZPS_POS_064		5	C11H18N2O2	217,9672	10,19	1,165	33	20	24	3,1	12,7	0,7
ST_ZPS_POS_065		4	C10H14N4O3	238,1063	3,35	0,382	40	14	14	3,5	32,6	0,6
ST_ZPS_POS_067		4	C8H8N2	106,05292	2,54	0,290	18	2	4	0,9	2,7	0,5
ST_ZPS_POS_069		4	C12H22N4	222,1842	10,02	1,144	29	11	13	2,0	5,2	0,6
ST_ZPS_POS_071		4	C9H15NO	153,1151	3,99	0,409	47	8	10	1,9	5,8	0,6
ST_ZPS_POS_074		4	C7H14O5	178,0839	8,76	0,997	5	3	5	0,6	7,9	0,6
ST_ZPS_POS_083		4	C9H13N3O2	193,0851	2,873	0,325368	35	19	19	2,5	6,8	0,5
ST_ZPS_POS_086		4	C7H12N2O3S	204,05674	3,412	0,38641	25	7	11	1,8	23,3	0,3
ST_ZPS_POS_087		5	C10H16N2O	180,14687	3,639	0,412118	37	21	22	3,2	11,8	0,6
ST_ZPS_POS_096		5	C10H16N2O	192,08198	4,649	0,52601	43	4	4	1,7	3,2	0,7
ST_ZPS_POS_099		4	C11H14N4O2	234,11151	4,733	0,536014	37	4	4	0,8	2,6	0,6
ST_ZPS_POS_109		4	C10H13NO2	179,09452	5,543	0,627746	25	6	9	1,5	9,1	0,5
ST_ZPS_POS_113		4	C12H20N2O2	224,15234	6,022	0,681993	19	6	6	0,6	3,9	0,6
ST_ZPS_POS_115		5	C12H20N2O2	219,06161	6,229	0,705436	27	9	11	2,0	7,2	0,5
ST_ZPS_POS_125		5	C12H20N2O2	574,96948	9,76	1,105323	19	5	5	0,6	3,7	0,6
ST_ZPS_POS_128		5	C12H20N2O2	235,94013	9,846	1,15062	43	14	14	1,9	3,7	0,7
ST_ZPS_POS_133		4	C10H19NO2	185,14151	10,373	1,174745	17	6	6	1,0	9,7	0,7
ST_ZPS_POS_141		4	C9H11N3O2	193,0851	2,869	0,323815	33	11	11	1,8	6,9	0,5
ST_ZPS_POS_144		4	C7H8NO3S	187,03024	3,411	0,384989	29	12	19	3,0	43,6	0,3
ST_ZPS_POS_147		4	C8H8NO2	151,06325	3,991	0,405305	33	5	7	3,3	6,0	0,5
ST_ZPS_POS_158		4	C10H13NO2	179,09453	6,758	0,762754	19	4	4	0,7	5,7	0,5
ST_ZPS_POS_174		5	C10H13NO2	226,03855	3,531	0,392399	10	4	4	0,4	4,0	0,6
ST_ZPS_POS_196		4	C9H13N3O2	195,10058	7,421	0,834758	31	8	8	1,0	4,7	0,6
ST_ZPS_POS_269		5	C10H13NO2	283,9909	4,54	0,512	18	8	8	1,2	6,0	0,5
ST_ZPS_POS_315		5	C10H13NO2	247,01442	9,767	1,099021	9	4	4	0,5	4,6	0,5
ST_ZPS_POS_320		5	C10H13NO2	680,41219	2,957	0,333898	4	4	4	2,3	69,8	3,4
ST_ZPS_POS_321		4	C13H15NO	201,1153	5,285	0,596771	19	5	5	0,6	7,9	0,7
ST_ZPS_POS_354		5	C10H13NO2	283,19937	2,459	0,277696	18	8	8	0,9	12,0	0,5
ST_ZPS_POS_362		4	C8H10CF4NO	240,99211	10,13	1,146057	5	4	4	1,1	12,8	0,7
ST_ZPS_POS_488		4	C12H18N2	190,14662	2,729	0,304712	4	4	4	2,1	75,5	19,5

Monitoringsgegevens screening UPLC-Orbitrap fusie methode negatieve mode van de onbekende stoffen welke 1 x of meer in een concentratie > 2,2 µg/l zijn aangetoond.

Polaire stoffen screening - gedetecteerde stoffen per week		RT is (total-d7)		7	90	91	92	93	94	95		
Resultaten negatieve mode		Area is (PBM-13C3)		2022								
identificatiecode	Stofnaam	ID liv	Formule	Molecuulmassa (Da)	RT (min)	rel. RT (min)	aantal		doorlooptijd		max (µg/L)	min (µg/L)
							>2,2 µg/L	n	>2,2 µg/L	n		
ST_ZPS_NEG_001	H2O24	4	H2O4S	92.9673	0.52	1.512	52	52	75	208.1	3603.8	84.6
ST_ZPS_NEG_002	Sulfaminezuur	4	HEM03S	98.9204	0.73	0.394	52	52	75	208.6	687.9	28.6
ST_ZPS_NEG_003	Adduct van sulfaminezuur	5		170.9160	2.89	0.398	0	0	5	1.1	0.0	0.0
ST_ZPS_NEG_007	Adduct van sulfaminezuur	5		231.9226	2.80	0.386	0	0	4	0.5	0.0	0.0
ST_ZPS_NEG_046	Is magnesium - formaat adducten; wordt in de analyse gevoerd is niet in het effluent aanwezig	5	C9H10O5MgSi	278.9220	9.88	1.361	34	33	46	4.5	45.5	0.7
ST_ZPS_NEG_087	Ammenide	1	C9H14N2O2	178.0346	1.45	0.469	0	0	1	0.1	0.0	0.0
ST_ZPS_NEG_094		4	C9H14N2O5	230.0902	1.99	0.544	29	22	39	3.7	18.7	0.8
ST_ZPS_NEG_095		4	C9H10O6S	210.0397	2.84	0.390	48	45	65	15.2	39.4	1.0
ST_ZPS_NEG_096		5		237.9113	2.72	0.374	44	44	51	9.5	46.4	2.7
ST_ZPS_NEG_098		5		257.9668	5.16	0.711	35	26	41	5.8	58.2	0.5
ST_ZPS_NEG_099		4	C9H12N2O4	212.0797	4.86	0.670	33	22	39	3.4	28.3	0.5
ST_ZPS_NEG_100		4	C9H12N2O4	212.0797	4.11	0.566	35	23	30	3.6	29.0	0.5
ST_ZPS_NEG_111		5		260.0023	4.96	0.669	52	43	57	7.6	26.0	0.5
ST_ZPS_NEG_112		4	C9H14N2O5	230.0902	1.50	0.482	34	18	35	2.7	20.1	0.5
ST_ZPS_NEG_113		5		226.0017	7.85	1.081	14	3	7	0.7	3.1	0.7
ST_ZPS_NEG_114		4	C9H12O6S	238.0510	4.07	0.953	46	41	62	6.9	19.5	1.1
ST_ZPS_NEG_115		4	C9H14CIN3O3	247.0722	1.43	0.472	19	13	16	1.8	39.4	0.4
ST_ZPS_NEG_116		4	C9H14N2O2	138.0307	7.07	0.975	0	0	4	0.3	0.0	0.0
ST_ZPS_NEG_118		5		181.9286	9.62	1.325	0	0	4	0.4	0.0	0.0
ST_ZPS_NEG_119		5		233.8904	9.49	1.307	4	0	4	0.8	1.3	0.7
ST_ZPS_NEG_120		4	C9H12N2O4	212.0796	1.64	0.176	25	7	11	1.6	14.5	0.5
ST_ZPS_NEG_121		5		237.9969	2.83	0.390	23	14	22	1.5	6.4	1.0
ST_ZPS_NEG_122		5		206.0148	1.86	0.394	26	5	7	0.9	12.6	0.4
ST_ZPS_NEG_123		4	C9H12N2O4	212.0796	5.30	0.730	12	5	9	0.8	12.8	0.6
ST_ZPS_NEG_124		4	C9H14O6S	238.0510	1.36	0.411	27	15	29	2.6	30.7	0.7
ST_ZPS_NEG_125		4	C9H12N2O4	212.0796	1.47	0.340	8	3	5	0.4	4.2	0.4
ST_ZPS_NEG_126		4	C9H16O5	192.0998	4.15	0.572	11	1	4	0.3	2.5	0.6
ST_ZPS_NEG_127		5		168.8438	10.16	1.369	12	2	10	0.7	3.3	0.8
ST_ZPS_NEG_128		4	C9H13N3O3	209.0799	6.45	0.870	0	0	9	0.6	0.0	0.0
ST_ZPS_NEG_129		4	C9H12N2O4	212.0796	0.97	1.119	29	12	21	2.7	12.8	0.5
ST_ZPS_NEG_136		4	C9H14CIN3O3	247.0719	2.69	0.370	11	6	8	1.3	25.0	0.7
ST_ZPS_NEG_140		4	C9H14O5S	218.0507	4.11	0.567	17	14	16	1.0	7.9	1.3
ST_ZPS_NEG_141		5		304.0278	4.18	0.276	1	1	5	0.6	16.9	16.9
ST_ZPS_NEG_142		5		260.0018	4.39	0.604	5	4	18	2.1	18.2	1.9
ST_ZPS_NEG_156		5		257.9968	4.95	0.676	14	13	15	2.1	15.4	1.1
ST_ZPS_NEG_159		4	C11H12N4O2	232.0955	4.47	0.614	0	0	12	0.9	0.0	0.0
ST_ZPS_NEG_160		4	C9H12N2O5S	246.0306	2.41	0.332	27	20	27	4.2	56.2	0.6
ST_ZPS_NEG_161		5		330.0437	5.52	0.794	8	8	14	1.4	8.2	3.6
ST_ZPS_NEG_163		4	C9H13NO4S	148.8781	1.507	0.34609164	22	22	28	2.1	11.8	1.1
ST_ZPS_NEG_164		5		260.8465	9.844	1.340276797	48	43	43	7.6	31.5	0.9
ST_ZPS_NEG_165		5		227.9250	10.495	1.39140202	16	14	14	0.9	5.9	0.5
ST_ZPS_NEG_166		5		215.9488	2.953	0.40552553	39	37	38	5.2	42.4	1.3
ST_ZPS_NEG_167		5		308.0409	4.455	0.47213383	34	14	15	3.2	8.7	0.5
ST_ZPS_NEG_169		4	C9H12O4S	204.0540	1.425	0.33134693	31	13	13	2.8	89.1	0.7
ST_ZPS_NEG_169		5		237.9969	2.455	0.335474173	12	5	6	0.6	20.6	0.5
ST_ZPS_NEG_170		5		264.0545	4.045	0.52746652	7	1	6	0.3	2.4	0.8
ST_ZPS_NEG_171		4	C9H13N3O2	193.0851	2.701	0.349089915	21	14	19	1.2	17.5	0.6
ST_ZPS_NEG_175		4	C9H14O5S	218.0507	6.244	0.8323859	28	13	24	1.5	19.4	0.4
ST_ZPS_NEG_176		4	C9H12N2O5S	246.0307	1.502	0.34186693	20	15	27	6.7	113.6	1.0
ST_ZPS_NEG_178		5		141.9682	1.23	0.441	28	15	22	2.3	13.8	0.6
ST_ZPS_NEG_180		5	C9H10O4S	178.0289	5.19	0.706	16	13	27	2.9	17.8	0.9
ST_ZPS_NEG_184		5		238.0506	5.172	0.7323012	10	8	16	1.6	4.8	0.7
ST_ZPS_NEG_187		5		182.98372	1.765	0.36054503	26	0	4	0.7	4.0	0.5
ST_ZPS_NEG_188		4	C9H14O5S	171.94995	2.779	0.374024276	38	19	27	1.7	5.2	0.6
ST_ZPS_NEG_189		5		224.0327	3.045	0.409825034	13	4	6	1.1	42.3	0.6
ST_ZPS_NEG_191		4	C9H12N2O4	212.0799	5.212	0.701480485	12	6	12	0.9	5.0	0.5
ST_ZPS_NEG_192		5		178.0289	4.129	0.48217954	16	11	21	1.5	4.5	1.1
ST_ZPS_NEG_193		5	C9H9N4O2	283.99051	4.394	0.591386272	0	0	8	0.5	0.0	0.0
ST_ZPS_NEG_194		4	C14H12N4O4S	330.0428	5.85	0.720053836	0	0	4	0.2	0.0	0.0
ST_ZPS_NEG_196		5		210.0216	6.244	0.840376851	10	1	7	0.3	2.4	0.2
ST_ZPS_NEG_197		4	C9H9N2O4S	178.0361	1.538	0.38680788	0	0	5	0.4	0.0	0.0
ST_ZPS_NEG_198		4	C9H12O4S	204.0530	1.265	0.331341365	20	13	18	1.3	10.4	0.5
ST_ZPS_NEG_199		5		348.0426	2.531	0.38821954	8	7	10	1.4	52.4	0.7
ST_ZPS_NEG_200		4	C9H13NO4S	193.04097	5.774	0.722958531	18	7	12	1.0	4.8	0.6
ST_ZPS_NEG_208		4	C9H13NO4S	205.0508	4.489	0.594243641	1	0	4	0.4	0.6	0.6
ST_ZPS_NEG_210		4	C9H13N2O3P	238.0389	6.109	0.81784552	11	6	10	0.6	6.1	1.1
ST_ZPS_NEG_211		4	C9H12O4S2	222.00171	7.414	0.992503347	14	9	9	0.5	3.6	1.2
ST_ZPS_NEG_213		5		183.84827	10.025	1.34818781	19	6	6	0.6	3.7	0.5
ST_ZPS_NEG_214		5		236.0544	2.976	0.39936724	11	3	5	0.5	10.5	1.0
ST_ZPS_NEG_215		4	C9H14O5S	238.0519	1.011	0.494215331	14	6	6	0.4	3.1	0.5
ST_ZPS_NEG_218		4	C9H12N2O4	212.07922	3.333	0.44744265	11	6	7	0.4	5.0	0.6
ST_ZPS_NEG_222		5		304.03879	4.377	0.588924419	31	25	25	3.4	75.0	0.6
ST_ZPS_NEG_226		5		286.01806	6.171	0.826701839	7	1	4	0.3	2.5	0.5
ST_ZPS_NEG_230		5		220.8523	10.25	2.190	4	4	4	0.3	8.6	2.1
ST_ZPS_NEG_231		5		177.85045	7.465	0.55958863	14	4	4	0.3	4.4	0.4
ST_ZPS_NEG_240		5		330.0444	6.041	0.7986839	40	27	27	2.1	12.0	0.7
ST_ZPS_NEG_242		5		260.00275	3.066	0.405601918	7	4	4	0.2	2.9	0.5
ST_ZPS_NEG_245		5		260.0027	4.46	0.587	34	23	23	2.1	20.7	0.6
ST_ZPS_NEG_251		5		186.8688	11.133	0.46489362	32	29	29	3.6	30.2	1.8
ST_ZPS_NEG_254		5		163.0225	5.652	0.751595785	12	10	10	0.8	10.7	1.8
ST_ZPS_NEG_256		5		364.0528	4.954	0.58095745	23	10	10	0.7	4.2	0.5
ST_ZPS_NEG_258		4	C9H13NO4S	148.8783	2.649	0.352260638	17	11	11	1.1	20.1	0.7
ST_ZPS_NEG_261		5		283.91731	3.088	0.410639298	19	15	15	1.1	7.4	1.0
ST_ZPS_NEG_262		5		154.84236	1.244	0.431829279	9	5	5	0.4	11.4	0.5
ST_ZPS_NEG_266		4	C9H14O5S2	175.94488	10.031	1.151334034	18	16	16	1.2	112.9	0.6
ST_ZPS_NEG_267		4	C9H12O5S	224.03591	1.912	0.315143534	8	5	5	0.3	7.1	1.9
ST_ZPS_NEG_294		4	C9H18O8S2	364.03893	4.772	0.623548522	11	10	10	0.9	16.7	0.9
ST_ZPS_NEG_295		5		212.75186	9.838	1.20727668	8	9	9	1.1	10.6	1.2
ST_ZPS_NEG_296		4	C9H12O4S	204.0591	1.562	0.460283568	12	9	9	0.5	4.9	0.8

6.2 Bijzondere constatering en/of afwijkingen zeer polaire stoffen 2022

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
Zeer polair	KWR UPLC-Orbitrap positieve mode	409	10	399	140
Zeer polair	KWR UPLC-Orbitrap negatieve mode	234	3	231	56
totaal		643	13	630	196

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 [ug/l]
Zeer polair	KWR UPLC-Orbitrap positieve mode	57	0	0,2 – 81,5
Zeer polair	KWR UPLC-Orbitrap negatieve mode	90	0	0,2 - 25
totaal		147	0	

Het aantal onbekende componenten met een maximaal gemeten relatieve concentratie < 1 µg/l is 31% van het totale aantal.

In 2022 zijn er 90 nieuwe 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 onbekende componenten.

6.3 Oorzaak van bijzondere constatering en/of afwijkingen zeer polaire stoffen 2022

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 2022

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. De voortgang van de identificatie wordt regelmatig gerapporteerd conform voorschrift 29 lid 6.

6.5 Trendbeschrijving zeer polaire stoffen 2022

De onbekende componenten in de polaire screening in het effluent van de IAZI zijn niet altijd aanwezig wat het identificeren bemoeilijkt.

7. Bijlagen

- A. Monitoringsgegevens apolaire stoffen 2022
- B. Monitoringsgegevens niet vluchtige stoffen 2022
- C. Monitoringsgegevens vluchtige stoffen 2022
- D. Monitoringsgegevens matig polair tot polaire stoffen 2022
- E. AQZ rapport "20211512_Sitech_LCAQuas", dd. 23 december 2021
- F. 1 t/m 3 Monitoringsgegevens polaire stoffen 2022
- G. 1 en 2 Monitoringsgegevens zeer polaire stoffen 2022

A. Monitoringsgegevens apolaire stoffen 2022

CUSTOMER_ID	SAMPLE_ID	PRODUC	TEST_SCHEDULE	SAMPLED_DATE	ANALYSES	COMPONENT	UNIT	RESULT
1009	23249608	AFWA6002	AFWA6002K	23-1-2022 23:59	LCPL3374/1	D3 individuele piekwaarde	ug/l	<10
1009	23249608	AFWA6002	AFWA6002K	23-1-2022 23:59	LCPL3374/1	D3 somparameter t.o.v. Linuron	ug/l	11
1009	23262000	AFWA6002	AFWA6002K	24-4-2022 23:59	LCPL3374/1	D3 individuele piekwaarde	ug/l	<10
1009	23262000	AFWA6002	AFWA6002K	24-4-2022 23:59	LCPL3374/1	D3 individuele piekwaarde.	ug/l	<10
1009	23262000	AFWA6002	AFWA6002K	24-4-2022 23:59	LCPL3374/1	D3 somparameter t.o.v. Linuron	ug/l	14
1009	23312785	AFWA6002	AFWA6002K	25-7-2022 23:59	LCPL3374/1	D3 individuele piekwaarde	ug/l	<10
1009	23312785	AFWA6002	AFWA6002K	25-7-2022 23:59	LCPL3374/1	D3 individuele piekwaarde.	ug/l	<10
1009	23312785	AFWA6002	AFWA6002K	25-7-2022 23:59	LCPL3374/1	D3 somparameter t.o.v. Linuron	ug/l	27
1009	23336854	AFWA6002	AFWA6002K	24-10-2022 07:00	LCPL3374/1	D3 somparameter t.o.v. Linuron	ug/l	<10

B. Monitoringsgegevens niet vluchtige stoffen 2022

Component	ABM stof	CAS nr.	techniek	APWA Stroom	methode	Alerterings waarde (Voorschrift 30)	week 1 [µg/l]	week 6 [µg/l]	week 10 [µg/l]	week 14 [µg/l]	week 18 [µg/l]	week 23 [µg/l]	week 31 [µg/l]	week 40 [µg/l]	week 45 [µg/l]	week 49 [µg/l]	n metingen	n >2,2	Min	Max	Gemiddelde
benzylalcohol	B5 pZS	100-51-6	PTV GC-MS	effluent	ITM1317	5	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	10	0	<1	<1	<1
Eicosane	A3	112-95-8	PTV GC-MS	effluent	ITM1317	1	<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	ITM1317	1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	10	0	<1	<1	<1
Dibenzyltolueen	A1 pZS	53585-53-8	PTV GC-MS	effluent	ITM1317	0,000340463	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	10	0	<1	<1	<1
Cetene	A1 pZS	629-73-2	PTV GC-MS	effluent	ITM1317	1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	10	0	<1	<1	<1
C6 koolwaterstoffen, isoalkanen en <5% n-hexaan	Z2	64742-49-0	PTV GC-MS	effluent	ITM1317	0,1	<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	ITM1317	1	<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	ITM1317	1	<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	ITM1317	5	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	10	0	<1	<1	<1
biphenyl	A1 pZS	92-52-4	PTV GC-MS	effluent	ITM1317	5	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	10	0	<1	<1	<1
Cholesterol		57-88-5	PTV GC-MS	effluent	ITM1317	1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	10	0	<1	<1	<1
Octocrylene	Nt in stoffenlijst	6197-30-4	PTV GC-MS	effluent	ITM1317		<1	<1	1	<1	3	2	<1	<1	<1	<1	10	1	<1	3	0,6
Octadecane	A3	593-45-3	PTV GC-MS	effluent	ITM1317	1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	10	0	<1	<1	<1
Hexadecane	A4	544-76-3	PTV GC-MS	effluent	ITM1317	1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	10	0	<1	<1	<1
Dodecene	A1	112-41-4	PTV GC-MS	effluent	ITM1317	1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	10	0	<1	<1	<1
2-Propanol, 1-chloro-, phosphate (3:1)	B3 pZS	13674-84-5	PTV GC-MS	effluent	ITM1317	0,009990671	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	10	0	<1	<1	<1
Squalene	A4	111-02-4	PTV GC-MS	effluent	ITM1317	5	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	10	0	<1	<1	<1
Benzotriazole	A2 pZS	95-14-7	PTV GC-MS	effluent	ITM1317	17,69995861	<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 pZS	96-69-5	PTV GC-MS	effluent	ITM1317	1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	10	0	<1	<1	<1
2,4-Di-tert-butylphenol	A1 pZS	96-76-4	PTV GC-MS	effluent	ITM1317	1	<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	ITM1317	1	<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	ITM1317	0,001668936	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	10	0	<1	<1	<1
Octadecanoic acid		57-11-4	PTV GC-MS	effluent	ITM1317	0,001668936	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	10	0	<1	<1	<1
4-tert-butylpyrocatechol	A1 pZS	98-29-3	PTV GC-MS	effluent	ITM1317	0,1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	10	0	<1	<1	<1

C. Monitoringsgegevens vluchtige stoffen 2022

	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	GCCH2042	<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	GCCH2042	<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	GCCH2042	<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	GCCH2042	<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	90-12-0	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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	GCCH2042	<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-butoxyethanol	Z2	111-76-2	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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
3-methyl-3-buten-1-ol	niet in SL	763-32-6	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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 analyse op onledingsproduct 2-ethylhexanol (104-76-7)	B2	16111-62-9	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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	GCCH2042	1,2	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
2-methyl-2-propanol	B4	75-65-0	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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	GCCH2042	<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	GCCH2042	<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	107-13-1	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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	GCCH2042	<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
Butadieen	Z2	106-99-0	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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
Cyclobutane, methyleene	Z2	1120-56-5	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042													
Di-cyclopentadiene DCPD	pZZS	77-73-6	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<0,2	<0,2	<0,2	0,2	1	0,4	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	0,3
Distillates (petroleum), light distillate hydrotreating process, low-boiling	Z1	68410-97-9	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5
ETBE	niet in SL	637-92-3	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	0,6	<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	GCCH2042	<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	GCCH2042	<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	123-51-3	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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
Koolstofdioxide	B2 pZZS	75-15-0	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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 tertiary butyl ether	A3 pZZS	1634-04-4	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	2	2	0,5	4	10	10	2	2	0,5	0,6	<0,5	<0,5	<0,5
monovinylchloride	Z2	75-01-4	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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	GCCH2042	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5
naftaleen	Z2	91-20-3	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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	GCCH2042	15	200	15	90	1	8	0,8	0,6	100	1	5	45	130
o-xyleen	B1	95-47-6	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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-xyleen	B1	106-42-3	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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	GCCH2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	2,2	<0,5	<0,5
propyleenoxide	Z2	75-56-9	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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	GCCH2042	<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	GCCH2042	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5

	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 pZS	95-50-1	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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	GCCH2042	<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 pZS	106-46-7	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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 pZS	504-60-9	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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	90-12-0	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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 pZS	78-93-3	P&T GC-MS	effluent	GCCH2042	<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-butoxyethanol	Z2	111-76-2	P&T GC-MS	effluent	GCCH2042	<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
3-methyl-3-buten-1-ol	niet in SL	763-32-6	P&T GC-MS	effluent	GCCH2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	0,8	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
Di-2-ethyl-peroxidecarbonaat analyse op onledingsproduct 2-ethylhexanol (104-76-7)	B2	16111-62-9	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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	GCCH2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	2	1,4	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	1
2-methyl-2-propanol	B4	75-65-0	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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-methylnaphtalene	Z1	91-57-6	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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	GCCH2042	<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	107-13-1	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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	GCCH2042	<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
Butadieen	Z2	106-99-0	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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
Cyclobutane, methylene	Z2	1120-56-5	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042													
Di-cyclopentadiene DCPD	pZS	77-73-6	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	1	0,5	0,3	<0,2	0,2	0,3	<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	GCCH2042	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5
ETBE	niet in SL	637-92-3	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<0,5	<0,5	0,5	<0,5	1	<0,5	<0,5	0,9	0,8	<0,5	<0,5	<0,5	2
Ethylbenzeen	B2	100-41-4	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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	GCCH2042	<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	123-51-3	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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
Koolstofdioxide	B2 pZS	75-15-0	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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 pZS	1634-04-4	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	1	1	2	<0,5	1	0,8	<0,5	<0,5	2	<0,5	0,6	2	1
monovinylchloride	Z2	75-01-4	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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	GCCH2042	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5
naftaleen	Z2	91-20-3	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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	GCCH2042	0,5	75	60	0,7	8	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	80	15	20	<0,5
o-xyleen	B1	95-47-6	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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	106-42-3	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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	GCCH2042	<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	GCCH2042	<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	GCCH2042	<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 pZS	108-05-4	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5,0	<5,0

	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	GCCH2042	<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	GCCH2042	<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	GCCH2042	<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	GCCH2042	<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	90-12-0	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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	GCCH2042	<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-butoxyethanol	Z2	111-76-2	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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
3-methyl-3-buten-1-ol	niet in SL	763-32-6	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<0,5	1	<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 analyse op onledingsproduct 2-ethylhexanol (104-76-7)	B2	16111-62-9	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<0,5	<0,5	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	GCCH2042	<0,5	3	<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	GCCH2042	<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	GCCH2042	<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	GCCH2042	<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	107-13-1	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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	GCCH2042	<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
Butadieen	Z2	106-99-0	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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
Cyclobutane, methylene	Z2	1120-56-5	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042													
Di-cyclopentadiene DCPD	pZZS	77-73-6	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<0,2	<0,2	0,2	<0,2	0,2	<0,2	0,2	0,2	<0,2	0,3	0,2	<0,2	<0,2
Distillates (petroleum), light distillate hydrotreating process, low-boiling	Z1	68410-97-9	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5
ETBE	niet in SL	637-92-3	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<0,5	1	<0,5	<0,5	0,8	<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	GCCH2042	<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	GCCH2042	<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	123-51-3	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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
Koolstofdисульфide	B2 pZZS	75-15-0	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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
methyl tertialir butyl ether	A3 pZZS	1634-04-4	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<0,5	0,9	1	0,8	1	0,8	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
monovinylchloride	Z2	75-01-4	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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	GCCH2042	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5
naftaleen	Z2	91-20-3	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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	GCCH2042	60	4	<0,5	2	<0,5	0,7	70	3	25	1	20	<0,5	<0,5
o-xyleen	B1	95-47-6	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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	106-42-3	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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	GCCH2042	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	1,9	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
propyleenoxide	Z2	75-56-9	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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
Toluuen	B2	108-88-3	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	0,3	<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	GCCH2042	<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

	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 pZS	95-50-1	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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	GCCH2042	<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 pZS	106-46-7	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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 pZS	504-60-9	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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-methylnaphthalene	Z1	90-12-0	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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 pZS	78-93-3	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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-butoxyethanol	Z2	111-76-2	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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
3-methyl-3-buten-1-ol	niet in SL	763-32-6	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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 analyse op onledingsproduct 2-ethylhexanol (104-76-7)	B2	16111-62-9	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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	GCCH2042	<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	GCCH2042	<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-methylnaphthalene	Z1	91-57-6	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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	GCCH2042	<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	107-13-1	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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	GCCH2042	<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
Butadieen	Z2	106-99-0	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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
Cyclobutane, methylene	Z2	1120-56-5	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042									<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
Di-cyclopentadiene DCPD	pZS	77-73-6	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	0,5	<0,2	0,2	<0,2	<0,2	<0,2	0,4	0,6	<0,2	<0,2	0,2	0,3	<0,2
Distillates (petroleum), light distillate hydrotreating process, low-boiling	Z1	68410-97-9	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5
ETBE	niet in SL	637-92-3	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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	GCCH2042	<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	GCCH2042	<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	123-51-3	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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
Koolstofdioxide	B2 pZS	75-15-0	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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 pZS	1634-04-4	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	0,9	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	0,7	<0,5	<0,5	4	0,9	<0,5	<0,5
monovinylchloride	Z2	75-01-4	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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	GCCH2042	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5	<5
naftaleen	Z2	91-20-3	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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	GCCH2042	3	60	70	<0,5	<0,5	1	2	30	50	0,7	0,6	<0,5	35
o-xyleen	B1	95-47-6	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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	106-42-3	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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	GCCH2042	<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	GCCH2042	<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	GCCH2042	<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 pZS	108-05-4	P&T-GC-MS	effluent	GCCH2042	<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

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
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	✓	✗	✗	✗	✗
Legenda:	✗	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.

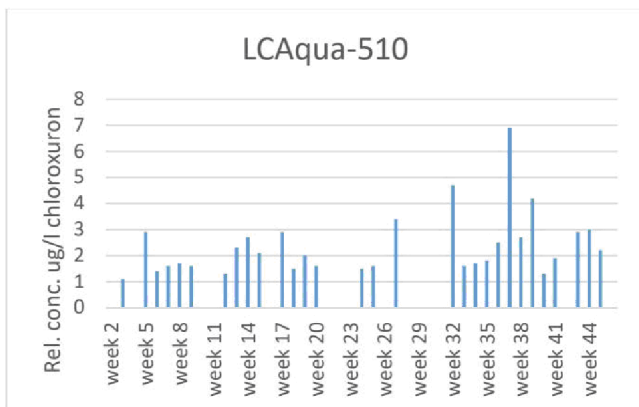
Resultaten

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
447	10,61	190,08545 122,04852 69,02133	C ₉ H ₁₀ N ₄ O C ₆ H ₆ N ₂ O C ₃ H ₃ NO	4,89	QTOF_20_0014 QTOF_20_0013 QTOF_SIT_21_0435
560	11,07	<i>Te lage concentraties</i>			
558	12,59	268,08811	C ₁₂ H ₁₆ N ₂ O ₃ S	5,97	QTOF_SIT_21_0074
539	13,40	194,10524	C ₁₀ H ₁₄ N ₂ O ₂	5,24	QTOF_SIT_21_0575
512	15,45	212,95372	C ₆ H ₄ BrN ₃ O	5,40	QTOF_SIT_21_0650
471	19,60	<i>Te lage concentraties</i>			
436	40,31	250,1542	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	11,44	QTOF_SIT_21_0576
295	42,95	278,18897	C ₁₇ H ₂₆ O ₃	12,05	QTOF_SIT_21_0006
196	18,45	218,11636	C ₁₁ H ₁₄ N ₄ 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 ₉ H ₁₇ NO ₅ S	4,92	QTOF_SIT_21_0266
191	13,14	274,04096	C ₁₃ H ₁₀ N ₂ O ₃ S	5,88	QTOF_SIT_21_0651 2-phenylbenzimidazolesulfonzuur

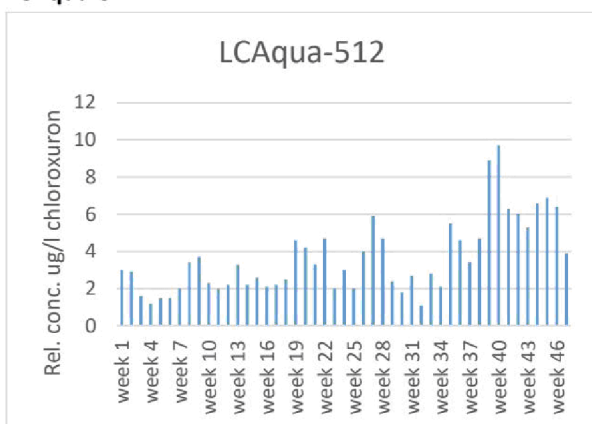
LCAqua-510



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 µg/l chloroxuron. Ook met negatieve ionisatie, alleen toegepast voor week 45, is geen enkel relevant MS-sigitaal 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-sigitaal geven, maar niet ioniseren.

LCAqua-512

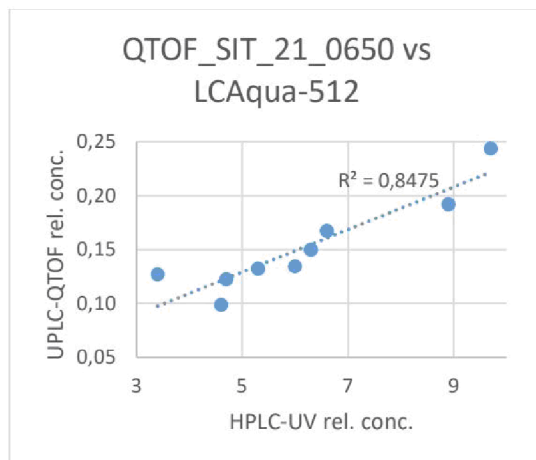


LCAqua-512 is, zoals te zien is in bovenstaand diagram, altijd aanwezig in het effluent. Wel zijn de relatieve concentraties in de laatste weken significant hoger dan in de eerste helft van het jaar. Met name de weekmonsters van de weken 39 en 40 boden perspectief om de bijbehorende massa te kunnen bepalen.

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 identificatielevel 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-sigitaal 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 massagevoeligheid 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 massaonvoelig. 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.

G2 Monitoringsgegevens UPLC-Orbitrap fusion screening zeer polaire componenten negatieve mode 2022

Monitoringscode	Substaam	ID#	Formule	Molecularweight	RT	ret. RT	2022-01	2022-02	2022-03	2022-04	2022-05	2022-06	2022-07	2022-08	2022-09	2022-10	2022-11	2022-12	2022-13	2022-14	2022-15	2022-16	2022-17	2022-18	2022-19	2022-20	2022-21	2022-22	2022-23	2022-24	2022-25	2022-26	2022-27	2022-28	2022-29	2022-30	2022-31	2022-32	
ST_PPS_NEG_001	H2SO4	4	H2SO4	98.079	5.12	1.312	2056.0	2049.0	2015.0	2003.0	1850.0	1750.0	1643.0	1513.0	1361.0	1209.0	1057.0	905.0	753.0	601.0	449.0	297.0	145.0	93.0	41.0	29.0	17.0	10.0	6.0	3.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

