

**BTO 2006.038**  
13 juli 2006

# **Samenstellen top 100 prioritaire stoffen in rivierwater**

Opbouwen LC-DAD database

**BTO 2006.038**

13 juli 2006

# Samenstellen top 100 prioritaire stoffen in rivierwater

Opbouwen LC-DAD database

© 2006 Kiwa N.V.  
Alle rechten voorbehouden.  
Niets uit deze uitgave mag  
worden verveelvoudigd,  
opgeslagen in een  
geautomatiseerd  
gegevensbestand, of  
openbaar gemaakt, in enige  
vorm of op enige wijze,  
hetzij elektronisch,  
mechanisch, door  
fotokopieën, opnamen, of  
enig andere manier, zonder  
voorafgaande schriftelijke  
toestemming van de  
uitgever.

## **Kiwa Water Research**

Groningehaven 7  
Postbus 1072  
3430 BB Nieuwegein

Tel. 030 606 95 11  
Fax 030 606 11 65  
[www.kiwawaterresearch.eu](http://www.kiwawaterresearch.eu)

# Colofon

**Titel**

Database prioritaire stoffen in rivierwater

**Projectnummer**

111567030

**Projectmanager**

Corina de Hoogh

**Opdrachtgever**

BTO

**Kwaliteitsborger(s)**

Ariadne Hogenboom

**Auteur(s)**

Jeroen Huijzer

Dit rapport is verspreid onder BTO-participanten en is openbaar

# Samenvatting

Dit rapport beschrijft een inventariserend onderzoek naar het voorkomen van prioritaire stoffen in rivierwater. Hiervoor zijn verschillende bronnen geraadpleegd en de informatie over deze prioritaire stoffen aangetroffen in rivierwater is verwerkt in een database. Een top 100 lijst is samengesteld gebaseerd op het selectie criterium gemiddelde concentratie van een stof aangetroffen in rivierwater. Deze 100 stoffen zijn vervolgens geanalyseerd met behulp van Gradiënt LC-DAD. Verschillende loopvloeistoffen zijn gebruikt zoals Milli-Q / Acetonitril (neutraal milieu) en TFA / Acetonitril (zuur milieu) om zoveel mogelijk stoffen te analyseren. 77 van de 100 stoffen konden worden gedetecteerd met LC-DAD. De verkregen DAD spectra en KRetI's zijn opgeslagen in een Kiwa DAD-bibliotheek. In deze Kiwa DAD-bibliotheek zijn onbekende stoffen opgeslagen waarvan er een paar konden worden geïdentificeerd door de DAD spectra en KRetI's te matchen. De verkregen bibliotheek kan ook gebruikt worden voor identificatie van verbindingen in nieuwe rivierwatermonsters.

---

## Summary

This report describes an inventory research of the presence of priority compounds in river water. Different sources were consulted and information on these priority compounds found in river water were put in a database. A top 100 list was composed based on the selection criteria 'average concentration of a compound present in the water'. These 100 compounds were analyzed by Gradient LC-DAD hereby different LC-eluent were used such as milli-Q / Acetonitrile (neutral environment) and Trifluoroacetic acid (TFA) / Acetonitrile (acidic environment) in order to analyze as many compounds of the top 100 list. 77 of the 100 compounds could be detected with LC\_DAD. The DAD-spectra and KRetI of these compounds were saved in a Kiwa DAD-library. A few unknown compounds that were present in the Kiwa DAD-library could be identified by matching the spectra and KRetI's. The new DAD-library can also be used to identify new (un)known compounds in new river water samples.

---

# Inhoud

|          |   |           |
|----------|---|-----------|
|          | <b>Samenvatting</b>   | <b>1</b>  |
|          | <b>Summary</b>  | <b>2</b>  |
|          | <b>Inhoud</b>   | <b>3</b>  |
| <b>1</b> | <b>Inleiding</b>  | <b>5</b>  |
| 1.1      | Kiwa Water Research   | 5         |
| 1.2      | Chemische Waterkwaliteit en Gezondheid en Microbiologische Waterkwaliteit en Gezondheid | 5         |
| 1.3      | Prioritaire stoffen   | 6         |
| 1.4      | RIWA  | 6         |
| 1.5      | Doel  | 6         |
| <b>2</b> | <b>Materiaal en methoden</b>  | <b>7</b>  |
| 2.1      | Voorkomen bekende stoffen in rivierwater: opbouwen van een database                     | 7         |
| 2.2      | Top 100   | 9         |
| 2.3      | Analyse   | 9         |
| 2.3.1    | Oplossingen   | 9         |
| 2.3.2    | Analyse apparatuur  | 9         |
| 2.3.3    | Gradiënt  | 9         |
| 2.3.4    | Interne standaard methode   | 10        |
| 2.3.5    | Kiwa Retentietijd Index (KRetI)   | 10        |
| 2.3.6    | LC loopvloeistof condities: zuur en neutraal  | 11        |
| <b>3</b> | <b>Resultaten</b>   | <b>13</b> |
| 3.1      | Top 100 stoffen.  | 13        |
| 3.2      | Gevonden stoffen in top 100   | 13        |
| 3.2.1    | Bestrijdingsmiddelen  | 13        |
| 3.2.2    | Chloorfenoxy pesticiden   | 13        |
| 3.2.3    | Di-nitrofenol herbiciden  | 14        |
| 3.2.4    | N-methylcarbamaten  | 14        |
| 3.2.5    | OCB's   | 14        |
| 3.2.6    | Organofosfor- en Organozwavel pesticiden  | 14        |
| 3.2.7    | Fenylureumherbiciden  | 15        |
| 3.2.8    | Triazinen / Triazinonen / Aniliden  | 15        |
| 3.2.9    | Overige bestrijdingsmiddelen  | 15        |
| 3.2.10   | Farmaceutische middelen.  | 16        |
| 3.2.11   | Röntgencontrastmiddelen   | 16        |
| 3.2.12   | Vluchtige gehalogeneerde verbindingen   | 17        |
| 3.2.13   | Aromatische koolwaterstoffen  | 17        |
| 3.2.14   | MAK's   | 17        |
| 3.2.15   | PAK's   | 17        |

---

|           |   |           |
|-----------|---|-----------|
| 3.3       | Meetresultaten  | 18        |
| 3.3.1     | Blanco metingen   | 18        |
| 3.3.2     | Database  | 19        |
| 3.3.3     | Identificatie van onbekende stoffen uit de database.          | 19        |
| <b>4</b>  | <b>Conclusie</b>  | <b>21</b> |
| <b>5</b>  | <b>Aanbevelingen</b>  | <b>23</b> |
| 5.1       | Farmaceutische middelen                                       | 23        |
| 5.2       | Stoffen uit top 200 die niet aanwezig zijn bestellen en meten | 23        |
| 5.3       | Preconcentratie   | 23        |
| 5.4       | (GC of LC) MS   | 23        |
| <b>6</b>  | <b>Literatuur</b>   | <b>25</b> |
| 6.1       | Rapporten   | 25        |
| 6.2       | CD-Roms   | 25        |
| 6.3       | Internet  | 25        |
| <b>I</b>  | <b>Lijst Prioritaire stoffen VROM</b>                         | <b>27</b> |
| <b>II</b> | <b>Top 100 prioritaire stoffen</b>                            | <b>33</b> |

---

# 1 Inleiding

## 1.1 Kiwa Water Research

Kiwa Water Research levert de kennis en technologie die nodig zijn voor een optimale kwaliteit in watervoorziening en waterbeheer. Als internationaal toonaangevend kennisinstituut van, voor en met de drinkwaterbedrijven ontwikkelt en organiseert het onder meer kennis voor de zekerstelling van een onberispelijke drinkwaterkwaliteit, in nationaal en internationaal verband en van bron tot tap. De focus ligt op waterkwaliteit en gezondheid: Kiwa Water Research levert grenzeloze kennis voor gezond drinkwater.

Overheden, bedrijfsleven, waterbedrijven en andere spelers in de watersector kunnen nationaal en internationaal bij Kiwa Water Research terecht voor onderzoek, technologie en specialistische adviezen op een niveau dat past bij een topinstituut. Als adviseur van de adviseur ondersteunt Kiwa Water Research ook ingenieurs en adviseurs bij hun diensten in de watersector. De laboratoria van Kiwa Water Research ontwikkelen bepalingmethoden, adviseren, doen vergelijkende ringonderzoeken, en voeren specialistische en bijzondere analyses uit.

Het motto van Kiwa Water Research is dat 'Kennis waarde krijgt als je er iets mee doet'. Daarom rekent Kiwa Water Research strategische en specialistische advisering, adviseur van de adviseurdiensten, trouble shooting en performance evaluatie, en kwaliteitsborging tot haar kerntaken. Daarom worden internationaal voor andere spelers in de watersector en voor overheden en bedrijfsleven ook veel onderzoeksprojecten uitgevoerd, bijvoorbeeld gericht op duurzaamheidvraagstukken, waterkwaliteitsaspecten van het watersysteem, integratie van de waterketen, water op maat (smart water), en industriewater. Hier komt de marktfunctie van Kiwa Water Research tot uitdrukking.

## 1.2 Chemische Waterkwaliteit en Gezondheid en Microbiologische Waterkwaliteit en Gezondheid

Binnen Kiwa Water Research brengen de aandachtsvelden Chemische Waterkwaliteit en Gezondheid en Microbiologische Waterkwaliteit en Gezondheid alle aspecten in kaart die van bron tot tap van belang zijn voor de kwaliteit van drinkwater. De specialisten binnen deze aandachtsvelden ontwikkelen strategieën en methoden om de onberispelijke kwaliteit van drinkwater ook in de toekomst te borgen. De onderzoeks- en adviesprojecten zijn gericht op het vergroten en verspreiden van kennis van de chemische en microbiologische kwaliteit van drinkwater. Een belangrijk onderdeel daarvan is toepasbaar maken van moderne meettechnieken, die een steeds beter inzicht bieden in de stoffen en organismen die in het drinkwater kunnen voorkomen. Het water dat onderzocht wordt, is drinkwater maar ook water dat afkomstig is uit verschillende bronnen, zoals grondwater, oppervlaktewater en rivierwater.

---



### **1.3 Prioritaire stoffen**

In het kader van het eerste en tweede nationale Milieubeleidsplan (NMP1 en NMP2) is eind jaren tachtig een lijst van 50 prioritaire stoffen opgesteld die op dat moment zo gevaarlijk voor het milieu werden geacht dat voor deze stoffen met prioriteit maatregelen getroffen moesten worden ter vermindering van dat gevaar. De blootstelling aan sommige prioritaire stoffen, zoals fijn stof, asbest en radon, veroorzaakt in Nederland enkele duizenden voortijdige sterfgevallen per jaar.

In maart 2004 is een lijst met 162 aanvullende prioritaire stoffen vastgesteld. Het betreft stoffen die op één of meer internationale stoffenlijsten staan en die op basis van hun stofeigenschappen reden zijn voor 'zeer ernstige zorg'. De prioritaire stoffenlijst wordt, behalve in bijzondere omstandigheden, één maal per 5 jaar herzien. In het najaar van 2006 zal een voortgangsrapportage over prioritaire stoffen aan de Tweede Kamer worden gezonden. Deze rapportage zal een geactualiseerde lijst bevatten van prioritaire stoffen.

Zie bijlage 1 voor de huidige lijst met Prioritaire stoffen opgesteld door het VROM.

### **1.4 RIWA**

De RIWA, Vereniging van Rivierwaterbedrijven, is ruim 50 jaar geleden opgericht als samenwerkingsverband van Nederlandse waterleidingbedrijven, die oppervlaktewater gebruiken voor de bereiding van drinkwater. Met ingang van 2002 worden binnen de RIWA drie secties onderscheiden voor Rijn, Maas en Schelde, verenigd in een koepel. Elke sectie behartigt de drinkwaterbelangen in zijn stroomgebied: kwaliteitsontwikkeling, onderzoek, rapportage, voorlichting en acties. Per stroomgebied worden deze activiteiten vastgesteld, gefinancierd en uitgevoerd.

Het RIWA houdt zich onder andere bezig met het monitoren van een groot aantal prioritaire stoffen in de rivieren Rijn en Maas en hun zijrivieren. Deze gegevens worden jaarlijks gepubliceerd. Hierbij wordt per stof aangegeven welke maandgemiddelde concentratie er is aangetroffen, hoe vaak de stof gemeten is en op welke plaats deze is aangetroffen.

### **1.5 Doel**

Het doel van dit onderzoek is een inventarisatie te maken naar voorkomen van prioritaire stoffen in oppervlaktewater, de Maas en Rijn.

Aan de hand van dat onderzoek, zal op basis van bepaalde selectiecriteria een top 100 lijst samen gesteld worden van aangetoonde prioritaire stoffen in oppervlaktewater.

Vervolgens zal een UV-DAD bibliotheek van de top 100 stoffen gemaakt worden. Deze bibliotheek kan dan worden gebruikt om snel (on)bekenden in rivierwatermonsters te indentificeren en aan de hand van DADspectra van onbekende stoffen in de database deze stoffen te benoemen.

---

## 2 Materiaal en methoden

### 2.1 Voorkomen bekende stoffen in rivierwater: opbouwen van een database

De kwaliteit van drinkwater wordt door drinkwaterbedrijven en onderzoeksinstituten continue gemonitord op voorkomen van verschillende organische en anorganische stoffen en parameters. Ook Kiwa houdt zich bezig met het bepalen van onbekende verbindingen in drinkwater. Omdat de meeste verbindingen tijdens het zuiveringsproces uit het water verwijderd worden, is het voor een inventariserend onderzoek naar wat in het drinkwater zou kunnen voorkomen, zinniger te kijken naar de bron, in dit geval rivierwater / oppervlaktewater.

Het RIWA geeft jaarlijkse publicaties uit over de aangetroffen prioritaire verbindingen in rivierwater. Deze publicaties zijn gebruikt om een database samen te stellen die een overzicht geeft over alle aangetroffen prioritaire stoffen, de hoeveelheid, plaats en datum en de frequentie.

De gebruikte database is een Microsoft Access (MS Access) Database.

De database is als volgt opgebouwd cq de volgende gegevens erin verwerkt:

- Chemical name. De chemische naam van de stof, deze naam is de gebruikelijke naam van de stof maar kan ook anders genoemd worden.
- CAS number. Het Chemical Abstracts Service (CAS) Registry number is een uniek nummer voor 1 stof. Door dit unieke nummer kan te allen tijde gezegd worden welke stof het is ongeacht de naamgeving.
- Log Kow. De Log Kow van een chemische stof is de verhouding van de concentraties van die stof in oplossing in respectievelijk 1-octanol en water, bij gelijke temperatuur. Deze waarde wordt gebruikt om te voorspellen hoe goed een stof door waterzuiveringsinstallaties kan worden verwijderd.
- Analyte Type. De stofgroep waarin de stof wordt ingedeeld.
- Molecular Formula. De molecuulformule
- Molecular Weight (MW). Dit is de molmassa van de stof. Deze kan worden gebruikt voor de identificatie met MS.
- SMILES. Een simplified molecular input line entry specification string wordt gebruikt om een visuele weergave te maken van een molecuul. Het kan tevens gebruik worden om een theoretische Log Kow waarde te berekenen.

|                    |   |               |  |
|--------------------|---|---------------|--|
| Chemical name:     | <input type="text" value="Carbamazepine"/>                        | Analyte type: | <input type="text" value="Pharmaceuticals"/> |
| Cas number:        | <input type="text" value="298-46-4"/>                             | logKow:       | <input type="text" value="2.25"/>            |
| Molecular Formula: | <input type="text" value="C15H12N2O"/>                            | Mw:           | <input type="text" value="236.269 g/mol"/>   |
| SMILES:            | <input type="text" value="C1=CC=C2C(=C1)C=CC3=CC=CC=C3N2C(=O)N"/> |               |  |

Figuur 1; voorbeeld algemeen invulveld Access database

Om vervolgens de gevonden concentraties en locaties bij de juiste stof te kunnen invoeren, is gebruik gemaakt van een subformulier. Hierdoor kunnen meerdere waarden onder één stof vermeld worden.

In het subformulier zijn de volgende gegevens verwerkt:

- Water type. Geeft aan in wat voor bron het water is aangetroffen. In het geval van dit onderzoek zijn alleen gegevens over rivierwater gebruikt.
- Measured Concentration. Geeft de aangetroffen hoeveelheid ( $\mu\text{g/l}$ ) aan. Dit is een maandgemiddelde concentratie.
- Monitoring station. Dit is de plaats waar het watermonster is genomen.
- Season. De datum van aantreffen, in het geval van dit onderzoek is dat een maand.
- Brongegevens, bestaande uit de titel, auteur, jaar van uitgave en de bladzijde.
- Analysegegevens, bestaande uit de extractiemethode, scheidingsmethode, monstervolume en de recovery. Deze gegevens zijn niet gebruikt en ingevuld voor dit onderzoek.
- En een ruimte voor opmerkingen.

Prioritaire stoffen sub

|  |  |                                 |
|--|--|---------------------------------|
| Water type:<br>River water                         | Monitoring station:<br>Amsterdam-Rijnkanaal, Nieuwer | Title:<br>RIWA jaarverslag 2004 |
| Measured concentration ( $\mu\text{g/L}$ ):<br>0,1 | Season: (dd/mm/yyyy)<br>01-mrt-04                    | Author:<br>dr. P.G.M. Stoks     |
| Extraction method:<br>[dropdown]                   | Separation method:<br>[dropdown]                     | Year:<br>2005                   |
| Sample volume (ml):<br>[input]                     | Recovery (%):<br>[input]                             | Pages:<br>112                   |
| Comment:<br>[yellow text area]                     |  |                                 |

Record: [navigation icons] 1 [navigation icons] of 53

Figuur 2; voorbeeld subformulier Acces database

## 2.2 Top 100

Na het maken van de database en het invoeren van alle gegevens van 204 stoffen, moet er een top 100 lijst gemaakt worden van de gegevens. Deze lijst kan op verschillende manieren worden samengesteld, namelijk op frequentie van voorkomen, hoogste concentratie voorkomen, voorkomen per meetlocatie en op gemiddelde aangetroffen concentratie.

Aangezien de database gebruikt gaat worden om snel stoffen te indentificeren in rivierwater m.b.v. een UV spectrum, is gekozen om een top 100 samen te stellen gebaseerd op de gemiddelde aangetroffen concentratie van de stoffen.

## 2.3 Analyse

### 2.3.1 Oplossingen

Nadat de top 100 is gemaakt, zijn alle 100 stoffen uit het magazijn van Kiwa gehaald of besteld. Van alle vaste stoffen is  $5,000 \pm 0,500$  mg afgewogen op een analytische balans en opgelost in 50 mL Acetonitril. Van alle vloeistoffen is  $5\mu\text{L} \pm 0,1\mu\text{L}$  afgemeten in een glazen injectiespuit en vervolgens opgelost in 50mL Acetonitril. Vervolgens is met the theoretische dichtheid bij  $20^\circ\text{C}$  de massa berekend. Daarna is elke oplossing doorverdund door 2,5 mL stockoplossing + 2,5 mL Acetonitril te mengen met 45 mL Milli-Q water. De oplossingen hebben nu allen een concentratie van ongeveer 5 mg/L.

### 2.3.2 Analyse apparatuur

Voor de analyse is een HPLC-DAD gradiënt systeem gebruikt bestaande uit:

HPLC: Waters W600

Detector: Waters 2996 Photodiode Array Detector, golflengte 200-350 nm.

Kolom: Varian OmniSpher 5 C18 250 x 4,6 mm x  $\frac{1}{4}$ "

Injectieloop: 10  $\mu\text{L}$

Auto sampler: Gilson Aspec XL for solid phase extraction

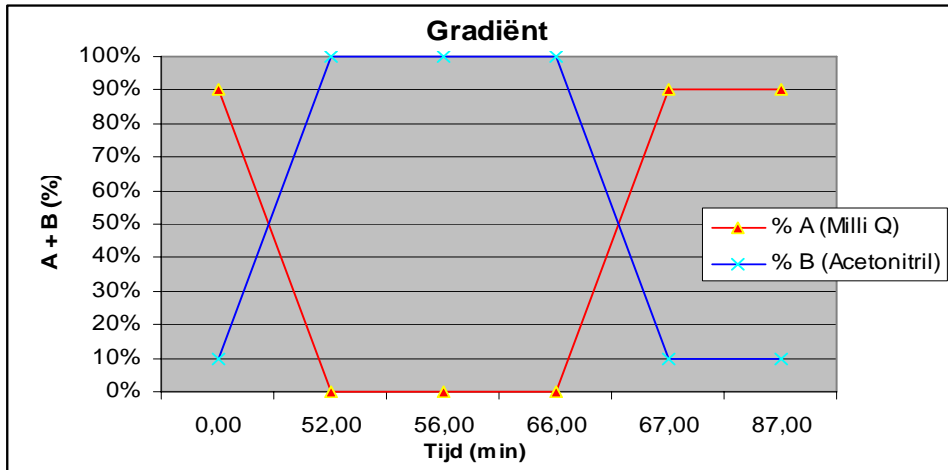
### 2.3.3 Gradiënt

De gradiënt die gebruikt is, is een standaard analysemethode die bij Kiwa wordt toegepast. De loopvloeistoffen die zijn gebruikt zijn Milli-Q water en acetonitril.

| Tijd (min) | Flow (ml/min) | % A (Milli Q) | % B (Acetonitril) |
|------------|---------------|---------------|-------------------|
| 0,00       | 0,70          | 90%           | 10%               |
| 52,00      | 0,70          | 0%            | 100%              |
| 56,00      | 0,70          | 0%            | 100%              |
| 66,00      | 1,00          | 0%            | 100%              |
| 67,00      | 1,00          | 90%           | 10%               |
| 87,00      | 0,70          | 90%           | 10%               |

Tabel 1; Gradiënt schema

---



Figuur 3; Gradiëntschema

### 2.3.4 Interne standaard methode

Aan alle oplossingen die Kiwa op een HPLC of GC methode meet, wordt een interne standaard oplossing toegevoegd bestaande uit Fenuron en Chlooroxuron (50/50, v/v). De concentratie van de interne standaard die voor dit onderzoek is gebruikt is ongeveer 1 mg/L.

### 2.3.5 Kiwa Retentietijd Index (KRetI)

Door twee interne standaarden te gebruiken kunnen alle gemeten retentietijden van alle analyses gecorrigeerd met behulp van de formule:

$$Rty_a = Rt_{Fn} + \frac{(Rt_{Cx} - Rt_{Fn})}{(Rt'_{Cx} - Rt'_{Fn})} (Rtx_a - Rt'_{Fn})$$

Waarin:

$Rty_a$  = Gecorrigeerde retentietijd van component a ten opzichte van de interne standaarden Fenuron en Chlooroxuron

$Rtx_a$  = Gemeten retentietijd van component a.

$Rt_{Cx}$  en  $Rt_{Fn}$  = Vastgestelde retentietijden van de interne standaarden.

$Rt'_{Cx}$  en  $Rt'_{Fn}$  = Gemeten retentietijden van de interne standaarden.

Hierdoor kunnen alle metingen met elkaar worden vergeleken. Voor dit onderzoek is een  $Rt_{Cx}$  van 38,35 (min) en een  $Rt_{Fn}$  van 21,12 (min) gebruikt.

Voorbeeldberekening:

Een gemeten chromatogram heeft 3 pieken, 1 piek van de geïnjecteerde stof ( $Rt = 15,23$  min), 1 piek van interne standaard Fenuron ( $Rt = 20,89$  min) en 1 piek van interne standaard Chlooroxuron ( $Rt = 38,05$  min).

De KRetI ( $Rty_a$ ) van de geïnjecteerde stof is dan:

$$Rty_a = 21,12 + (38,35 - 21,12) / (38,05 - 20,89) * (15,23 - 20,89) = 15,44 \text{ (min)}$$

### 2.3.6 LC loopvloeistof condities: zuur en neutraal

Omdat niet alle stoffen een goede response geven in een neutraal milieu, worden alle stoffen 2x gemeten. Eén keer onder neutrale omstandigheden (Milli-Q water), en één keer onder zure omstandigheden (0,05% (v/v) Trifluorazijnzuur (TFA) in Milli-Q). Er is gekozen voor TFA omdat uit eerder onderzoek binnen Kiwa is gebleken dat TFA de beste response geeft voor een breed scala aan organische stoffen.

---



# 3 Resultaten

## 3.1 Top 100 stoffen.

Met de verkregen gegevens uit de database is een top 100 prioritaire stoffen, gesorteerd op gemiddelde concentratie ( $\mu\text{g/L}$ ) samengesteld. Stoffen die slechts 1 maal in 5 jaar werden aangetroffen zijn niet opgenomen in de top 100.

In bijlage 2 is een overzicht van de top 100 gegeven

## 3.2 Gevonden stoffen in top 100

Om een beeld te geven van de verschillende stoffen in rivierwater zijn deze in de komende paragrafen uitgewerkt.

### 3.2.1 Bestrijdingsmiddelen

In het rivierwater worden veel bestrijdingsmiddelen of afbraakproducten daarvan aangetroffen. De aangetroffen bestrijdingsmiddelen worden ingedeeld in de volgende stofgroepen:

- Chloorfenoxy pesticiden
- Di-nitrofenol herbiciden
- N-methylcarbamaten
- OCB's
- Organofosfor- en Organozwavel pesticiden
- Fenylureum herbiciden
- Triazinen/Triazinonen/ Aniliden

### 3.2.2 Chloorfenoxy pesticiden

De chloorfenoxy pesticiden zijn een oudere groep van chloorhoudende onkruidbestrijdingsmiddelen, die ontdekt en gebruikt zijn rond 1940. Ze worden gebruikt (meestal met hulpcomponenten) als onkruidverdelger op vooral graanvelden. De werking van de herbiciden is onbekend, maar ze veroorzaken groeistoornissen waardoor bepaalde soorten planten afsterven. Chloorfenoxy herbiciden zijn voor de mens relatief veilig en niet carcinogeen. Aangetroffen chloorfenoxy pesticiden in de top 100: (zonder volledig te zijn)

- Bentazon
  - 2,4-dichlorophenoxyacetic acid [2,4-D]
  - Mecoprop [MCP]
  - 4-chloro-2-methylphenoxyacetic acid [MCPA]
-



### 3.2.3 *Di-nitrofenol herbiciden*

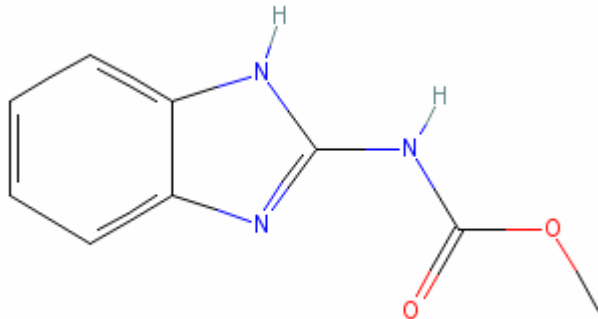
Sinds 1992 wordt oppervlaktewater onderzocht op de aanwezigheid van dinitrofenolen. Voorbeelden zijn DNOC, Dinoseb en Dinoterb, deze worden vooral ingezet als onkruidbestrijdingsmiddelen en als loof doders bij de aardappelteelt. Dinitrofenolen zijn zeer milieuvervuilend en teratogeen voor zoogdieren.

Di-nitrofenolen in top 100: (zonder volledig te zijn)

- 2,4-Dinitrophenol
- 2-methyl-4,6-dinitrophenol [DNOC]
- 2-(1,1-dimethylethyl)-4,6-dinitrophenol [dinoterb]

### 3.2.4 *N-methylcarbamaten*

N-methylcarbamaten hebben een hormoonverstorende werking en worden gebruikt als bestrijdingsmiddel in de landbouw. Carbendazim is de enige N-methylcarbamaat in de top 100.



Figuur 4; Carbendazim, C<sub>9</sub>H<sub>9</sub>N<sub>3</sub>O<sub>2</sub>, CAS 10605-21-7

### 3.2.5 *OCB's*

OCB's of Organo Chloor Bestrijdingsmiddelen zijn persistente verontreinigingen, met als eigenschappen slechte afbreekbaarheid, een neiging tot stapelen in dierlijk (dus ook humaan) vetweefsels en uitlopende toxische eigenschappen.

OCB's in de top 100: (zonder volledig te zijn)

- Dichlobenil
- Parathion-Methyl
- Hexachlorobutadiene

### 3.2.6 *Organofosfor- en Organozwavel pesticiden*

Deze stofgroep heeft hormoon verstorende eigenschappen en wordt gebruikt als landbouwgif. Glyfosaat is een stof dat veel in beeld is in de watersector omdat deze in een vaak grensoverschrijdende hoeveelheid voorkomt in rivierwater. Aangetroffen Organofosfor- en Organozwavel pesticiden in de top 100: (zonder volledig te zijn)

- Glyphosate
  - Ethofumesate
  - Triphenylphosphate
  - Azinphos methyl
-

### 3.2.7 Fenylureumherbiciden

Fenylureumherbiciden worden veel gebruikt en veel aangetroffen in rivierwater. Isoproturon en diuron zijn bekendste en meest gebruikt. Deze stoffen zijn schadelijk voor het milieu.

Fenylureumherbiciden in de top 100: (zonder volledig te zijn)

- Linuron
- Isoproturon
- Metobromuron
- Chlorotoluron
- Metoxuron
- 1-(3,4-Dichlorophenyl)urea
- 1-(3,4-Dichlorophenyl)-3-methylurea

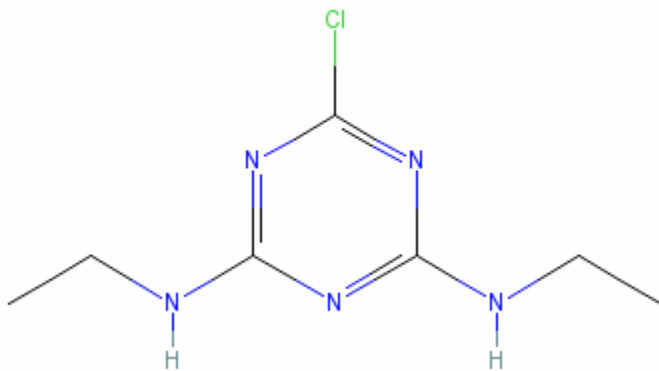
### 3.2.8 Triazinen/Triazinonen/Aniliden

Triazinen worden gebruikt als herbiciden en soms als kleurstof van synthetische vezels of wol.

De stoffen zijn schadelijk voor mens en milieu.

Triazinen de in top 100: (zonder volledig te zijn)

- Atrazine
- Desethylatrazine
- Desisopropylatrazine
- Terbutylazine
- Simazine
- Metolachlor
- Metazachlor



Figuur 5; Simazine,  $C_7H_{12}ClN_5$ , CAS 122-34-9

### 3.2.9 Overige bestrijdingsmiddelen

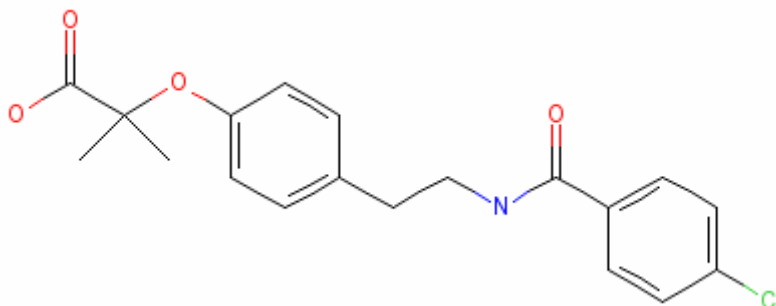
Verder zijn er ook andere bestrijdingsmiddelen aangetroffen, ze worden gebruikt als pesticide of herbicide. De volgende zijn terug te vinden in de top 100: (zonder volledig te zijn)

- Bromacil
  - 2,6-Dichlorobenzamide [BAM]
  - Chlorpyrifos
  - Metribuzine
  - Chloridazon
-

### 3.2.10 Farmaceutische middelen.

Naast bestrijdingsmiddelen worden er de laatste jaren ook veel gekeken en gemeten naar farmaceutische middelen. Aangezien farmaceutische middelen pas sinds een paar jaar een onderwerp van discussie zijn, wat betreft voorkomen in water, zijn deze door het RIWA pas sinds 2004 gemonitord. Van deze stoffen zijn dus alleen gegevens van over één jaar bekend. Toch zijn er een flink aantal terug te vinden in de top 100: (zonder volledig te zijn)

- Diclofenac
- Fenazone
- Sulphamethoxazol
- Erythromycine
- Caffeine
- Pentoxifylline
- Metoprolol
- Bezafibrate
- Carbamazepine



Figuur 6; Bezafibrate, C<sub>19</sub>H<sub>20</sub>ClNO<sub>4</sub>, CAS 41859-67-0

### 3.2.11 Röntgencontrastmiddelen

Röntgencontrastmiddelen bestaan uit stoffen met een hoog atoomnummer en vanzelfsprekend ook een hoge dichtheid. Door deze hoge dichtheid zijn ze zeer goed zichtbaar op röntgenfoto's en scans en worden daardoor veel toegepast in ziekenhuizen om aderen of andere delen van het lichaam zichtbaar te maken voor röntgen of CT scans. Er bestaan verschillende soorten contrastmiddelen. De contrastmiddelen met het hoofdbestanddeel barium wordt veel gebruikt. Bij MRI en CT onderzoeken wordt vaak jodium gebruikt. De röntgencontrastmiddelen met barium komen veel voor in suspensies.

In het rivierwater worden veel joodhoudende röntgencontrastmiddelen aangetroffen en vaak in relatief hoge concentraties. De gevonden contrastmiddelen in de top 100 zijn: (zonder volledig te zijn)

- Ioxitalamic acid
  - Iohexol
  - Iomeprol
  - Iopamidol
  - Iopromide
  - Amidotrizoic acid
-

### 3.2.12 *Vluchtige gehalogeneerde verbindingen*

Deze stoffen worden in soms grote hoeveelheden aangetroffen in rivierwater. Het zijn relatief kleine, simpele verbindingen en worden zeer veel gebruikt in de bulkindustrie voor allerlei (kunststof) syntheses en als oplosmiddel.

Vluchtige halogenen in de top 100: (zonder volledig te zijn)

- 1,2-dichloroethane
- cis-1,2-dichloroethene
- Trichloromethane
- bromodichloromethane
- tetrachloroethene
- trichloroethene
- dibromochloromethane
- 1,1,2-Trichloroethane
- dichloromethane
- hexachlorobutadiene

Vrijwel alle vluchtige halogeenhoudende stoffen hebben carcinogene en sommige ook teratogene eigenschappen.

### 3.2.13 *Aromatische koolwaterstoffen*

De laatste groep die wordt besproken zijn de aromatische koolwaterstoffen.

Er wordt onderscheid gemaakt tussen monocyclische aromatische koolwaterstoffen (MAK's) en polycyclische aromatische koolwaterstoffen (PAK's)

#### 3.2.14 *MAK's*

MAK's worden gebruikt als oplosmiddel of synthese in de (petro)chemische industrie en in brandstof voor motorvoertuigen. MAK's zijn schadelijk voor de mens en sommige hebben carcinogene eigenschappen.

MAK's in de top 100: (zonder volledig te zijn)

- 1,2,4-trimethylbenzene
- 1,2-dichlorobenzene
- 1,2-dimethylbenzene
- 3-Ethyltoluene
- 4-ethyltoluene
- Benzene
- Ethylbenzene
- Ethenylbenzene [styrene]
- Methylbenzene [toluene]

#### 3.2.15 *PAK's*

PAK's komen vrij bij verbranding van fossiele brandstoffen. Ook het verkeer, vooral dieselmotoren, produceert aanzienlijke hoeveelheden PAK's. PAK's hebben vermoedelijke carcinogene eigenschappen. De meeste aangetroffen PAK's vallen buiten de top 100, omdat ze in een zeer kleine concentratie voorkomen, toch worden ze zeer frequent aangetroffen.

PAK's in de top 100: (zonder volledig te zijn)

---

- Pyrene
- Fluoranthene
- Napthalene

### 3.3 Meetresultaten

Er zijn 78 stoffen afgewogen en gemeten. 22 stoffen zijn niet gemeten omdat deze niet beschikbaar waren, of nog niet geleverd door de leverancier. Ook zijn sommige stoffen die wel aanwezig waren niet gemeten met de verwachting dat ze niet te detecteren zijn met een Diode Array Detector.

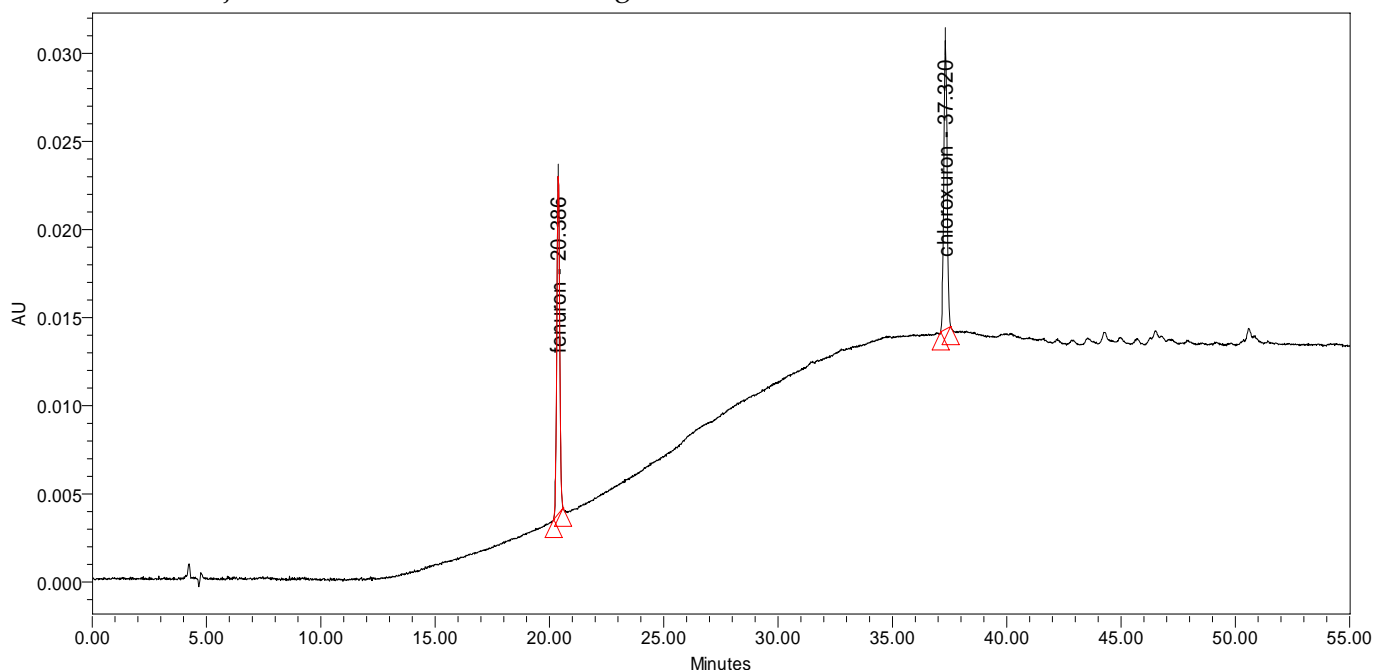
Van de 78 stoffen die wel gemeten zijn werden er 47 aangetroffen in een LC-UV chromatogram, in zowel neutrale als in zure loopvloeistoffen.

|                   | neutraal | zuur | totaal |
|-------------------|----------|------|--------|
| Aangetroffen      | 47       | 47   | 94     |
| Niet aangetroffen | 31       | 31   | 62     |
| Niet gemeten      | 22       | 22   | 44     |
| totaal            | 100      | 100  |        |

Tabel 2

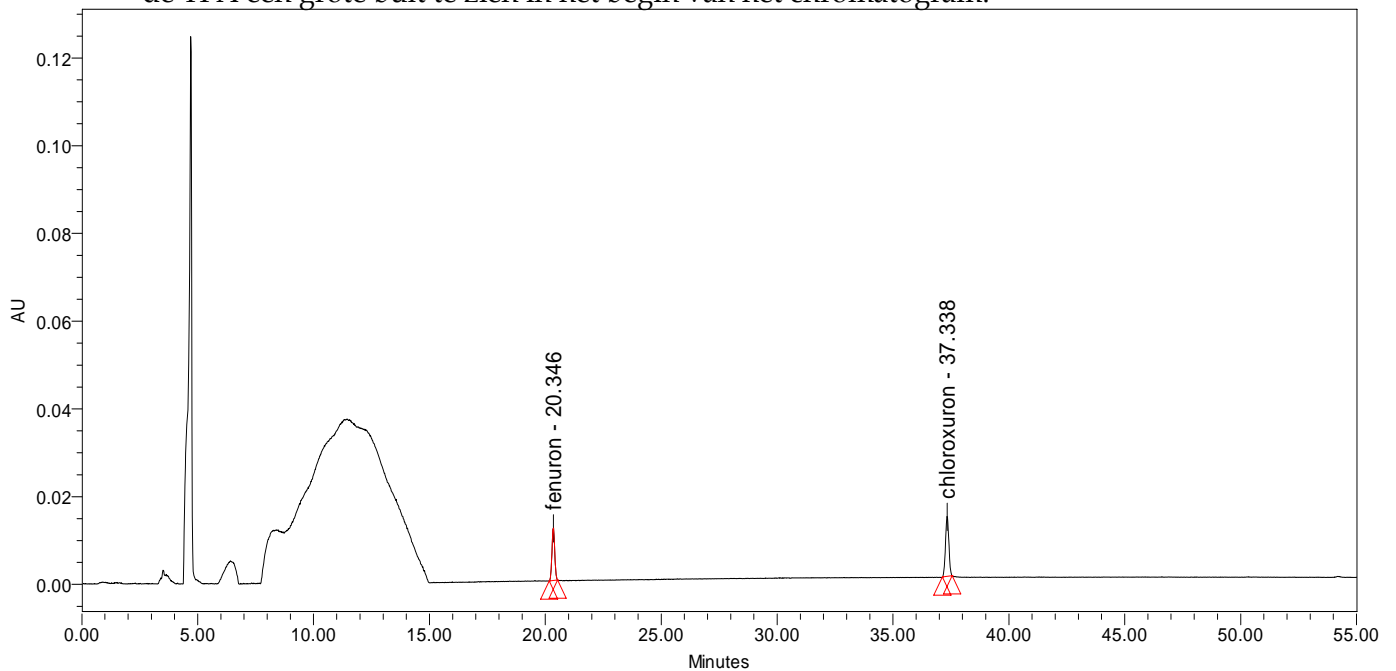
#### 3.3.1 Blanco metingen

Om een goed resultaat te krijgen zijn eerst LC-UV chromatogrammen opgenomen met alleen interne standaarden (I.S.), Fenuron en Chlooroxuron, om het achtergrondsignaal en de response te zien. De verschuiving in de basislijn wordt veroorzaakt door de gradiënt.



Figuur 8; LC-UV chromatogram 2 I.S. (10  $\mu$ L injectie, 1 mg/L) in neutraal milieu (Maxplot 200-350 nm.)

In zuur milieu (TFA) is de verschuiving van de basislijn een stuk minder, deze loopt omlaag in plaats van omhoog zoals in neutraal milieu. Ook geeft de TFA een grote bult te zien in het begin van het chromatogram.



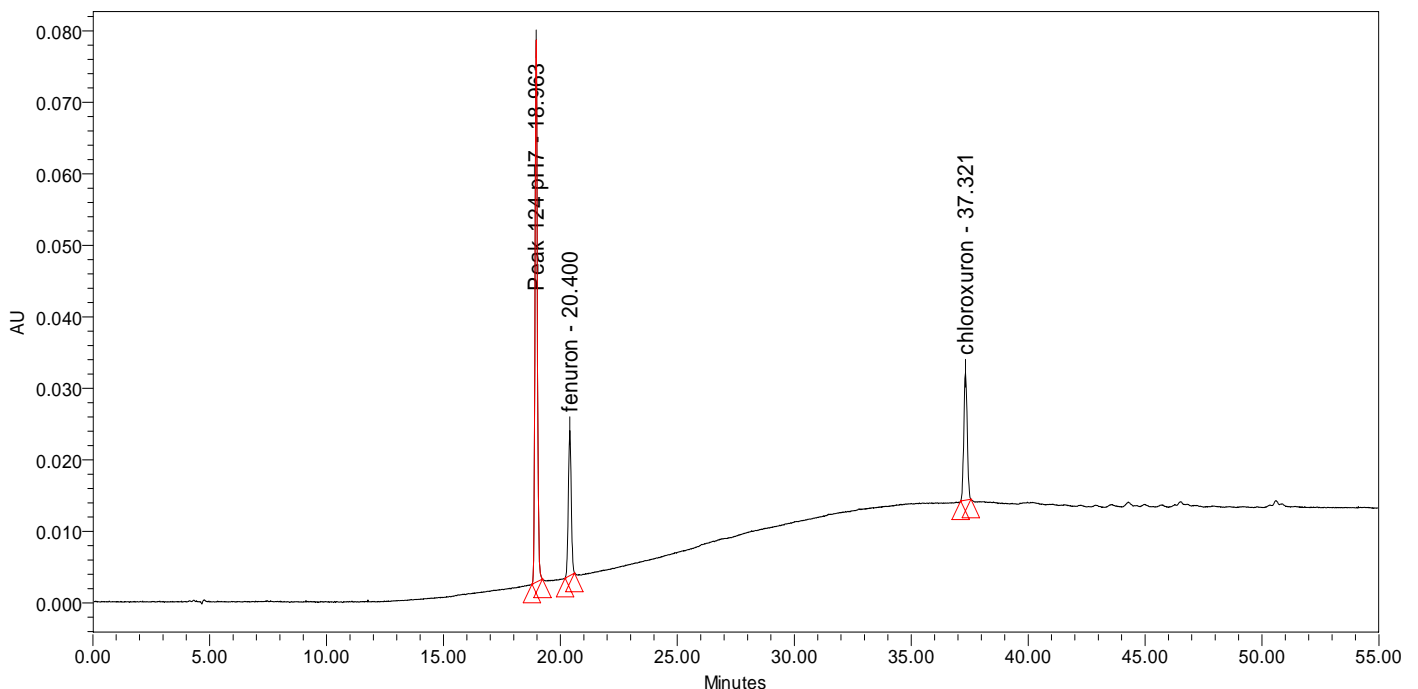
Figuur 9; chromatogram van 2 I.S. (10  $\mu$ L injectie, 1 mg/L) in TFA zuur milieu (Maxplot 200-350 nm.)

### 3.3.2 Database

Alle gemeten spectra van de stoffen zijn opgeslagen in een aparte DAD spectrale database. Hierbij is de berekende KRetI ook opgeslagen. De spectra afkomstig van neutrale en zure loopvloeistof zijn apart opgeslagen.

### 3.3.3 Identificatie van onbekende stoffen uit de database.

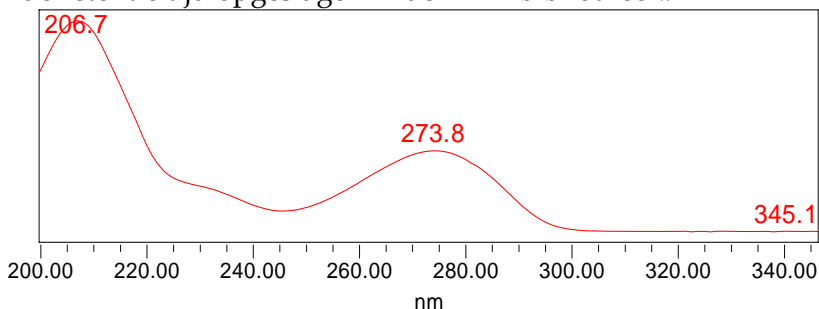
Een van de doelen van dit onderzoek was om een aantal (on)bekende stoffen die in de DAD database aanwezig zijn te identificeren. Dit kan aan de hand van een KRetI en een DAD spectrum. Als voorbeeld (volgt hieronder) de identificatie van Pentoxyfilline. Na het oplossen en injecteren van Pentoxyfilline is het volgende chromatogram verkregen:



Figuur 10; LC-UV chromatogram Pentoxifylline (5mg/L 10µL injectie) in neutraal milieu

De bibliotheek geeft de namen van de 3 gevonden pieken, 2 interne standaarden (fenuron en chlooroxuron) en een onbekende piek die al eerder in een onderzoek is aangetroffen, maar geen match vertoonde met de DAD Database van Kiwa.

Bij de piek is een bijbehorend spectrum opgenomen en deze wordt samen met de retentie tijd opgeslagen in de DAD bibliotheek.



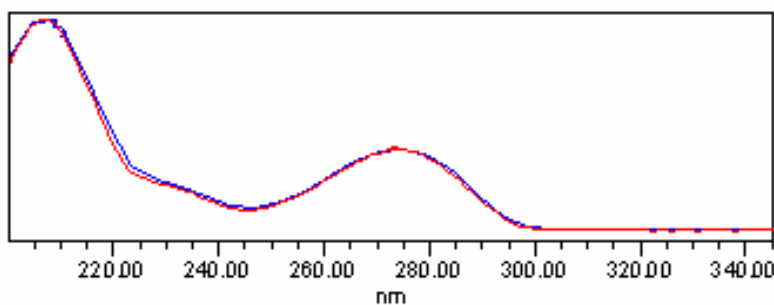
Figuur 11; UV spectrum Pentoxifylline

Vervolgens wordt het gevonden spectrum gematched met alle andere opgeslagen spectra in de DAD-database. Dit geeft voor pentoxifylline het volgende resultaat.

| Select | Retention Time | Info   | Name            | Description         | Library Name             | Source Name                |
|--------|----------------|--------|-----------------|---------------------|--------------------------|----------------------------|
| 2      | Yes            | 18.967 | Peak 1          |                     |                          | pentoxifylline 5mg/1       |
| 3      | Yes            | 19,725 | Match 1 (2.076) | Peak 65 (GWA) 14.64 | Vaak als lenacil herkend | Totaal bieb W1001 03/08/99 |

Tabel 3; gegevens over bekend en onbekend spectrum

En een overlay waarop het profiel van beide spectra te zien is.



Figuur 12; UV spectrum Pentoxifylline (onder) met overlay onbekend spectrum

De software berekent het verschil tussen de 2 lijnen door de tussenliggende oppervlakte te meten. De lijnen mogen van dezelfde stof afkomstig worden genoemd als de gevonden waarde minder dan 3 is. (in dit geval 2,076) . Naast Pentoxifylline zijn ook Bisphenol-A en Caffeïne geïdentificeerd. Daarnaast waren er nog een aantal stoffen waarvan de spectra op elkaar lijken, maar er dusdanig verschil tussen de twee spectra is dat niet met zekerheid kan worden gezegd of de spectra's van dezelfde stof afkomstig zijn.

## 4 Conclusie

Er is een inventariserend onderzoek gedaan naar het uit verschillende bronnen voorkomen van prioritaire stoffen in rivierwater. De gevonden gegevens zijn verwerkt in een Microsoft Access database en daaruit is een top 100 lijst van prioritaire stoffen in rivierwater opgesteld. 77 van de 100 stoffen zijn gemeten met een LC-DAD methode met zowel neutrale als met zure loopvloeistoffen. De gevonden spectra en KRetI zijn opgeslagen in een DAD-database. Met deze database zijn een aantal uit de DAD-database onbekende pieken geïdentificeerd.

---





# 5 Aanbevelingen

## 5.1 Farmaceutische middelen

Uit de lijst met gevonden onbekenden uit de DAD database blijkt dat vooral farmaceutische middelen teruggevonden zijn. Daarom zou een inventariserend onderzoek naar farmaceutische middelen in drinkwaterbronnen een lijst op kunnen leveren met stoffen die van waarde zijn om in een DAD / MS database te hebben voor identificatie van stoffen in rivierwater.

## 5.2 Stoffen uit top 200 die niet aanwezig zijn bestellen en meten

Veel stoffen uit de top 100 zijn bestrijdingsmiddelen en zijn opgenomen in een meetprogramma binnen Kiwa. Stoffen die Kiwa niet in het eigen magazijn heeft en dus besteld zijn voor dit onderzoek waren allen nog niet bekend in de DAD-database. Het kan dus nuttig zijn om de complete lijst met gevonden stoffen uit het inventariserend onderzoek te screenen op stoffen die niet aanwezig zijn het Kiwa magazijn en deze stoffen te bestellen en te meten.

## 5.3 Preconcentratie

Bij het screenen van watermonsters past Kiwa preconcentratie over SPE-kolommen toe. Het is daarom nuttig om de top 100 prioritaire stoffen ook via preconcentratie te meten en in een database te zetten.

## 5.4 (GC of LC) MS

Omdat met LC-DAD een aantal stoffen geen piek in het chromatogram kan de stof bijvoorbeeld met andere detectie methode gemeten worden. Omdat veel kleine vluchtige verbindingen niet te detecteren zijn met DAD en wel met massaspectrometrie (MS) is het raadzaam de top 100 ook met een LC of GC-MS methode te meten en in een database op te slaan.

---



## 6 Literatuur

### 6.1 Rapporten

Dr. P.G.M. Stoks et al. Jaarrapport 2004 De Rijn. RIWA-Rijn Vereniging van Rivierwaterbedrijven; 2005; ISBN: 90-6683-1146.

dr. P.G.M. Stoks et. al. Jaarrapport 2003 De Rijn. RIWA-Rijn Vereniging van Rivierwaterbedrijven; 2004; ISBN: 90-6683-109-X.

dr. W.F.B. Jüllich et. al. Jaarverslag 2001 - 2002 Rijn. RIWA-Rijn; 2003; ISBN: 90-6683-103-0.

dr. W.F.B. Jüllich et. al. Jaarverslag 1999 - 2000 Rijn. RIWA-Rijn; 2002; ISBN: 90-6683-094-8

A.B.M. Jeuken en H.L. Barreveld. 'Vergeten' stoffen in Maas en zijrivieren. Lelystad: RIZA; 2004; ISBN: 903-695-6773.

H. Pieters et. al. Trends van Prioritaire stoffen. RIWA Rijnwaterbedrijven; 2004 Sep; ISBN: 90-6683-111-1.

Dr. J. van Genderen et. al. Inventarisatie en toxicologische evaluatie van organische microverontreinigingen. RIWA; 2000.

### 6.2 CD-Roms

Riwa jaarverslag 2003 Deel B Maas, RIWA, 2004

Riwa jaarverslag 2002 Deel B Maas, RIWA, 2003

### 6.3 Internet

<http://www.kiwa.nl/index-W.asp?id=540>

<http://www.kiwa.nl/index-W.asp?id=556>

<http://www.vrom.nl/pagina.html?id=6970#5>

[http://www.riwa.org/riwa\\_nl.html](http://www.riwa.org/riwa_nl.html)

<http://www.natuurkunde.nl/artikelen/view.do?supportId=339777>

<http://www.wareco.nl/bodemsanering/analysepakketen1.pdf>

<http://ecb.jrc.it/esis/esis.php?PGM=ora>

<http://www.scorecard.org/chemical-profiles/>

[http://en.wikipedia.org/wiki/Main\\_Page/](http://en.wikipedia.org/wiki/Main_Page/)

<http://www.chemindustry.com/apps/chemicals/>

<http://www.epa.gov/iris/subst/>

<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>

<http://chemfinder.cambridgesoft.com/>

---



# I Lijst Prioritaire stoffen VROM

De onderstaande 212 stoffen zijn de prioritaire stoffen, die vanuit de rijksoverheid met voorrang moeten worden behandeld (zie ook paragraaf 3.2.2). In het kader van de uitvoering van het stoffenbeleid zijn deze stoffen voor diverse beleidsterreinen relevant.

In de eerste plaats betreft het de lijst van 50 prioritaire stoffen die met het verschijnen van het eerste Nationaal Milieubeleidsplan (NMP) in 1988, in het kader van het thema Verspreiding, is opgesteld. De stoffen op deze lijst brengen een meer dan verwaarloosbaar risico voor mens en milieu met zich mee. In de notitie "Emissiereductiedoelstellingen prioritaire stoffen", die in het kader van NMP4 in juni 2001 aan de Tweede Kamer is aangeboden, is vastgesteld dat voor het merendeel van deze stoffen de emissies zodanig zijn gereduceerd dat ze geen of een beperkt milieuprobleem veroorzaken. Het gaat om de volgende stoffen:

1. olie en koolwaterstof
  2. acroleïne
  3. acrylonitril
  4. ammoniak
  5. arseen
  6. asbest
  7. benzeen
  8. cadmium
  9. chlooranilinen
  10. chloorbenzenen (1,4-dichloorbenzeen)
  11. chloorfenolen
  12. CFK's
  13. chroom
  14. 1,2-dichloorethaan
  15. dichloormethaan
  16. dioxinen
  17. etheen
  18. fenolen
  19. fluoriden
  20. fosfaten
  21. ftalaten
  22. hexachloorcyclohexaan
  23. koolmonoxide
  24. koper
  25. kwik
  26. lood
  27. methanal (formaldehyde)
  28. methylbenzeen (tolueen)
  29. methylbromide
  30. methyloxiraan (propyleenoxide)
  31. nikkel
  32. nitraat
-

33. oxiraan (ethyleenoxide)
34. ozon
35. PAK (benzo(a)pyreen, fluoranteen)
36. PCB & PCT
37. radon
38. stikstofdioxide
39. fijn stof
40. grof stof
41. styreen
42. tetrachlooretheen (PER)
43. tetrachloormethaan
44. 1,1,1-trichloorethaan
45. trichlooretheen
46. trichloormethaan
47. vinylchloride
48. zink
49. zwaveldioxide
50. zwavelwaterstof

Aanvullend op bovenstaande stoffen is begin 2004 een lijst opgesteld met stoffen die op basis van hun stofeigenschappen reden zijn voor "zeer ernstige zorg" en die vanuit beleidsmatige overwegingen prioritair zijn. Deze nieuwe prioritaire stoffenlijst, die in maart van dit jaar aan de Tweede Kamer is aangeboden, bevat 162 stoffen. Elk van deze stoffen komt voor op tenminste één van de lijsten van de volgende internationale organisaties: OSPAR, UNEP, UNECE, EC (Richtlijn 67/548/EEG Annex 1) en de Richtlijn 2000/60/EG (Kaderrichtlijn water)<sup>1</sup>. Een aantal van deze stoffen is al gemeld aan de Tweede Kamer in de 2de Voortgangsrapportage uitvoering SOMS. Het betreft de volgende stoffen:

51. 100-44-7 chloormethylbenzeen
  52. 100-63-0 fenyldiazine
  53. 101-20-2 triclocarban
  54. 10124-43-3 kobaltsulfaat
  55. 10190-55-3 loodmolybdaat
  56. 106-89-8 chloormethyloxiraan
  57. 106-93-4 1,2-dibroomethaan
  58. 106-99-0 1,3-butadien
  59. 107-20-0 chlooracetaldehyde
  60. 107-22-2 ethaandial
  61. 108-70-3 1,3,5-trichloorbenzeen
  62. 109-86-4 2-methoxyethanol
  63. 110-49-6 2-methoxyethylacetaat
  64. 110-80-5 2-ethoxyethanol
  65. 111-15-9 2-ethoxyethylacetaat
  66. 115-32-2 dicofol
  67. 118-74-1 hexachloorbenzeen
  68. 120-82-1 1,2,4-trichloorbenzeen
  69. 121-14-2 2,4-dinitrotoluene
-

70. 122-14-5 fenitrothion
  71. 123-31-9 hydrochinon
  72. 123-73-9 2-butanal
  73. 127-19-5 N,N-dimethylaceetamide
  74. 1303-28-2 arseenpentoxide
  75. 1304-56-9 berylliumoxide
  76. 1306-23-6 cadmiumsulfide
  77. 1313-99-1 nikkeloxide
  78. 1314-06-3 dinikkeltrioxide
  79. 1314-62-1 vanadiumpentoxide
  80. 1321-64-8 pentachloornaftaleen
  81. 1321-65-9 trichloornaftaleen
  82. 1327-53-3 arseentrioxide
  83. 1333-82-0 chroomoxide
  84. 133-49-3 pentachloorbenzeenthiool
  85. 1335-32-6 loodacetaat
  86. 1335-87-1 hexachloornaftaleen
  87. 1335-88-2 tetrachloornaftaleen
  88. 1336-36-3 PCB's
  89. 13463-39-3 tetracarbonylnikkel
  90. 140-66-9 para-tert-octylfenol
  91. 143-50-0 chloordecon
  92. 14977-61-8 chromylchloride
  93. 151-56-4 aziridine
  94. 1582-09-8 trifluraline
  95. 1589-47-5 2-methoxypropanol
  96. 16812-54-7 nikkelsulfide
  97. 1825-21-4 pentachlooranisool
  98. 1836-75-5 nitrofen
  99. 18540-29-9 chroom (VI)-verbindingen
  100. 189-55-9 dibenzo[a,i]pyreen (PAK)
  101. 189-64-0 dibenzo[a,h]pyreen (PAK)
  102. 1912-24-9 atrazine
  103. 191-24-2 benzo[g,h,i]peryleen (PAK)
  104. 191-30-0 dibenzo[a,l]pyreen (PAK)
  105. 192-65-4 dibenzo[a,e]pyreen (PAK)
  106. 192-97-2 benzo[e]pyreen (PAK)
  107. 193-39-5 indeno[1,2,3-cd]pyreen (PAK)
  108. 194-59-2 7H-dibenzo[c,g]carbazool (PAK)
  109. 205-82-3 benzo[j]fluorantheen (PAK)
  110. 205-99-2 benzo[b]fluorantheen (PAK)
  111. 206-44-0 fluorantheen (PAK)
  112. 207-08-9 benzo[k]fluorantheen (PAK)
  113. 2104-64-5 ethyl-p-nitrofenylthiobenzeenfosfenaat (EPN)
  114. 218-01-9 chryseen (PAK)
  115. 2227-13-6 tetrasul
  116. 224-42-0 dibenz[a,j]acridine (PAK)
  117. 226-36-8 dibenz[a,h]acridine (PAK)
  118. 22832-87-7 miconazolnitraat
-



119. 2314-97-8 trifluorjoodmethaan
  120. 23593-75-1 clotrimazol
  121. 28680-45-7 heptachloornorborneen
  122. 294-62-2 cyclododecaan
  123. 301-04-2 looddiacetaat
  124. 302-01-2 hydrazine
  125. 309-00-2 aldrin
  126. 32241-08-0 heptachloornaftaleen
  127. 32534-81-9 pentabroombifenylether
  128. 330-54-1 diuron
  129. 335-57-9 hexadecafluorheptaan
  130. 3424-82-6 DDE, 2,4'-isomeer
  131. 355-43-1 5,6,6-tridecafluoro-6-iodo-1,1,1,2,2,3,3,4,4,5-hexaan
  132. 36065-30-2 1,3,5-tribroom-2-(2,3-dibroom-2-methylpropoxy)benzeen
  133. 37240-96-3 loodrhodiumoxide
  134. 41083-11-8 azocyclotin
  135. 465-73-6 isodrin
  136. 470-90-6 chloorfenvinfos
  137. 4904-61-4 1,5,9-cyclododecatrien
  138. 50-28-2 beta-estradiol
  139. 50-29-3 DDT, 4,4'-isomeer
  140. 50-32-8 benzo[a]pyreen (PAK)
  141. 50-63-5 chloroquinebifosfaat
  142. 51000-52-3 neodecaanzuur, ethenyl ester
  143. 512-04-9 spirost-5-en-3-ol, (3beta,25R)-
  144. 51630-58-1 fenvaleraat
  145. 53-16-7 estron
  146. 53-19-0 DDD, 2,4'-isomeer
  147. 534-52-1 2-methyl-4,6-dinitrofenol
  148. 53-70-3 dibenzo[a,h]anthraceen (PAK)
  149. 55525-54-7 3,3'-(ureyleendimethyleen)bis(3,5,5-trimethylcyclohexyl)diisocyaan
  150. 56-53-1 diethylstilboestrol (DES)
  151. 56-55-3 benzo[a]anthraceen (PAK)
  152. 57-63-6 ethinylestradiol
  153. 593-60-2 vinylbromide
  154. 59447-55-1 2-propeenzuur, (pentabroomfenyl)methylester
  155. 602-01-7 2,3-dinitrotolueen
  156. 603-35-0 trifenylfosfine
  157. 606-20-2 2,6-dinitrotolueen
  158. 608-73-1 hexachloorcyclohexaan
  159. 608-93-5 pentachloorbenzeen
  160. 618-85-9 3,5-dinitrotolueen
  161. 619-15-8 2,5-dinitrotolueen
  162. 62-53-3 aniline
  163. 625-45-6 methoxyazijnzuur
  164. 64-67-5 diethylsulfaat
  165. 68-12-2 N,N-dimethylformamide
  166. 69029-86-3 telluriumslakken
-

167. 70124-77-5 flucythrinaat
  168. 72-54-8 DDD, 4,4'-isomeer
  169. 72-55-9 DDE, 4,4'-isomeer
  170. 732-26-3 decylfenol
  171. 7440-41-7 beryllium en -verbindingen
  172. 74-83-9 broommethaan
  173. 7486-35-3 tributyltinverbindingen
  174. 75-12-7 formamide
  175. 75-15-0 koolstofdioxide
  176. 75-21-8 oxiraan (ethyleenoxide)
  177. 76-01-7 pentachloorethaan
  178. 76-44-8 heptachloor
  179. 7646-79-9 kobaltchloride
  180. 76-87-9 fentinhydroxide
  181. 7738-94-5 chroomzuur
  182. 77-47-4 hexachloorcyclopentadien
  183. 7758-01-2 kaliumbromaat
  184. 77-78-1 dimethylsulfaat
  185. 7778-39-4 arseenzuur en -zouten
  186. 7778-44-1 calciumarsenaat
  187. 7778-50-9 kaliumdichromaat
  188. 7784-40-9 loodarsenaat
  189. 7790-79-6 cadmiumfluoride
  190. 789-02-6 DDT, 2,4'-isomeer
  191. 79-16-3 N-methylacetamide
  192. 793-24-8 4-(dimethylbutylamino)difenylamine
  193. 79-34-5 1,1,2,2-tetrachloro-ethaan
  194. 79-46-9 2-nitropropaan
  195. 8001-35-2 toxafeen
  196. 823-40-5 2,6-tolueendiamine
  197. 85-01-8 fenanthreen (PAK)
  198. 85-22-3 pentabroommethylbenzeen
  199. 85535-84-8 C10-13-chlooralkanen
  200. 87-68-3 hexachloorbutadien
  201. 87-86-5 pentachloorfenol
  202. 900-95-8 trifenyyltinacetaat
  203. 91-08-7 2,6-tolueendiisocyaan
  204. 91-59-8 2-naftaleenamine
  205. 91-94-1 3,3'-dichloorbenzidine
  206. 95-53-4 2-methylbenzeenamine
  207. 96-45-7 ethyleenthioureum (ETU)
  208. 98-07-7 trichloormethylbenzeen
  209. 98-95-3 nitrobenzeen
  210. PCDF's
  211. PCDD's
  212. PCB's
-



## II Top 100 prioritaire stoffen

|    | <i>Chemical name</i>                    | <i>CAS nr.</i> | <i>Gemiddelde Concentratie (µg/l)</i> | <i>Aantal treffers</i> |
|----|---|----------------|---------------------------------------|------------------------|
| 1  | Tributyl phosphate                      | 126-73-8       | 0,732                                 | 6                      |
| 2  | Aminomethylphosphonic acid [AMPA]       | 1066-51-9      | 0,519                                 | 157                    |
| 3  | Caffeine                                | 58-08-2        | 0,447                                 | 18                     |
| 4  | Methyl tertair-butyl ether [MTBE]       | 1634-04-4      | 0,421                                 | 64                     |
| 5  | 1,2-dichloroethane                      | 107-06-2       | 0,303                                 | 117                    |
| 6  | diethylhexyl phthalate [DEHP]           | 117-81-7       | 0,285                                 | 10                     |
| 7  | Ethenylbenzene                          | 100-42-5       | 0,276                                 | 2                      |
| 8  | 2,6-dichlorophenol                      | 87-65-0        | 0,263                                 | 3                      |
| 9  | 2,4-dichlorophenol                      | 120-83-2       | 0,244                                 | 5                      |
| 10 | Trichloromethane                        | 67-66-3        | 0,229                                 | 149                    |
| 11 | Bisphenol A                             | 80-05-7        | 0,224                                 | 5                      |
| 12 | Iopromide                               | 73334-07-3     | 0,215                                 | 22                     |
| 13 | dibromoacetic acid                      | 631-64-1       | 0,203                                 | 3                      |
| 14 | triphenylphosphine-oxide                | 791-28-6       | 0,193                                 | 41                     |
| 15 | trichloroacetic acid [TCA]              | 76-03-9        | 0,192                                 | 13                     |
| 16 | Iopamidol                               | 62883-00-5     | 0,188                                 | 21                     |
| 17 | bromodichloromethane                    | 75-27-4        | 0,181                                 | 49                     |
| 18 | Amidotrizoic acid                       | 117-96-4       | 0,164                                 | 22                     |
| 19 | dichloroacetic acid                     | 79-43-6        | 0,160                                 | 3                      |
| 20 | 1,2-dichlorobenzene                     | 95-50-1        | 0,158                                 | 6                      |
| 21 | Diuron                                  | 330-54-1       | 0,136                                 | 148                    |
| 22 | Desisopropylatrazine                    | 1007-28-9      | 0,134                                 | 8                      |
| 23 | dimethoxymethane                        | 109-87-5       | 0,133                                 | 3                      |
| 24 | Glyphosate                              | 1071-83-6      | 0,129                                 | 103                    |
| 25 | Carbamazepine                           | 298-46-4       | 0,125                                 | 53                     |
| 26 | Iomeprol                                | 78649-41-9     | 0,123                                 | 11                     |
| 27 | Naphthalene                             | 91-20-3        | 0,121                                 | 51                     |
| 28 | tetrachloroethene                       | 127-18-4       | 0,115                                 | 126                    |
| 29 | tetrachloro orthophthalic acid          | 632-58-6       | 0,091                                 | 78                     |
| 30 | cis-1,2-dichloroethene                  | 156-59-2       | 0,090                                 | 44                     |
| 31 | Metoprolol                              | 37350-58-6     | 0,090                                 | 4                      |
| 32 | trichloroethene                         | 79-01-6        | 0,087                                 | 114                    |
| 33 | Dimethyldisulfide                       | 624-92-0       | 0,085                                 | 2                      |
| 34 | Triphenylphosphate                      | 115-86-6       | 0,083                                 | 9                      |
| 35 | Camphor                                 | 76-22-2        | 0,083                                 | 3                      |
| 36 | Isoproturon                             | 34123-59-6     | 0,070                                 | 108                    |
| 37 | Atrazine                                | 1912-24-9      | 0,066                                 | 154                    |
| 38 | Ioexol                                  | 66108-95-0     | 0,065                                 | 21                     |
| 39 | Methylbenzene                           | 108-88-3       | 0,065                                 | 53                     |
| 40 | Benzene                                 | 71-43-2        | 0,063                                 | 66                     |
| 41 | dibromochloromethane                    | 124-48-1       | 0,062                                 | 18                     |
| 42 | 1-(3,4-Dichlorophenyl)-3-methylurea     | 3567-62-2      | 0,060                                 | 10                     |
| 43 | Ethylbenzene                            | 100-41-4       | 0,060                                 | 5                      |
| 44 | 2,6,6-Trimethyl-2-cyclohexene-1,4-dione | 1125-21-9      | 0,060                                 | 4                      |
| 45 | Metolachlor                             | 51218-45-2     | 0,060                                 | 24                     |
| 46 | Aniline                                 | 62-53-3        | 0,059                                 | 19                     |
| 47 | Chloridazon                             | 1698-60-8      | 0,059                                 | 18                     |
| 48 | 1,2,4-trimethylbenzene                  | 95-63-6        | 0,057                                 | 9                      |
| 49 | pentachlorophenol                       | 87-86-5        | 0,057                                 | 3                      |
| 50 | 2,4-Dinitrophenol                       | 51-28-5        | 0,057                                 | 6                      |

|     |  |            |       |     |
|-----|--|------------|-------|-----|
| 51  | dibutyl phthalate [DBPH]                           | 84-74-2    | 0,057 | 5   |
| 52  | pirimicarb   | 23103-98-2 | 0,056 | 9   |
| 53  | Parathion-Methyl                                   | 298-00-0   | 0,056 | 12  |
| 54  | Desethylatrazine                                   | 6190-65-4  | 0,055 | 75  |
| 55  | Mecoprop [MCP]P                                    | 7085-19-0  | 0,054 | 36  |
| 56  | 2,4-dichlorophenoxyacetic acid [2,4-D]             | 94-75-7    | 0,054 | 5   |
| 57  | hexachlorobutadiene                                | 87-68-3    | 0,051 | 4   |
| 58  | 4-chloro-2-methylphenoxyacetic acid [MCPA]         | 94-74-6    | 0,051 | 24  |
| 59  | Ethofumesate                                       | 26225-79-6 | 0,050 | 23  |
| 60  | Azinphos methyl                                    | 86-50-0    | 0,050 | 2   |
| 61  | 2,4-DP [dichlorprop]                               | 120-36-5   | 0,049 | 8   |
| 62  | Carbendazim  | 10605-21-7 | 0,048 | 13  |
| 63  | Diclofenac   | 15307-86-5 | 0,047 | 20  |
| 64  | 3-Ethyltoluene                                     | 620-14-4   | 0,046 | 5   |
| 65  | 1,1,2-Trichloroethane                              | 79-00-5    | 0,046 | 18  |
| 66  | Bezafibrate  | 41859-67-0 | 0,044 | 18  |
| 67  | 2,4,6-trichlorophenol                              | 88-06-2    | 0,043 | 3   |
| 68  | metribuzin   | 21087-64-9 | 0,043 | 2   |
| 69  | 2-methyl-4,6-dinitrophenol [DNOC]                  | 534-52-1   | 0,043 | 4   |
| 70  | sulphamethoxazol                                   | 723-46-6   | 0,042 | 22  |
| 71  | 1,2-dimethylbenzene                                | 95-47-6    | 0,040 | 21  |
| 72  | 1-(3,4-Dichlorophenyl)urea                         | 2327-02-8  | 0,040 | 2   |
| 73  | Terbutylazine                                      | 5915-41-3  | 0,040 | 45  |
| 74  | 2-aminoacetophenone                                | 551-93-9   | 0,038 | 12  |
| 75  | fenazone   | 60-80-0    | 0,038 | 2   |
| 76  | monuron  | 150-68-5   | 0,038 | 2   |
| 77  | Chlorotoluron                                      | 15545-48-9 | 0,037 | 47  |
| 78  | 2-methylaniline                                    | 95-53-4    | 0,037 | 3   |
| 79  | dichloromethane                                    | 75-09-2    | 0,036 | 20  |
| 80  | Fluoranthene                                       | 86-73-7    | 0,036 | 96  |
| 81  | Metazachlor  | 67129-08-2 | 0,036 | 10  |
| 82  | Metoxuron  | 19937-59-8 | 0,035 | 6   |
| 83  | 2,4-dichloroaniline                                | 51908-09-9 | 0,035 | 2   |
| 84  | 2-(1,1-dimethylethyl)-4,6-dinitrophenol [dinoterb] | 1420-07-1  | 0,034 | 3   |
| 85  | Simazine   | 122-34-9   | 0,033 | 69  |
| 86  | Linuron  | 330-55-2   | 0,033 | 14  |
| 87  | Bromacil   | 314-40-9   | 0,032 | 3   |
| 88  | dichlobenil  | 1194-65-6  | 0,032 | 33  |
| 89  | Bentazon   | 25057-89-0 | 0,030 | 33  |
| 90  | 4-ethyltoluene                                     | 622-96-8   | 0,030 | 4   |
| 91  | Chlorpyrifos                                       | 2921-88-2  | 0,029 | 3   |
| 92  | Erythromycine A                                    | 114-07-8   | 0,028 | 11  |
| 93  | metobromuron                                       | 3060-89-7  | 0,028 | 11  |
| 94  | Ioxitalamic acid                                   | 28179-44-4 | 0,028 | 17  |
| 95  | Ibuprofen  | 15687-27-1 | 0,027 | 13  |
| 96  | 1,2-dichloropropane                                | 78-87-5    | 0,025 | 56  |
| 97  | 2,6-Dichlorobenzamide [BAM]                        | 2008-58-4  | 0,025 | 8   |
| 98  | Dicyclopentadiene                                  | 77-73-6    | 0,025 | 2   |
| 99  | Pyrene   | 129-00-0   | 0,025 | 112 |
| 100 | Pentoxifylline                                     | 6493-05-6  | 0,024 | 3   |