

Waterschap Limburg

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

Datum	30.12.2021	Behandeld door	5.1.2e
Kenmerk	2021-WTW-IAZI0143	E-mailadres	5.1.2e @sitech.nl
Onderwerp	Aanvulling voortgangsrapportage melding voorschrift 29; onbekende stoffen	Telefoonnummer	+31 (0)6 5.1.2e

Geachte heer/mevrouw,

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

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

Bijgevoegd de voortgangsrapportage volgens voorschrift 29 lid 6 a.
De voortgangsrapportage is een aanvulling op de rapportage 2021-WTW-IAZI0122, dd. 17-11-2021.

Hopende u voldoende te hebben geïnformeerd,

In afwachting van uw reactie.

Sitech Services,

5.1.2e

Voortgangsrapportage identificatie 86 onbekende pieken in screenings.

1. Inleiding:

In de periode tussen 2 februari en 28 december 2021 zijn totaal 87 onbekende componenten gemeld welke in de verschillende screeningsmethoden 4 keer of meer met een relatieve concentratie > 2,2 µg/l zijn gemeten. Op het moment dat de exacte gegevens van LCAqua-447 bekend werd, bleek dat deze ook al als QTOF_20_0013 uit de UPLC-Qtof screening van AQZ was gemeld.

In deze rapportage wordt daarom de voortgang van deze 86 onbekende componenten beschreven.

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

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

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

Rapportage		voortgangsrapportage								
voorschrift	onderwerp	Aantal	Datum	6 weken		18 weken		30 weken		Datum opgestuurd
				plandatum	Datum opgestuurd	plandatum	Datum opgestuurd	plandatum	Datum opgestuurd	
29	2021-WTW-IAZ0013 Melding en Plan van aanpak identificatie 8 LCAqua componenten	8	2-feb-21	16-mrt-21	22-mrt-2021	8-jun-21	31-mei-21	31-aug-21	20-aug-21	
29	2021-WTW-IAZ0047 Melding en plan van aanpak identificatie LCAqua-196	1	16-apr-21	28-mei-21	31-mei-21	20-aug-21	20-8-2021	12-nov-21	17-nov-21	
29	2021-WTW-IAZ0048 Melding identificatie 6 componenten uit UPLC_Qtof screening polaire stoffen	5	20-apr-21	1-jun-21	31-mei-21	24-aug-21	20-8-2021	15-nov-21	17-nov-21	
29	2021-WTW-IAZ0051 Melding identificatie 11 componenten uit UPLC_Orbitrap screening zeer polaire stoffen	11	22-apr-21	8-jun-21	31-mei-21	26-aug-21	20-8-2021	18-nov-21	17-nov-21	
29	2021-WTW-IAZ0055 Melding 9 onbekende pieken in screening polaire stoffen UPLC-Qtof AQZ (3) en UPLC-Orbitrap KWR (6)	9	7-mei-21	18-aug-21	31-mei-21	10-sep-21	20-8-2021	3-dec-21	17-nov-21	
29	2021-WTW-IAZ0063 Melding 5 onbekende pieken in screening polaire stoffen UPLC-Qtof AQZ (4) en LC-UV AQZ (1)	5	8-jun-21	20-aug-21	4-aug-21	12-okt-21	20-8-2021	4-jan-22		
29	2021-WTW-IAZ0072 Melding 9 onbekende pieken in screening polaire stoffen UPLC-Qtof AQZ (2) en KWR (7)	9	7-jul-21	18-aug-21	4-aug-21	10-nov-21	20-8-2021	2-feb-22		
29	2021-WTW-IAZ0085 Melding 2 onbekende pieken in screening polaire stoffen UPLC-Qtof AQZ (1) en KWR (1)	2	26-aug-21	7-okt-21	7-okt-21	30-dec-21		24-mrt-22		
29	2021-WTW-IAZ0105 Melding 7 onbekende pieken in screening polaire stoffen UPLC-Qtof AQZ (4) en KWR (3)	7	30-sep-21	11-nov-21	17-nov-21	3-feb-22		28-apr-22		
29	2021-WTW-IAZ0100 Melding 4 onbekende pieken in screening polaire stoffen LC-UV AQZ (1), UPLC-Qtof AQZ (2) en KWR (1)	4	16-nov-21	28-dec-21		22-mrt-22		14-jun-22		
29	2021_WTW_IAZ0134 Melding 14 onbekende pieken in screening zeer polaire stoffen UPLC-Orbitrap KWR	14	8-dec-21	19-jan-22		13-apr-22		6-jul-22		
29	2021_WTW_IAZ0139 Melding 11 onbekende pieken in screening zeer polaire stoffen UPLC-Orbitrap KWR	11	28-dec-21	8-feb-22		3-mei-22		26-jul-22		

2. Identificatie

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

AQZ heeft in januari 2021 opdracht ontvangen voor de vaststelling van de exacte massa en bruto formule van de 8 LCAqua componenten, deze opdracht is intussen uitgebreid naar 12.

Bij de aanbieding zijn door AQZ onderstaande opmerkingen gemaakt:

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

- **Disclaimer:**

Het zou kunnen zijn dat er meerdere massa's gevonden worden in de verschillende fracties, waarbij het niet mogelijk is om tot 1 m/z en bruto formule te komen voor een LCAqua-code. In dat geval zullen meerdere opties worden opgenomen in de rapportage, met eventuele informatie over de waarschijnlijkheid welke bruto formule bij de code hoort. Uiteraard is het ook mogelijk dat de HPLC-UV piek bestaat uit een mengsel van pieken die per definitie meerdere massa's geven.

Status punten per 30 december 2021:

Door AQZ zijn de exacte massa en bruto formule van 9 van de 12 onbekende LCAqua componenten gerapporteerd, zie tabel 1 en bijlage 1.

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

Tabel 1 : Exacte massa en bruto formule LCAqua componenten

LC-UV screening AQZ				
Component	Kreti	M	Bruto formule	2021 gem. gehalte [µg/l]
LCAqua-447*	10,61	190,08545	C9H10N4O	5,5
		122,04852	C6H6N2O	
		69,02133	C3H3NO	
LCAqua-560*	11,07	Te lage concentraties		1,5
LCAqua-558*	12,59	268,08811	C12H16N2O3S	1,6
LCAqua-539*	13,40	177,07871	C10H11NO2	2,7
LCAqua-512*	15,45	212,95372	C6H4BrN3O	3,7
LCAqua-471*	19,60	Te lage concentraties		2,1
LCAqua-436*	40,31	250,1542	C15H22O3	1,6
LCAqua-295*	42,95	278,18897	C17H26O3	2,3
LCAqua-196*	18,47	218,1169	C11H14N4O	3,7
LCAqua-510*	29,43	Geen massa's gevonden, noch met positieve, noch met negatieve ionisatie		2,6
LCAqua-191*	13,11	2-phenylbenzimidazole sulfonzuur CAS# 27503-81-7		3,2
LCAqua-571	13,10	250,0752	C9H17NO5S	5,5

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

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

Op basis van de gerapporteerde exacte massa en bruto formule van de 9 LCAqua componenten is vastgesteld dat deze niet voorkomen op de stoffenlijst (bijlage 4 uit de vergunning).

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

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

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

Status punten per 30 december 2021:

Voor de bepaling of onbekende componenten, gevonden in het effluent van de IAZI, in het influent of in een of meerdere hoofdriolen op de Chemelot site aanwezig zijn, zijn van 2 periodes week mengmonsters voor de NTS screening aangeboden bij AQZ en KWR.

De periodes waarvan week mengmonsters zijn aangeboden zijn:

- a) Week 25 t/m 28
- b) Week 42 t/m 45

Van beide series van afvalwater monsters zijn de NTS screening uitgevoerd, waarvan de laatste serie nog niet gerapporteerd is door KWR.

De kwalitatieve beoordeling van de aanwezigheid van de te identificeren onbekende stoffen ten aanzien van de aanwezigheid in het influent en de 6 hoofdriolen is gegeven in bijlage B.

Eerste voorlopige conclusie:

Op basis van de eerste resultaten kunnen al de eerste voorlopige conclusies getrokken worden.

Deze conclusies zijn:

- a) Er is nog geen conclusie te trekken op basis van de nu bekende gegevens.
- b) De onbekende component is een metaboliet van een andere component welke in de IAZI gevormd wordt,
- c) De onbekende component komt in het influent en in een of meer van de 6 hoofdriolen voor.
- d) De exacte massa van een LCAqua component is nog niet bepaald of is niet te bepalen.
- e) Geïdentificeerde componenten.

In tabel 3 is voor de 86 gemelde componenten gegeven welke voorlopige conclusie van toepassing is.

Het zijn 88 onbekende componenten totaal omdat bepaald is de onbekende component LCAqua-447 een samenstel is van 3 verschillende componenten met verschillende massa's en bruto formule.

Tabel 3 voorlopige conclusies voor de gemelde onbekende stoffen.

Component	Component	M	Bruto formule	RT
a) Er is nog geen conclusie te trekken op basis van de nu bekende gegevens.				
LCAqua-447*	QTOF_SIT_21_0435	69,02133	C3H3NO	4,893
LCAqua-512*	QTOF_SIT_21_0650	212,95372	C6H4BrN3O	5,4
LCAqua-436*	QTOF_SIT_21_0576	250,15618	C15H22O3	11,44
	QTOF_SIT_21_0149	149,08412	C9H11NO	5,269
	QTOF_SIT_21_0260	135,04372	C6H5N3O	4,397
	QTOF_SIT_21_0565	191,09235	C8H14O5	4,885
	ST_ZPS_POS_015	165,1152	C10H15NO	9,53
	ST_ZPS_POS_017	168,0898	C8H12N2O2	5,61
	ST_ZPS_POS_020	198,09674	C10H12F2N2	6,87
	ST_ZPS_POS_026	220,09536	C10H12N4O2	3,64
	ST_ZPS_POS_033	199,12061	C10H17NO3	11,12
	ST_ZPS_POS_037	240,14365	C13H18F2N2	9,87
	ST_ZPS_POS_057	219,10027	C11H13N3O2	3,48
	ST_ZPS_POS_062	283,99008	nbn	4,85
	ST_ZPS_POS_063	210,13627	C11H18N2O2	10,40
	ST_ZPS_POS_064	217,96719	nbn	10,19
	ST_ZPS_POS_144	187,03024	C7H9NO3S	3,41
	ST_ZPS_NEG_024	238,05101	C8H14O6S	2,98
	ST_ZPS_NEG_027	168,84379	nbn	10,16
	ST_ZPS_NEG_028	209,07985	C9H11N3O3	6,45
	ST_ZPS_NEG_059	232,09551	C11H12N4O2	4,467
	ST_ZPS_NEG_060	246,03058	C8H10N2O5S	2,41
	ST_ZPS_NEG_075	234,05597	C9H14O5S	6,24

Component	Component	M	Bruto formule	RT
	ST_ZPS_NEG_076	246,03087	C8H10N2O5S	2,502
	ST_ZPS_NEG_078	141,96822	nmb	3,234
	ST_ZPS_NEG_080	178,02989	nmb	5,188
	ST_ZPS_NEG_084	238,05084	nmb	5,47
	ST_ZPS_NEG_088	171,94993	C9H14O5S	2,78
	ST_ZPS_NEG_092	178,02984	nmb	4,329
	ST_ZPS_NEG_093	283,99051	nmb	4,394
	ST_ZPS_NEG_094	330,04208	C14H10N4O4S	5,35
	ST_ZPS_NEG_110	238,05089	C10H11N2O3P	6,11
b) De onbekende component is een metaboliet van een andere component welke in de IAZI gevormd wordt				
LCAqua-447*	QTOF_20_0014	190,08545	C9H10N4O	4,893
LCAqua-447*	QTOF_20_0013	122,0486	C6H6N2O	4,89
LCAqua-539*	QTOF_SIT_21_0575	177,07871	C10H11NO2	5,24
LCAqua-196*	QTOF_SIT_21_0097	218,1169	C11H14N4O	5,541
LCAqua-571	QTOF_SIT_21_0266	250,0752	C9H17NO5S	4,92
	QTOF_20_0010	166,06324	C9H10O3	4,493
	QTOF_SIT_21_0103	236,127	C10H20O6	5,038
	QTOF_SIT_21_0128	183,13718	C9H17N3O	2,811
	QTOF_SIT_21_0157	132,058	C9H8O	5,251
	QTOF_SIT_21_0164	185,11648	C8H15N3O2	2,877
	QTOF_SIT_21_0175	187,06644	C8H13NO2S	3,267
	QTOF_SIT_21_0194	150,07953	C8H10N2O	5,542
	QTOF_SIT_21_0243	135,04313	C6H5N3O	4,412
	QTOF_SIT_21_0597	138,06668	C6H7N3O	2,648
	QTOF_SIT_21_0599	194,11631	C9H14N4O	3,11
	ST_ZPS_POS_012	236,12716	C11H16N4O2	3,50
	ST_ZPS_NEG_014	220,04042	C8H12O5S	6,92
	ST_ZPS_NEG_021	237,99685	nmb	2,83
c) De onbekende component komt in het influent en in een of meer van de 6 hoofdriolen voor				
LCAqua-558*	QTOF_SIT_21_0074	268,08811	C12H16N2O3S	5,97
LCAqua-295*	QTOF_SIT_21_0006	278,18837	C17H26O3	12,05
	QTOF_SIT_21_0047	222,18409	C12H22N4	4,662
	QTOF_SIT_21_0132	168,12625	C9H16N2O	4,772
	QTOF_SIT_21_0138	166,1106	C9H14N2O	6,485
	QTOF_SIT_21_0178	140,1073	C8H13NO	6,476
	QTOF_SIT_21_0233	192,05664	C6H12N2O3S	3,692
	QTOF_SIT_21_0242	107,06082	C6H6N2	5,550
	ST_ZPS_POS_005	228,1473	C11H20N2O3	10,37
	ST_ZPS_POS_006	220,13225	C11H16N4O	5,10
	ST_ZPS_POS_008	206,14175	C12H18N2O	2,90
	ST_ZPS_POS_009	186,11556	C12H14N2	5,68
	ST_ZPS_POS_023	201,98967	nmb	9,88
	ST_ZPS_POS_055	194,95131	nmb	10,13
	ST_ZPS_NEG_003	170,91595	nmb	2,89
	ST_ZPS_NEG_004	230,0902	C9H14N2O5	3,95
	ST_ZPS_NEG_005	210,01973	C6H10O6S	2,84
	ST_ZPS_NEG_007	231,9226	nmb	2,80
	ST_ZPS_NEG_008	257,98675	nmb	5,16
	ST_ZPS_NEG_009	212,07966	C9H12N2O4	4,86

Component	Component	M	Bruto formule	RT
	ST_ZPS_NEG_010	212,07966	C9H12N2O4	4,11
	ST_ZPS_NEG_011	260,00233	n nb	4,86
	ST_ZPS_NEG_012	230,0902	C9H14N2O5	3,50
	ST_ZPS_NEG_013	226,02668	n nb	7,85
	ST_ZPS_NEG_016	138,03066	C5H4N3O2	7,07
	ST_ZPS_NEG_018	181,9286	n nb	9,62
	ST_ZPS_NEG_019	233,89044	n nb	9,49
	ST_ZPS_NEG_020	212,07964	C9H12N2O4	5,64
	ST_ZPS_NEG_023	212,07964	C9H12N2O4	5,30
	ST_ZPS_NEG_036	233,89044	n nb	9,57
	ST_ZPS_NEG_041	304,02778	n nb	4,18
	ST_ZPS_NEG_042	260,0018	n nb	4,39
	ST_ZPS_NEG_046	279,92195	n nb	9,88
d) De exacte massa van een LCAqua component is nog niet bepaald of is niet te bepalen				
LCAqua-560*	Te lage concentraties			
LCAqua-471*	Te lage concentraties			
LCAqua-510*	Geen massa's gevonden, noch met positieve, noch met negatieve ionisatie			
e) Geïdentificeerde componenten				
LCAqua-191*	2-phenylbenzimidazole sulfonzuur	274,04096	C13H10N2O3S	5,88

Op dit moment is nog geen rapportage van KWR ontvangen van de NTS screening polaire stoffen van de afvalwater monsters van week 42 t/m 45. Op basis van die extra informatie is de verwachting dat het aantal componenten, waarvoor nog geen voorlopige conclusie te trekken is, duidelijk zal verminderen.

Na de rapportage door KWR van de set afvalwater monsters van week 42 t/m 45 zal de focus richting de fabrieken komen te liggen om definitief vast te stellen van welke fabriek de onbekende component afkomstig is. Daarnaast is bij AQZ en KWR gevraagd welke ondersteuning er mogelijk is bij de onbekende stoffen welke wel in het effluent maar niet in het influent aanwezig zijn.

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

Status 30 december 2021:

De analyse van het influent en hoofdriool monsters van de weken 25 t/m 18 en 42 t/m 45 zijn uitgevoerd en loopt door, volgens de planning welke beschreven is in hoofdstuk 2, tot dat de bron van de component bekend is. Het moment van definitief vast stellen van de bron kan voor elke component verschillend zijn. Het is op voorhand niet zeker dat een identificatie van een onbekende component tot het verwachte resultaat leidt.

In Q1 van 2022 zullen in overleg met de fabrieken welke lozen op het hoofdriool, waarin onbekende stoffen aangetoond zijn, monsters genomen worden van de fabrieken welke bij AQZ en/of KWR gescreend worden op de relevante onbekende stoffen om definitief vast te stellen wat de bron(nen) is/zijn.

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

4. Met de standaard kan de juiste concentratie van de onbekende component in het effluent van de IAZI bepaald worden.

4. Beoordelen geïdentificeerde nieuwe stof.

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

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

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

5. Bijlagen

- A. Overzicht van de 86 componenten waarvoor de identificatie gestart is.
- B. Tracering onbekende componenten

Bijlage A : Overzicht van de componenten waarvoor de identificatie gestart is

LC-UV screening AQZ				Non target screening AQZ				Non target screening KWR						
Component	Kreti	M	Bruto formule	2021 gem. gehalte [µg/l]	Component	M	Bruto formule	RT	2021 gem. gehalte [µg/l]	Component	M	Bruto formule	RT	2021 gem. gehalte [µg/l]
LCAqua-447*	10,61	190,08545	C9H10N4O	5,5	QTOF_20_0014	190,08545	C9H10N4O	4,893	0,4	ST_ZPS_POS_032				
		122,04852	C6H6N2O		QTOF_20_0013	122,0486	C6H6N2O	4,89	0,1	ST_ZPS_POS_004				
		69,02133	C3H3NO		QTOF_SIT_21_0435	69,02133	C3H3NO	4,893	0,1					
LCAqua-560*	11,07	Te lage concentraties		1,5	LCAqua-560*	Te lage concentraties								
LCAqua-558*	12,59	268,08811	C12H16N2O3S	1,6	QTOF_SIT_21_0074	268,08811	C12H16N2O3S	5,97						
LCAqua-539*	13,40	177,07871	C10H11NO2	2,7	QTOF_SIT_21_0575	177,07871	C10H11NO2	5,24	0,1	ST_ZPS_POS_016				
LCAqua-512*	15,45	212,95372	C6H4BrN3O	3,7	QTOF_SIT_21_0650	212,95372	C6H4BrN3O	5,4						
LCAqua-471*	19,60	Te lage concentraties		2,1	LCAqua-471*	Te lage concentraties								
LCAqua-436*	40,31	250,1542	C15H22O3	1,6	QTOF_SIT_21_0576	250,15618	C15H22O3	11,44						
LCAqua-295*	42,95	278,18897	C17H26O3	2,3	QTOF_SIT_21_0006	278,18897	C17H26O3	12,05						
LCAqua-196*	18,47	218,1169	C11H14N4O	3,7	QTOF_SIT_21_0097	218,1169	C11H14N4O	5,541	3,0					
LCAqua-510*	29,43	Geen massa's gevonden, noch met positieve, noch met negatieve ionisatie		2,6	LCAqua-510*	Geen massa's gevonden, noch met positieve, noch met negatieve ionisatie								
LCAqua-191*	13,11	2-phenylbenzimidazole sulfonzuur CAS# 27503-81-7		3,2	QTOF_SIT_21_0651	274,04096	C13H10N2O3S	5,88						
LCAqua-671	13,10	250,0752	C9H17NO5S	5,5	QTOF_SIT_21_0266	250,0752	C9H17NO5S	4,92	1,2					
totaal	12	onbekende stoffen gemeld			QTOF_20_0010	166,06324	C9H10O3	4,493	0,3					
					QTOF_SIT_21_0047	222,18409	C12H22N4	4,662	0,0					
					QTOF_SIT_21_0103	236,127	C10H20O6	5,038	0,0	ST_ZPS_POS_007	168,1261	C9H16N2O	4,63	12,3
					QTOF_SIT_21_0128	183,13718	C9H17N3O	2,811	0,0					
					QTOF_SIT_21_0132	168,12625	C9H16N2O	4,772	0,0					
					QTOF_SIT_21_0138	166,1106	C9H14N2O	6,485	0,2					
					QTOF_SIT_21_0149	149,08412	C9H11NO	5,269	0,3					
					QTOF_SIT_21_0157	132,058	C9H8O	5,251	0,3					
					QTOF_SIT_21_0164	185,11648	C8H15N3O2	2,877	0,1					
					QTOF_SIT_21_0175	187,06644	C8H13NO2S	3,267	0,2					
					QTOF_SIT_21_0178	140,1073	C8H13NO	6,476	0,0					
					QTOF_SIT_21_0194	150,07953	C8H10N2O	5,542	0,2					
					QTOF_SIT_21_0233	192,05664	C6H12N2O3S	3,692	0,1	ST_ZPS_POS_018				
					QTOF_SIT_21_0242	107,06082	C6H6N2	5,550	0,1					
					QTOF_SIT_21_0243	135,04313	C6H5N3O	4,412	0,1					
					QTOF_SIT_21_0260	135,04372	C6H5N3O	4,397	0,1					
					QTOF_SIT_21_0565	191,09235	C8H14O5	4,885	0,7					
					QTOF_SIT_21_0597	138,06668	C6H7N3O	2,648	1,2					
					QTOF_SIT_21_0599	194,11631	C9H14N4O	3,11	0,1					
					totaal	20	onbekende stoffen gemeld			ST_ZPS_NEG_003	170,916	nmb	2,89	16,5
										ST_ZPS_NEG_004	230,0902	C9H14N2O5	3,95	7,8
										ST_ZPS_NEG_005	210,0197	C6H10O6S	2,84	19,7
										ST_ZPS_NEG_007	231,9226	nmb	2,80	8,6
										ST_ZPS_NEG_008	257,9868	nmb	5,16	9,6
										ST_ZPS_NEG_009	212,0797	C9H12N2O4	4,86	4,9
										ST_ZPS_NEG_010	212,0797	C9H12N2O4	4,11	6,0
										ST_ZPS_NEG_011	260,0023	nmb	4,86	8,7
										ST_ZPS_NEG_012	230,0902	C9H14N2O5	3,50	4,5
										ST_ZPS_NEG_013	226,0267	nmb	7,85	5,1
										ST_ZPS_NEG_014	220,0404	C8H12O5S	6,92	7,6
										ST_ZPS_NEG_016	138,0307	C5H4N3O2	7,07	2,2
										ST_ZPS_NEG_018	181,9286	nmb	9,62	6,9
										ST_ZPS_NEG_019	233,8904	nmb	9,49	10,5
										ST_ZPS_NEG_020	212,0796	C9H12N2O4	5,64	5,4
										ST_ZPS_NEG_021	237,9969	nmb	2,83	4,6
										ST_ZPS_NEG_023	212,0796	C9H12N2O4	5,30	4,1
										ST_ZPS_NEG_024	238,051	C8H14O6S	2,98	3,3
										ST_ZPS_NEG_027	168,8438	nmb	10,16	3,3
										ST_ZPS_NEG_028	209,0799	C9H11N3O3	6,45	4,2
										ST_ZPS_NEG_036	233,8904	nmb	9,57	11,5
										ST_ZPS_NEG_041	304,0278	nmb	4,18	7,7
										ST_ZPS_NEG_042	260,0018	nmb	4,39	5,5
										ST_ZPS_NEG_046	279,922	nmb	9,88	7,0
										ST_ZPS_NEG_059	232,0955	C11H12N4O2	4,47	5,3
										ST_ZPS_NEG_060	246,0306	C8H10N2O5S	2,41	7,7
										ST_ZPS_NEG_075	234,056	C9H14O5S	6,24	2,2
										ST_ZPS_NEG_076	246,0309	C8H10N2O5S	2,50	11,7
										ST_ZPS_NEG_078	141,9682	nmb	3,23	6,6
										ST_ZPS_NEG_080	178,0299	nmb	5,19	8,1
										ST_ZPS_NEG_084	238,0508	nmb	5,47	7,2
										ST_ZPS_NEG_088	171,9499	C9H14O5S	2,78	2,4
										ST_ZPS_NEG_092	178,0298	nmb	4,33	3,5
										ST_ZPS_NEG_093	283,9905	nmb	4,39	3,6
										ST_ZPS_NEG_094	330,0421	C14H10N4O4S	5,35	4,1
										ST_ZPS_NEG_110	238,0509	C10H11N2O3P	6,11	3,7
										ST_ZPS_POS_005	228,1473	C11H20N2O3	10,37	14,5
										ST_ZPS_POS_006	220,1323	C11H16N4O	5,10	6,7
										ST_ZPS_POS_008	206,1418	C12H18N2O	2,90	3,5
										ST_ZPS_POS_009	186,1156	C12H14N2	5,68	4,2
										ST_ZPS_POS_012	236,1272	C11H16N4O2	3,50	4,8
										ST_ZPS_POS_015	165,1152	C10H15NO	9,53	2,7
										ST_ZPS_POS_017	168,0898	C8H12N2O2	5,61	11,7
										ST_ZPS_POS_020	198,0967	C10H12F2N2	6,87	2,1
										ST_ZPS_POS_023	201,9897	nmb	9,88	4,1
										ST_ZPS_POS_026	220,0954	C10H12N4O2	3,64	6,1
										ST_ZPS_POS_033	199,1206	C10H17NO3	11,12	3,0
										ST_ZPS_POS_037	240,1437	C13H18F2N2	9,87	2,3
										ST_ZPS_POS_055	194,9513	nmb	10,13	5,2
										ST_ZPS_POS_057	219,1003	C11H13N3O2	3,48	9,4
										ST_ZPS_POS_062	283,9901	nmb	4,85	7,2
										ST_ZPS_POS_063	210,1363	C11H18N2O2	10,40	2,8
										ST_ZPS_POS_064	217,9672	nmb	10,19	2,9
										ST_ZPS_POS_144	187,0302	C7H9NO3S	3,41	5,8
					totaal	54	onbekende stoffen gemeld							

Bijlage B : Tracering onbekende componenten

Component	lgnumm	Component	M	Bruto formule	RT	geïdentificeerde component	Monsters influent en hoofdriolen wk 25-26-27-28								Monsters influent en hoofdriolen wk 42-43-44-45							
							Aangeetoond in effluent ja/nee	Aangeetoond in Inluent ja/nee	Aangeetoond Elserheid ja/nee	Aangeetoond Kerensheid ja/nee	Aangeetoond zuid riool ja/nee	Aangeetoond pr riool zuid ja/nee	Aangeetoond midden riool ja/nee	Aangeetoond pr riool noord ja/nee	Aangeetoond in effluent ja/nee	Aangeetoond in Inluent ja/nee	Aangeetoond Elserheid ja/nee	Aangeetoond Kerensheid ja/nee	Aangeetoond zuid riool ja/nee	Aangeetoond pr riool zuid ja/nee	Aangeetoond midden riool ja/nee	Aangeetoond pr riool noord ja/nee
LCaqua-447*	1	QTOF_20_0014	190,08545	C9H10N4O	4,893		ja							ja								
LCaqua-447*	2	QTOF_20_0013	122,0486	C6H6N2O	4,89		ja							ja								
LCaqua-447*	3	QTOF_SIT_21_0435	69,02133	C3H3NO	4,893		nee							?								
LCaqua-560*	4	Te lage concentraties																				
LCaqua-558*	5	QTOF_SIT_21_0074	268,08811	C12H16N2O3S	5,97		nee	ja			ja			ja	ja		ja	ja				
LCaqua-539*	6	QTOF_SIT_21_0575	177,07871	C10H11NO2	5,24		ja							nee								
LCaqua-512*	7	QTOF_SIT_21_0650	212,95372	C6H4BrN3O	5,4		nee							nee	nee							
LCaqua-471*	8	Te lage concentraties																				
LCaqua-436*	9	QTOF_SIT_21_0576	250,15618	C15H22O3	11,44		nee							nee								
LCaqua-295*	10	QTOF_SIT_21_0006	278,18837	C17H26O3	12,05		nee							ja	ja	ja	?	?				
LCaqua-196*	11	QTOF_SIT_21_0097	218,1169	C13H14N4O	5,541		ja							ja								
LCaqua-510*	12	Geen massa's gevonden, noch met positieve, noch met negatieve ionisatie																				
LCaqua-191*	13	2-phenylbenzimidazole sulfonzuur	274,04096	C13H10N2O3S	5,88	2-phenylbenzimidazole sulfonzuur	nee							nee								
LCaqua-571	14	QTOF_SIT_21_0266	250,0752	C9H17NO5S	4,92		ja							ja								
	15	QTOF_20_0010	166,06324	C9H10O3	4,493		ja							nee								
	16	QTOF_SIT_21_0047	222,18409	C12H22N4	4,662		ja	ja	ja	ja				ja	ja	ja	?	?				
	17	QTOF_SIT_21_0103	236,127	C10H20O6	5,038		nee							ja	ja	ja						
	18	QTOF_SIT_21_0128	183,13718	C9H17N3O	2,811		ja							ja								
	19	QTOF_SIT_21_0132	168,12625	C8H16N2O	4,772		ja	ja					ja	ja	ja	?	?	?				
	20	QTOF_SIT_21_0138	166,1106	C9H14N2O	6,485		ja	ja					ja	ja	ja			ja				
	21	QTOF_SIT_21_0149	149,08412	C8H11NO	5,269		nee							nee	ja			ja				
	22	QTOF_SIT_21_0157	132,058	C9H8O	5,251		ja							ja								
	23	QTOF_SIT_21_0164	185,11648	C8H15N3O2	2,877		ja							ja								
	24	QTOF_SIT_21_0175	187,06644	C8H13NO2S	3,267		ja							ja								
	25	QTOF_SIT_21_0178	140,1073	C8H13NO	6,476		ja							ja	ja	?		ja				
	26	QTOF_SIT_21_0194	150,07953	C8H10N2O	5,542		ja							nee								
	27	QTOF_SIT_21_0233	192,05664	C6H12N2O3S	3,692		ja	ja		ja	ja			ja	ja		ja	?				
	28	QTOF_SIT_21_0242	107,06082	C6H6N2	5,550		ja	ja						ja	ja	?	?	ja				
	29	QTOF_SIT_21_0243	135,04313	C6H5N3O	4,412		ja							ja								
	30	QTOF_SIT_21_0260	135,04372	C6H5N3O	4,397		nee							nee								
	31	QTOF_SIT_21_0265	191,09235	C8H14O5	4,885		nee							nee								
	33	QTOF_SIT_21_0297	138,06668	C6H7N3O	2,648		ja							?								
	34	QTOF_SIT_21_0299	194,11631	C9H14N4O	3,11		ja							ja								
	35	ST_ZPS_POS_005	228,1473	C13H20N2O3	10,37		ja	ja						ja								
	36	ST_ZPS_POS_006	220,13225	C13H16N4O	5,10		ja	ja						ja								
	37	ST_ZPS_POS_008	206,14175	C12H18N2O	2,90		ja	ja			ja	ja										
	38	ST_ZPS_POS_009	186,11556	C12H14N2	5,68		ja	ja			ja											
	39	ST_ZPS_POS_012	236,12716	C13H16N4O2	3,50		ja															
	40	ST_ZPS_POS_015	165,1152	C10H15NO	9,53																	
	41	ST_ZPS_POS_017	168,0898	C8H12N2O2	5,61																	
	42	ST_ZPS_POS_020	198,09674	C10H12F2N2	6,87																	
	43	ST_ZPS_POS_023	201,88967	nmb	9,88		ja	ja	ja	ja	ja	ja										
	44	ST_ZPS_POS_026	220,09536	C10H12N4O2	3,64																	
	45	ST_ZPS_POS_033	199,12061	C10H17NO3	11,12																	
	46	ST_ZPS_POS_037	240,14365	C13H18F2N2	9,87																	
	47	ST_ZPS_POS_055	194,95131	nmb	10,13		ja	ja	ja	ja	ja	ja										
	48	ST_ZPS_POS_057	219,10027	C13H13N3O2	3,48																	
	49	ST_ZPS_POS_062	283,99008	nmb	4,85																	
	50	ST_ZPS_POS_063	210,13627	C13H18N2O2	10,40																	
	51	ST_ZPS_POS_064	217,96719	nmb	10,19																	
	52	ST_ZPS_POS_144	187,03024	C7H9NO3S	3,41																	
	53	ST_ZPS_NEG_003	170,91595	nmb	2,89		ja	ja	ja	ja	ja	ja										
	54	ST_ZPS_NEG_004	230,0902	C9H14N2O5	3,95		ja	ja						ja								
	55	ST_ZPS_NEG_005	210,01973	C6H10O6S	2,84		ja	ja	ja													
	56	ST_ZPS_NEG_007	231,9226	nmb	2,80		ja	ja		ja	ja											
	57	ST_ZPS_NEG_008	257,98675	nmb	5,16		ja	ja		ja	ja			ja								
	58	ST_ZPS_NEG_009	212,07966	C9H12N2O4	4,86		ja	ja						ja								
	59	ST_ZPS_NEG_010	212,07966	C9H12N2O4	4,11		ja	ja						ja								
	60	ST_ZPS_NEG_011	260,00233	nmb	4,86		ja	ja	ja													
	61	ST_ZPS_NEG_012	230,0902	C9H14N2O5	3,50		ja	ja						ja								
	62	ST_ZPS_NEG_013	226,02668	nmb	7,85		ja	ja				ja										
	63	ST_ZPS_NEG_014	220,04042	C8H12O5S	6,92		ja															
	64	ST_ZPS_NEG_016	138,03066	C5H4N3O2	7,07		ja	ja					ja									
	65	ST_ZPS_NEG_018	181,9286	nmb	9,62		ja	ja	ja	ja	ja	ja										
	66	ST_ZPS_NEG_019	233,89044	nmb	9,49		ja	ja	ja	ja	ja	ja										
	67	ST_ZPS_NEG_020	212,07964	C9H12N2O4	5,64		ja	ja						ja								
	68	ST_ZPS_NEG_021	237,99685	nmb	2,83		ja															
	69	ST_ZPS_NEG_023	212,07964	C9H12N2O4	5,30		ja	ja						ja								
	70	ST_ZPS_NEG_024	238,05101	C8H14O6S	2,98																	
	71	ST_ZPS_NEG_027	168,84379	nmb	10,16																	
	72	ST_ZPS_NEG_028	209,07985	C9H11N3O3	6,45																	
	73	ST_ZPS_NEG_036	233,89044	nmb	9,57		ja	ja		ja	ja											
	74	ST_ZPS_NEG_041	304,02778	nmb	4,18		ja	ja	ja													
	75	ST_ZPS_NEG_042	260,0018	nmb	4,39		ja	ja	ja													
	76	ST_ZPS_NEG_046	279,92195	nmb	9,88		ja	ja		ja	ja											
	77	ST_ZPS_NEG_059	232,09551	C13H12N4O2	4,467																	
	78	ST_ZPS_NEG_060	246,03058	C8H10N2O5S	2,41																	
	79	ST_ZPS_NEG_075	234,05597	C9H14O5S	6,24																	
	80	ST_ZPS_NEG_076	246,03087	C8H10N2O5S	2,502																	
	81	ST_ZPS_NEG_078	141,96822	nmb	3,234																	
	82	ST_ZPS_NEG_080	178,02989	nmb	5,188																	
	83	ST_ZPS_NEG_084	238,05084	nmb	5,47																	
	84	ST_ZPS_NEG_088	171,94993	C9H14O5S	2,78																	
	85	ST_ZPS_NEG_092	178,02984	nmb	4,329																	
	86	ST_ZPS_NEG_093	283,99051	nmb	4,394																	
	87	ST_ZPS_NEG_094	330,04208	C14H10N4O4S	5,35																	
	88	ST_ZPS_NEG_110	238,05089	C10H11N2O3P	6,11																	