

OVERZICHT TOEPASSINGS- MOGELIJKHEDEN VAN PASSIVE SAMPLING



RAPPORT

2014
42

OVERZICHT TOEPASSINGSMOGELIJKHEDEN
VAN PASSIVE SAMPLING

RAPPORT

2014

42

ISBN 978.90.5773.643.8



COLOFON

UITGAVE Stichting Toegepast Onderzoek Waterbeheer
Postbus 2180
3800 CD Amersfoort

AUTEURS
Jasperien de Weert
Foppe Smedes

DRUK Kruyt Grafisch Adviesbureau
STOWA STOWA 2014 42
ISBN 978.90.5773.643.8

COPYRIGHT De informatie uit dit rapport mag worden overgenomen, mits met bronvermelding. De in het rapport ontwikkelde, dan wel verzamelde kennis is om niet verkrijgbaar. De eventuele kosten die STOWA voor publicaties in rekening brengt, zijn uitsluitend kosten voor het vormgeven, vermenigvuldigen en verzenden.

DISCLAIMER Dit rapport is gebaseerd op de meest recente inzichten in het vakgebied. Desalniettemin moeten bij toepassing ervan de resultaten te allen tijde kritisch worden beschouwd. De auteurs en STOWA kunnen niet aansprakelijk worden gesteld voor eventuele schade die ontstaat door toepassing van het gedachtegoed uit dit rapport.

TEN GELEIDE

Monitoring van chemische waterkwaliteit is lastig, veelomvattend en kostbaar werk. De conventionele aanpak met chemische analyses van steekmonsters levert beperkte informatie; op een specifieke locatie wordt op een bepaald tijdstip of periode een steekmonster genomen en later geanalyseerd. Pieklozingen, of verhoogde concentraties op onverwachte locaties worden zo niet opgemerkt. Daarnaast zijn de chemische analyses kostbaar waardoor een beperkt aantal monsters wordt geanalyseerd.

Waterschappen onderkennen deze problemen en zijn daarom op zoek naar aanvullende methoden om een integraler beeld in ruimte en tijd van de waterkwaliteit te krijgen. Voor organische micro-verontreinigingen is passieve sampling een goede aanvulling op de bestaande mogelijkheden. Het voorliggende rapport geeft een overzicht van de bestaande kennis rond passieve sampling.

Passive samplers kunnen nu al zinvol worden toegepast bij verschillende soorten monitoringsonderzoek voor organische verbindingen zoals de brede screening op het voorkomen van gewasbeschermingsmiddelen en bronnenonderzoek naar illegale lozingen.

Passive sampling blijkt een goed instrument voor een effectievere monitoring van de waterkwaliteit.

Joost Buntsma
Directeur STOWA

SAMENVATTING

De gangbare manier om de chemische waterkwaliteit te monitoren is door het nemen van steekmonsters, waarbij met een bepaalde frequentie watermonsters van een liter worden genomen. Deze manier van bemonsteren heeft zijn beperkingen omdat het een momentopname is, waardoor de kans groot is dat piekconcentraties van stoffen worden gemist. Daarnaast is de detectielimiet door het beperkte monstervolume vaak te hoog om de concentraties op het gewenste niveau te bepalen. Om voor deze tekortkomingen een oplossing te vinden zijn er allerlei alternatieve bemonsteringsmethoden ontwikkeld waaronder passieve sampling. Hierbij wordt een sampler gedurende een bepaalde tijd in het water uitgehangen, waarbij organische stoffen door de sampler continu worden opgenomen. Piekconcentraties worden hierdoor meegenomen in de bemonstering en door de bemonstering van een groter volume water kunnen lagere concentraties worden gemeten. Passieve samplers kunnen zinvol worden toegepast bij verschillende soorten monitoringsonderzoek voor organische verbindingen zoals de brede screening op het voorkomen van gewasbeschermingsmiddelen, bronnenonderzoek naar illegale lozingen en early warning in drinkwaterpeilbuizen. Voor een deel van de stoffen kan een kwalitatieve concentratie bepaald worden. Voor andere stoffen is een bepaling van een semi-kwantitatieve concentratie mogelijk waarbij een orde van grootte van de concentratie wordt gegeven. Sommige stoffen kunnen enkel kwalitatief bepaald worden waarbij inzicht wordt verkregen of een stof wel of niet aanwezig is.

Dit rapport geeft een praktisch overzicht aan waterbeheerders in welke situaties de toepassing van passieve sampling meerwaarde biedt ten opzichte van steekmonsters. Voor verschillende soorten monitoringsonderzoek is beschreven hoe passieve samplers kunnen worden gebruikt. Voor 844 stoffen, waaronder een groot aantal gewasbeschermingsmiddelen, hormoon verstorende stoffen en geneesmiddelen, is een overzicht gegeven welke type passieve sampler het beste toegepast kan worden en of een (semi)-kwantitatieve dan wel indicatieve concentratie kan worden bepaald. Hiermee kan een afgewogen keuze gemaakt worden of en welke samplers kunnen worden toegepast.

DE STOWA IN HET KORT

STOWA is het kenniscentrum van de regionale waterbeheerders (veelal de waterschappen) in Nederland. STOWA ontwikkelt, vergaart, verspreidt en implementeert toegepaste kennis die de waterbeheerders nodig hebben om de opgaven waar zij in hun werk voor staan, goed uit te voeren. Deze kennis kan liggen op toegepast technisch, natuurwetenschappelijk, bestuurlijk-juridisch of sociaalwetenschappelijk gebied.

STOWA werkt in hoge mate vraaggestuurd. We inventariseren nauwgezet welke kennisvragen waterschappen hebben en zetten die vragen uit bij de juiste kennisleveranciers. Het initiatief daarvoor ligt veelal bij de kennisvragende waterbeheerders, maar soms ook bij kennisinstellingen en het bedrijfsleven. Dit tweerichtingsverkeer stimuleert vernieuwing en innovatie. Vraaggestuurd werken betekent ook dat we zelf voortdurend op zoek zijn naar de 'kennisvragen van morgen' – de vragen die we graag op de agenda zetten nog voordat iemand ze gesteld heeft – om optimaal voorbereid te zijn op de toekomst.

STOWA ontzorgt de waterbeheerders. Wij nemen de aanbesteding en begeleiding van de gezamenlijke kennisprojecten op ons. Wij zorgen ervoor dat waterbeheerders verbonden blijven met deze projecten en er ook 'eigenaar' van zijn. Dit om te waarborgen dat de juiste kennisvragen worden beantwoord. De projecten worden begeleid door commissies waar regionale waterbeheerders zelf deel van uitmaken. De grote onderzoekslijnen worden per werkveld uitgezet en verantwoord door speciale programmacommissies. Ook hierin hebben de regionale waterbeheerders zitting.

STOWA verbindt niet alleen kennisvragers en kennisleveranciers, maar ook de regionale waterbeheerders onderling. Door de samenwerking van de waterbeheerders binnen STOWA zijn zij samen verantwoordelijk voor de programmering, zetten zij gezamenlijk de koers uit, worden meerdere waterschappen bij één en het zelfde onderzoek betrokken en komen de resultaten sneller ten goede van alle waterschappen.

De grondbeginselen van STOWA zijn verwoord in onze missie:

Het samen met regionale waterbeheerders definiëren van hun kennisbehoeften op het gebied van het waterbeheer en het voor én met deze beheerders (laten) ontwikkelen, bijeenbrengen, beschikbaar maken, delen, verankeren en implementeren van de benodigde kennis.

OVERZICHT TOEPASSINGSMOGELIJKHEDEN VAN PASSIVE SAMPLING

INHOUD

	TEN GELEIDE	
	SAMENVATTING	
	STOWA IN HET KORT	
1	INLEIDING	1
	1.1 Aanleiding	1
	1.2 Doel	1
	1.3 Doelgroep	2
	1.4 Leeswijzer	2
2	OVERZICHT DIVERSE BEMONSTERINGSTECHNIEKEN	3
3	PASSIVE SAMPLING	6
	3.1 Typen passieve samplers	6
	3.1.1 Partitiesamplers	6
	3.1.2 Adsorptiesamplers	9
	3.2 Veldtoepassing van passieve samplers	11
	3.3 Kosten indicatie	12
4	TOEPASSING VAN PASSIVE SAMPLERS	14
	4.1 Waar algemeen op gelet moet worden	14
	4.1.1 Wanneer is passieve sampling zinvol?	14
	4.1.2 Keuzes blootstellingsduur bij toepassing siliconenrubber passieve samplers	15
	4.1.3 Keuze blootstellingsduur adsorptiesamplers	16
	4.2 Praktische toepassing in het veld en laboratorium	16
	4.2.1 Veld	16
	4.2.2 Laboratorium	17
	4.3 Mogelijk onderzoek met passieve sampling	17

5	GESCHIKT TYPE PASSIVE SAMPLER	21
5.1	Overzicht toe te passen passieve samplers voor diverse stoffen	21
5.2	Toepassing passieve samplers voor enkele geneesmiddelen en NL-watchlist stoffen	25
6	BELANGRIJKE ZAKEN VOOR DE TOEKOMST	27
6.1	Maken siliconenrubbersamplers	27
6.2	Gestandaardiseerde extractie	27
6.3	Kwaliteitsborging	27
6.4	Aquo-standaard	27
6.5	Kalibratie parameters voor siliconenrubber	28
6.6	Kalibratie adsorptiesamplers	28
6.7	Helpdesk passieve sampling	29
7	REFERENTIES	30
	BIJLAGEN	
A	VERKLARENDE WOORDENLIJST	31
B	TYPE SAMPLERS	33
C	OVERZICHTSLIJST STOFFEN EN TOEPASSINGSMOGELIJKHEDEN PASSIVE SAMPLERS	39

1

INLEIDING

1.1 AANLEIDING

De chemische waterkwaliteit wordt meestal gemeten door middel van steekmonsters, waarbij met een bepaalde frequentie watermonsters van een liter worden genomen. Voor de monitoring van stoffen die met piekconcentraties in het water voorkomen, zoals gewasbeschermingsmiddelen, heeft deze manier van monitoren zijn beperkingen omdat door de momentopname de kans groot is dat de piekconcentratie wordt gemist. Daarnaast is door het beperkte monstervolume de detectielimiet van de chemische analyse vaak te hoog om de concentraties op het gewenste niveau te bepalen. Met name nieuwe stoffen, zoals hormoonverstorende stoffen, die in lage concentraties voorkomen zijn daardoor moeilijk te monitoren. Om deze redenen levert het vele geld dat besteed wordt aan monitoring met steekmonsters lang niet altijd bruikbare resultaten op.

Om voor deze tekortkomingen een oplossing te bieden zijn er alternatieve monitoringstechnieken ontwikkeld. Eén hiervan is passieve sampling. Hierbij wordt een sampler (een houder met adsorbent zoals siliconenrubber.) gedurende een bepaalde tijd in het water uitgehangen, waarbij organische stoffen door de sampler worden opgenomen. Deze stoffen worden vervolgens in het laboratorium uit de sampler geëxtraheerd en geanalyseerd.

De afgelopen jaren zijn er veel rapporten verschenen over de monitoring van de chemische waterkwaliteit met passieve sampling^{1,2} en is er tevens in opdracht van RWS een leidraad opgesteld voor het gebruik van siliconenrubber passieve sampling³. Enkele van deze projecten zijn uitgevoerd in samenwerking met waterschappen waarin zij ervaring hebben opgedaan met passieve samplers^{4,5,6}. Uit deze projecten is naar voren gekomen dat passieve sampling een goed alternatief kan zijn voor de monitoring van de waterkwaliteit ten opzichte van het nemen van streekmonsters. Alle onderzoeken hebben veel informatie opgeleverd over het gebruik van passieve samplers, maar tot op heden mist een praktisch overzicht hoe passieve samplers het beste toegepast kunnen worden, voor welke stoffen passieve samplers toepasbaar zijn en wanneer het inzetten van passieve samplers werkelijk een meerwaarde biedt ten opzichte van het nemen van een steekmonster. Diverse waterschappen hebben aangegeven dat een dergelijk praktisch overzicht gewenst is.

1.2 DOEL

Het doel van dit rapport is om een praktisch overzicht te geven voor de toepassing van passieve samplers. Hierbij ligt de focus op de toepassing in oppervlaktewater en effluent van rioolwaterzuiveringen, maar ook de toepassing in grondwater zal aan de orde komen.

In het overzicht worden verschillende typen monitoringsonderzoek beschreven waarbij de toepassing van passieve samplers meerwaarde kan bieden. Tevens wordt voor een groot aantal stoffen inzicht verschaft of passieve sampling toepasbaar is en welke type sampler het beste gebruikt kan worden.

1.3 DOELGROEP

Het rapport is opgesteld in opdracht van STOWA en is bedoeld voor medewerkers van waterschappen of provincies die betrokken zijn bij monitoring van waterkwaliteit. Het betreft hier onder andere medewerkers die het beleid op waterkwaliteitsmonitoring maken of die het monitoringsprogramma opzetten en inzicht moeten hebben of en hoe passieve sampling hierbij zinvol kan zijn. Tevens biedt het aanknopingspunten voor de medewerkers die een monitoringsplan in detail moeten invullen en daarbij keuzes moeten maken welke type samplers worden toegepast en waar precies gemonitord gaat worden.

1.4 LEESWIJZER

In hoofdstuk 2 wordt kort beschreven welke bemonsteringstechnieken toegepast kunnen worden binnen de waterkwaliteitsmonitoring. Passive sampling wordt hier als bemonsteringstechniek binnen het bredere kader van andere mogelijkheden geplaatst. Vervolgens wordt in hoofdstuk 3 dieper ingegaan op passieve sampling. Er wordt beschreven hoe de veldtoepassing eruit ziet, wat voor een soort passieve samplers er zijn en hoe deze samplers werken. Hierbij wordt tevens beschreven wat van belang is voor een praktisch toepassing en wat de voor- en nadelen zijn van de verschillende samplers.

Voor verschillende typen monitoringsonderzoek is beschreven hoe passieve sampling toegepast kan worden (hoofdstuk 4). In hoofdstuk 5 is voor een groot aantal stoffen een overzicht gegeven van de keuzemogelijkheden voor de toepassing van passieve samplers. Met deze lijst kan bepaald worden of passieve sampling mogelijk is, welke type sampler het meest geschikt is voor de monitoring van de betreffende stof en of een kwantitatieve dan wel kwalitatieve concentratie bepaald kan worden. De volledige lijst met stoffen is opgenomen in bijlage C. Aanbevelingen voor vervolgonderzoek naar toepassing van passieve sampling staan beschreven in hoofdstuk 6. In bijlage A is een verklarende woordenlijst opgenomen.

2

OVERZICHT DIVERSE BEMONSTERINGSTECHNIEKEN

Er zijn verschillende mogelijkheden om een watermonster te nemen. In Tabel 2.1 staat een overzicht van enkele technieken die worden toegepast in de waterkwaliteitsmonitoring met het type monster dat genomen wordt (bijvoorbeeld een totaalmonster of bemonstering van de vrij opgeloste concentratie). Tevens worden de voor- en nadelen van de verschillende technieken aangegeven.

STEEKMONSTER

Bij het nemen van een steekmonster wordt op een bepaald tijdstip een watermonster, met een relatief klein volume, genomen. Dit is de reguliere bemonstering die eenvoudig is toe te passen. Tevens kan normtoetsing uitgevoerd worden omdat met deze methode een totaalconcentratie (inclusief zwevend stof gebonden) wordt bepaald, waarop de huidige normtoetsing is gebaseerd. Het nadeel van deze manier van bemonsteren is dat de detectielimiet voor sommige stoffen onvoldoende laag is om op normniveau te kunnen meten. Dit geldt met name voor stoffen die slecht in water oplossen maar zich wel gemakkelijk ophopen in organismen. Ook voor enkele gewasbeschermingsmiddelen is de detectielimiet hoger dan de norm. Daarnaast is de toepassing van steekmonsters een momentopname waardoor de kans groot is dat met het nemen van steekmonsters piekconcentraties worden gemist.

GROOT VOLUME-EXTRACTIE

Bij groot volume Solid Phase Extractie (SPE) wordt water actief gepompt over een kolom met adsorptiemateriaal waaraan de stoffen die in het water zitten gebonden worden. Over het algemeen gebeurt de bemonstering op één moment en wordt er dus geen tijdsgemiddelde concentratie over een langere periode bepaald. Indien over een langere periode wordt gepompt is dit uiteraard wel het geval. Hoe meer water er geëxtraheerd wordt, hoe lager de concentratie is die gemeten kan worden omdat er meer stof op de SPE kolom wordt geconcentreerd. Toepassing van groot volume extractie is echter vanuit veldwerk technisch oogpunt niet praktisch. Daarnaast is het voor grondwater niet altijd mogelijk om een groot volume (meer dan een liter) op te pompen, als een peilbuis slecht water geeft. Deze methode wordt daarom vooral als monsteropwerking in het lab toegepast om stoffen in een watermonster te concentreren.

SORBICELL

Een ander type SPE-sampler is de Sorbicell. Deze bestaat uit een doorstroomcel gevuld met adsorptiemateriaal waar de stoffen zich aan binden die passief door de Sorbicell heen stromen. Tevens stroomt het water door een tweede compartiment waarin een zout aanwezig is. Dit zout lost op en door de hoeveelheid opgelost zout te bepalen kan het bemonsterd volume worden bepaald en de concentratie worden berekend. Het voordeel van de Sorbicell is dat deze voor langere tijd in het water hangt en er daardoor een tijdsgemiddelde concentratie bepaald wordt. Het nadeel is dat de huidige Sorbicells een beperkt opnamevolume heeft

van 500 ml. Hierdoor is de detectielimiet vergelijkbaar met die van een steekmonster indien het extract van een steekmonster ook wordt geconcentreerd. Indien een steekmonster onbehandeld wordt geanalyseerd kan met een geconcentreerd extract van een Sorbicell wel lager gemeten worden. Er wordt gewerkt aan een Sorbicell met een groter watervolume. Deze is echter nog niet beschikbaar.

PASSIVE SAMPLING

Bij passieve sampling vindt de opname van stoffen uit water plaats door diffusie naar de sampler waarin de stoffen veel beter oplossen of adsorberen. Alleen vrij opgeloste stoffen diffunderen en worden dus uit de waterfase bemonsterd. Stoffen aanwezig in het zwevend stof worden niet bemonsterd. Met passieve samplers wordt een vrij opgeloste concentratie bepaald. Dit is ook de fractie van de stoffen die beschikbaar is voor de opname door organismen.






Er bestaan twee types passieve samplers (1) partitiesamplers (evenwichtssamplers) waarin de te bemonsteren stof oplost (absorptie) en (2) adsorptiesamplers waaraan stoffen adsorberen (oppervlaktebinding). Deze twee typen samplers worden uitgebreid beschreven in Paragraaf 3.1. Het voordeel van passieve samplers is dat ze over het algemeen eenvoudig praktisch toepasbaar zijn en dat ze enkele weken tot maanden in het water uitgehangen kunnen worden. Gedurende deze periode worden stoffen die in het water zitten bemonsterd, en worden dus ook piekconcentraties meegenomen in de analyse. Uiteindelijk wordt een tijdsgemiddelde concentratie over de blootstellingsperiode verkregen.

Partitiesamplers kunnen voor stoffen die niet goed in water oplossen (hydrofobe stoffen) grote volumes water van enkele tientallen tot honderden liters bemonsteren. Hierdoor kan een lagere detectielimiet worden gehaald in vergelijking met een steekmonster. Adsorptiesamplers zijn geschikt voor stoffen die redelijk goed in water oplossen (hydrofiele stoffen) en daardoor niet of minder in partitiesamplers accumuleren. Het volume dat met de huidige adsorptiesamplers bemonsterd kan worden is enkele liters. Hierdoor zijn de detectielimieten een factor 5 tot 10 lager dan voor een steekmonster, afhankelijk van het de hoeveelheid water die is bemonsterd (bemonsterd volume).



Passieve samplers kunnen na blootstelling opgeslagen worden bij -20°C voordat ze geëxtraheerd worden. Aan het einde van een monitoringscampagne kunnen verschillende passieve samplers op hetzelfde moment geëxtraheerd en geanalyseerd worden. Dit heeft logistieke voordelen terwijl ook de vergelijkbaarheid toeneemt doordat alle samplers in één analysegang kunnen worden geanalyseerd.

Passieve samplers meten de vrij opgeloste (biologisch beschikbare) concentratie. De waterconcentraties die worden teruggerekend uit de analyses van de passieve samplers zijn niet officieel te toetsen aan de waterkwaliteitsnormen. Deze zijn namelijk over het algemeen gebaseerd op totaal concentraties. Voor met name nieuwe stoffen is de norm uitgedrukt in na filtratie, zoals 1-chloor-3-nitrobenzeen en 2-chloor-4-methylaniline). Dat is meer vergelijkbaar met vrij opgelost maar nog steeds niet hetzelfde, aangezien na filtratie stoffen die gebonden zijn aan opgelost organisch koolstof nog in het monster aanwezig zijn. Vaak is er ook een MAC-waarde (Maximaal Acceptabele Concentratie) beschikbaar. De vraag is of een tijdsproportioneel monster getoetst mag worden aan deze norm.

TABEL 2.1 OVERZICHT VAN VERSCHILLENDE TECHNIEKEN OM WATER TE BEMONSTEREN

Type bemonstering	Eigenschappen	Type monster	Voordelen	Nadelen
Reguliere bemonstering				
Steekmonster	 Ca. 1 l water bemonsteren op een bepaald tijdstip. Volume afhankelijk van analysepakket.	- Totaal- - concentratie	- Reguliere bemonstering - Goedkoop - Eenvoudig toe te passen - Normtoetsing mogelijk	- Relatief hoge detectielimiet - Momentopname. Pieken worden gemakkelijk gemist - direct extractie of analyse noodzakelijk na bemonstering
Extractie samplers (groot volume) SolidPhase Extractie (SPE)	 Stoffen in een groot volume water (tientallen liters) worden geconcentreerd met adsorptiemateriaal	- Vrij opgeloste stoffen - Gedeelte van DOC- of aan deeltjes gebonden stoffen - (is niet goed gedefinieerd)	- Lagere detectielimiet door bemonstering groot volume - Kunnen in de vriezer opgeslagen worden	- Pompcapaciteit nodig - Momentopname indien de bemonstering ineens wordt uitgevoerd - Geen officiële normtoetsing mogelijk
Sorbicell	 Waterstroom door buisje met adsorptiemateriaal. Oplosbaar zout wordt gebruikt om bemonsterd volume te bepalen.	- Vrij opgeloste stoffen - Gedeelte van DOC- of aan deeltjes gebonden stoffen - (is niet goed gedefinieerd)	- Tijds-proportioneel (gemiddelde concentratie) - Eenvoudig toe te passen - Extractie niet direct noodzakelijk	- Klein volume (max. 500 ml) - VnL voor hydrofiele stoffen - Geen officiële normtoetsing mogelijk
Passive samplers* Partitie samplers (evenwichts-samplers)	  Opname stoffen in adsorptiemateriaal. -Evenwichts-bemonstering van hydrofobe stoffen	- Vrij opgeloste stoffen	- Tijds-proportioneel - Groter volume dus lagere detectielimiet - Eenvoudig toe te passen - Samplers kunnen opgeslagen worden in de vriezer tot extractie - Vergelijkbaar aan biotaconcentraties	- Geen officiële normtoetsing mogelijk - Extra analysekosten mede afhankelijk van het aantal type samplers dat wordt gebruikt samplers

VERVOLG TABEL 2.1

Type bemonstering	Eigenschappen	Type monster	Voordelen	Nadelen
Adsorptie-sampler	  Binding van hydrofiele stoffen aan adsorptiemateriaal	Vrij opgeloste stoffen	- Tijds-proportioneel - Afhankelijk van type eenvoudig toe te passen - samplers kunnen opgeslagen worden in de vriezer tot extractie	- Geringer volume (enkele liters) - Bepaling semi-kwantitatief of indicatieve concentratie - Geen officiële normtoetsing mogelijk - Extra analysekosten mede afhankelijk van het aantal type samplers dat wordt gebruikt samplers

*Beschrijving van passieve samplers komt uitgebreid aan de orde in paragraaf 3.2

3

PASSIVE SAMPLING

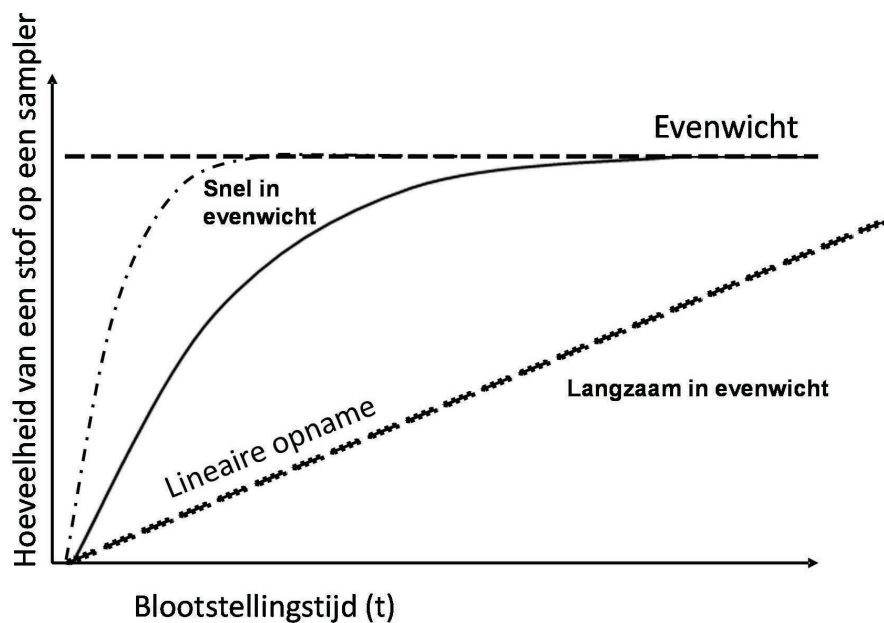
In de onderstaande paragrafen wordt uitgebreider beschreven hoe passieve samplers toegepast kunnen worden in het veld, en hoe de opname van stoffen daarin plaatsvindt. Tevens wordt beschreven welk type passieve samplers er zijn.

3.1 TYPEN PASSIVE SAMPLERS

3.1.1 PARTITIESAMPLERS

Partitiesamplers worden ook wel evenwichtssamplers genoemd omdat de concentratie van stoffen in deze sampler een evenwicht kan bereiken met die in de waterfase als de blootstelling lang genoeg is (Figuur 3.1). Sommige stoffen zijn snel in evenwicht (enkele dagen) en andere doen er lang over (jaren) en zullen daardoor gedurende de blootstellingsduur (van enkele weken) een lineaire opname hebben. De evenwichtstijd hangt voornamelijk af van de stoffeigenschappen, maar ook van het type sampler en waterturbulentie op de bemonsteringslocatie.

FIGUUR 3.1 ENKELE OPNAMEPROFIELEN VAN STOFFEN DOOR EEN PARTITIESAMPLER DIE MET VERSCHILLENDE SNELHEDEN IN EVENWICHT KOMEN MET DE SAMPLER



Partitiesamplers worden meestal voor slecht wateroplosbare (hydrofobe) stoffen gebruikt ($\log K_{ow} > 3$). Het materiaal van de partitiesampler is zo gekozen dat hydrofobe stoffen hierin veel beter oplossen dan in water. Op deze wijze worden de stoffen sterk geconcentreerd en daarmee beter meetbaar. Tevens lijkt de opname van hydrofobe stoffen aan deze samplers op de opname van deze stoffen in het vet van vissen.

3.1.1.1 BEPALEN VAN DE OPGELOSTE CONCENTRATIE IN HET WATER MET EEN PARTITIE SAMPLER

Een partitiesampler streeft altijd naar evenwicht en een geprepareerde “lege” sampler neemt daardoor stoffen op uit de waterfase. Omgekeerd zullen stoffen die in de sampler zitten ook worden afgegeven als die niet, of in een lagere concentratie, in water aanwezig zijn. Deze eigenschap wordt gebruikt om de vrij opgeloste waterconcentratie van de opgenomen stoffen te kunnen berekenen. Hiervoor wordt gebruik gemaakt van Performance Reference Compounds (PRC's). Dit zijn stoffen die voorafgaand aan het gebruik op de sheets worden aangebracht en die tijdens de blootstelling in water deels worden afgegeven. Het zijn meestal PCB's die niet in industriële mengsels voorkomen. De hoeveelheid PCB's die worden toegepast is erg klein waardoor er geen milieurisico bestaat voor het watersysteem. De afgifte van deze stoffen gebeurt met dezelfde snelheidsconstante als waarmee andere stoffen door de sampler worden opgenomen. Als de sampler begroeid raakt of in een vieze matrix zit, zal de afgifte van PRC's net zoveel beïnvloed worden als de opname en wordt hiervoor dus gecorrigeerd. Met behulp van een opnamemodel wordt de vrij opgeloste concentratie berekend. Voor een goede bepaling van de concentratie is het van belang dat een betrouwbare verdelingscoëfficiënt van de opgenomen stof tussen water en het materiaal van de partitiesampler ($K_{\text{polymeer-water}}$, ofwel K_{pw}) bekend is.

3.1.1.2 CRITERIA VOOR EEN PRAKTISCHE TOEPASSING

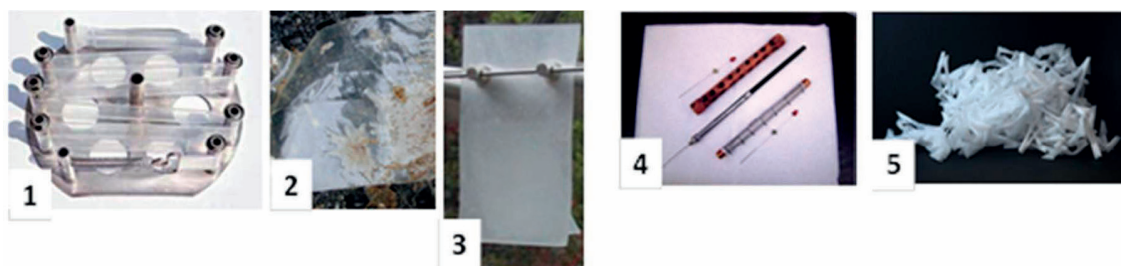
Voor de bepaling of een partitiesampler geschikt is voor de praktische toepassing zijn enkele criteria van belang:

- Stoffen moeten door het samplermateriaal geabsorbeerd worden en niet enkel aan de buitenkant blijven plakken;
- De diffusie door het materiaal moet dusdanig snel zijn dat dit de opnamesnelheid niet limiteert;
- Er moet een betrouwbaar opnamemodel beschikbaar zijn om vrij opgeloste concentratie te kunnen berekenen;
- De samplerwaterverdelingscoëfficiënt moet bekend zijn voor een kwantitatieve concentratiebepaling. Voor zeer hydrofobe (slecht wateroplosbare) stoffen is dat niet nodig aangezien hiervoor bij een gangbare blootstellingstijd van enige weken geen evenwicht wordt bereikt;
- De sampler moet robuust zijn en makkelijk toe te passen in het veld;
- Extractie van de samplers moet op eenvoudige wijze kunnen gebeuren.

3.1.1.3 SOORTEN PARTITIESAMPLERS

In Tabel 3.1 staat een overzicht van partitiesamplers die regelmatig in het veld worden toegepast. De verschillen tussen de samplers zijn met name terug te voeren naar verschillen in het gebruikte absorptiemateriaal. In Figuur 3.2 staan foto's van de verschillende samplers en in Bijlage B is een beschrijving van de verschillende samplers opgenomen.

FIGUUR 3.2 VERSCHILLENDE TYPE PARTITIESAMPLERS: 1: SPMD, 2: LDPE, 3: SILICONENRUBBER, 4: SPME, 5: POM



TABEL 3.1 OVERZICHT VAN VEEL TOEGEPASTE PARTITIESAMPLERS MET SAMPLEREIGENSCHAPPEN

Sampler	Materiaal	Commercieel beschikbaar	Diffusie-snelheid	Robuust	Toepasbaarheid	Extractie	Opmemodel
1: SPMD	Synthetisch vet triolein tussen LPDE-membranen	Ja (met PRC's)	Kan limiterend zijn	Triolein kan lekken	Eenvoudig	Kost veel tijd en veel organisch oplosmiddel	Beschikbaar
2: LDPE	Low Density Poly-Ethylene	Ja	Kan limiterend zijn	Ja	Eenvoudig	Eenvoudig Kunnen na extractie hergebruikt worden	Beschikbaar
3: Siliconenrubber	Poly-dimethylsiloxaan	Ja, eenmalig preparatie nodig om stoffen te verwijderen die analyse verstoren. -Sheet is herbruikbaar.	Niet limiterend	Ja	Eenvoudig	Eenvoudig, Kunnen na extractie hergebruikt worden	Beschikbaar
4: SPME	Silica fiber met diverse soorten coatings zoals PDMS of poly-ethleenglycol	Ja -Fiber is herbruikbaar.	Niet limiterend	Kwetsbaar bij gebruik in het veld	Eenvoudig	Direct in injectiepoort GC Kunnen na extractie hergebruikt worden	Niet beschikbaar
5: POM	Polyoxy-methylene	Ja Sheet is herbruikbaar	Limiterend	Ja	Eenvoudig	Eenvoudig Kunnen na extractie hergebruikt worden	Niet beschikbaar

SPMD, LPDE, siliconenrubber en POM bestaan uit een sheet van een bepaald polymeer waar stoffen in kunnen diffunderen. SPME bestaat uit een fiber met absorptiemateriaal aan de buitenkant. SPMD's zijn verder gevuld met synthetisch vet (triolein) waarin de stoffen zich ophopen.

Aan SPMD, LPDE en siliconenrubber kunnen Performance Reference Compounds (PRC's) toegevoegd worden om het bemonsterd volume te berekenen en dus om de vrij opgeloste concentratie te bepalen. Deze PRC's moeten bij de preparatie van de samplers gedoseerd worden. Commercieel zijn alleen SPMD's met PRC's beschikbaar.

Siliconenrubber en LPDE samplers worden het meeste toegepast. Uit de tabel komt naar voren dat de siliconenrubber de meest geschikte partitiesampler is, met name omdat er een betrouwbaar model voor beschikbaar is om de bemonsterde volumes mee te bepalen. Ook is de diffusie in het materiaal dusdanig groot dat hierdoor de opname van stoffen niet geremd wordt. Daarnaast kan siliconenrubber een grotere range aan stoffen opnemen dan LPDE. In Nederland wordt door Rijkswaterstaat (RWS) al >10 jaar monitoring met siliconenrubber samplers uitgevoerd. Ook door andere partijen, waaronder Deltares, wordt deze sampler veel

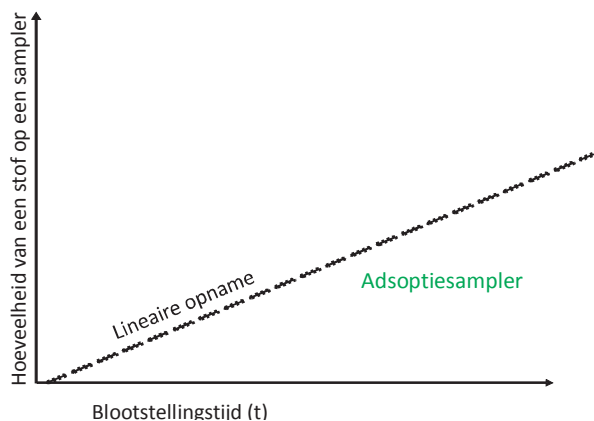
gebruikt en is veel kennis aanwezig over toepassing van deze sampler en het opnameproces van deze sampler. In 2012 is voor de toepassing van siliconenrubber als passieve sampler een leidraad opgesteld zodat deze techniek ook door andere partijen, zoals waterschappen, kan worden toegepast³. In deze leidraad staat waar de siliconenrubbersheets besteld kunnen worden, hoe ze geprepareerd, uitgehangen, geanalyseerd etc. moeten worden. Tevens is er een rapport opgesteld van de mogelijkheden voor de toepassing van passieve sampling met siliconenrubber in de KRW-monitoring⁷.

3.1.2 ADSORPTIESAMPLERS

In adsorptiesamplers worden de organische stoffen gebonden aan adsorptiemateriaal. Dit is korrelige materiaal dat op zijn plaats wordt gehouden door een membraan in een kunststof of RVS omhulsel. Adsorptiesamplers binden de stoffen (aan het oppervlak) en geven deze in beginsel niet meer af aan het water. Er wordt aangenomen dat bij voldoende grote capaciteit van het adsorptiesampler de opname lineair is en er dus geen evenwicht bereikt wordt (Figuur 3.3).

Deze type samplers zijn over het algemeen geschikt voor de monitoring van meer hydrofiele/polaire stoffen. In beperkte mate kunnen de samplers ook stoffen met geladen groepen (ionogene stoffen) opnemen zoals PFOS en zuurherbiciden.

FIGUUR 3.3 OPNAME VAN STOFFEN DOOR ADSORPTIESAMPLERS



3.1.2.1 BEREKENING VRIJ OPGELOSTE CONCENTRATIE MET ADSORPTIESAMPLERS

Omdat stoffen niet worden afgegeven door de samplers is het niet mogelijk om via de afgifte van aan de sampler toevoegde PRC's het bemonsterd volume te bepalen. Momenteel wordt enkel een goede indicatie verkregen van het bemonsterd volume uit de opname van een stof waarvan de concentratie in de waterfase op andere wijze is bepaald. Zo komen musks en PAK's in concentraties in water voor die vaak ook in het extract van een adsorptiesampler te bepalen zijn. Deling van de opgenomen hoeveelheid door de concentratie in de waterfase geeft een maat voor het bemonsterd volume. De concentratie in de waterfase kan worden herleid uit de opname van een parallel blootgestelde partitiesampler. Hierbij moet natuurlijk gelden dat alle stoffen een gelijk opnameproces volgen, wat overigens nog niet is aangetoond. Dit impliceert dat de vrij opgeloste concentratie berekend met het op bovenstaande wijze verkregen bemonsterd volume semi-kwantitatief is. Indien een adsorptiesampler zonder parallel een partitiesampler wordt blootgesteld kan enkel een indicatieve concentratie bepaald worden. Dit is een gemiddelde concentratie over de gehele blootstellingsduur van de sampler.

3.1.2.2 CRITERIA VOOR DE PRAKTISCHE TOEPASSING VAN ADSORPTIESAMPLERS

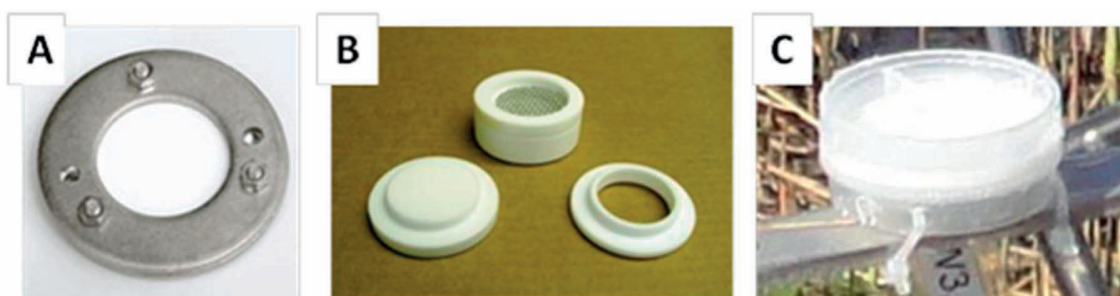
Voor de keuze van adsorptiesamplers zijn de volgende criteria van belang.

- Stoffen moeten door het membraan kunnen diffunderen en niet aan het membraan adsorberen;
- Het adsorptiemateriaal moet voldoende bindingscapaciteit hebben;
- Sampler moet robuust zijn en makkelijk toe te passen in het veld
- Extractie van de samplers moet op eenvoudige wijze kunnen gebeuren.

3.1.2.3 TYPE ADSORPTIESAMPLERS

Er zijn verschillende type adsorptiesamplers waarbij verschillende soorten adsorptiemateriaal en membranen worden gebruikt (Figuur 3.4). Een beschrijving van de samplers is opgenomen in bijlage B. Veel toegepaste samplers zijn de POCIS-sampler, de Chemcatcher met Empore disk en de Speedisk.

FIGUUR 3.4 VEEL TOEGEPASTE ADSORPTIESAMPLERS A: POCIS-SAMPLER, B: CHEMCATCHER MET EMPORE DISK, C: SPEEDISK



Uit onderzoek is gebleken dat de bindingscapaciteit/sterkte van de adsorptiematerialen die in de verschillende samplers worden toegepast vergelijkbaar is⁸. Het aanwezige membraan, dat gebruikt wordt om het adsorptiemateriaal op zijn plaats te houden heeft echter ook invloed op het opnameproces. Het is gewenst dat diffusie snel verloopt door het membraan en dat er geen stoffen aan adsorberen. Het blijkt dat polysulfonether (PES) membranen, die worden gebruikt bij de POCIS-sampler en ook in sommige Chemcatchers, stoffen sterk adsorberen en dat ze daardoor nauwelijks het adsorptiemateriaal bereiken. In glasfiberfilters, zoals gebruikt in de Speedisk blijken stoffen goed te diffunderen⁹. Dit maakt deze samplers beter geschikt voor toepassing. In Chemcatcher-constructies kunnen ook glasfiberfilters worden toegepast. Voor een POCIS-sampler is dat niet mogelijk.

TABEL 3.2 OVERZICHT VAN VEEL TOEGEPASTE ADSORPTIESAMPLERS MET SAMPLEREIGENSCHAPPEN

Sampler	Commercieel	membraan	robuust	toepasbaarheid	Extraheerbaarheid
A: POCIS	Ja	PES	Redelijk*	Eenvoudig	Eenvoudig
B: Chemcatcher met Empore disk**	Ja	Spectrapor/ PES/glasfiber is mogelijk	Ja	Eenvoudig	Eenvoudig
C: Speedisk***	Ja	Glasfiber	Ja	Eenvoudig	Eenvoudig*

* Membraan kan scheuren gedurende blootstelling

** De Empore disk is een teflon plaatje met adsorptiemateriaal. Afhankelijk van het soort adsorptiemateriaal kan deze geschikt kan zijn voor polaire stoffen of voor apolaire. Gezien echter de beperkte opnamecapaciteit is deze sampler voor apolaire stoffen niet erg geschikt omdat niet boven de detectielimiet gemeten kan worden en daarom niet in Tabel 2.1 opgenomen.

*** Speedisk wordt in laboratoria gebruikt om water te extraheren. Water wordt over de Speedisk gegoten en vervolgens worden de stoffen weer van de Speedisk geëxtraheerd. Bij toepassing in het veld als passieve sampler vindt de extractie als het ware al in het veld plaats en kan in het laboratorium de Speedisk op normale manier geëxtraheerd worden.

De Speedisk en Chemcatchers met Empore disks (een inerte filter van bijvoorbeeld teflon met daarin de sorbentdeeltjes verwerkt) zijn beide goed toepasbaar (Tabel 3.2). Wel bevat een Speedisk meer adsorptiemateriaal dan een Empore disk waardoor de adsorptiecapaciteit groter is. De Speedisk is eenvoudig in een standaard laboratorium te extraheren en is veelvuldig door Deltares toegepast. De gegevens in overzichtstabellen in Hoofdstuk 5, over de toepassing van samplers bij verschillende stoffen zijn in ieder geval geldig voor Speedisk, maar naar verwachting ook voor andere adsorptiesamplers. De POCIS vormt daarop een uitzondering vanwege de sterke membraanadsorptie. Deze sampler bleek bij een veldtoepassing ook niet zo robuust omdat het membraan makkelijk scheurt⁹.

3.2 VELDTOEPASSING VAN PASSIVE SAMPLERS

De meeste beschreven samplers hebben gemeen dat ze eenvoudig toe te passen zijn in het veld. In Figuur 3.5 staan enkele voorbeelden van hoe passieve samplers toegepast worden in het veld.

FIGUUR 3.5 VELDTOEPASSING PASSIVE SAMPLERS. BOVEN: SAMPLERS UITGEHANGEN BIJ WS NOORDERZIJLVEST (BRON DELTARES). ONDER: PASSIVE SAMPLERS UITGEHANGEN DOOR WS GROOT SALLAND (BRON WS GROOT SALLAND)



De samplers worden in het laboratorium voorbereid en in potjes worden ze naar het veld gebracht en in het water uitgehangen in een samplingskooi (Fig. 3.1-boven) of aan een ophanggaas (Fig. 3.1 - onder). De keuze voor het type ophangstelsel wordt afgestemd op de locatie. Na blootstelling van de passieve samplers in het water gedurende een periode van enkele weken tot maanden worden de samplers in het veld schoongemaakt en opgeslagen in de vriezer totdat de gehele monitoringscampagne is afgelopen. Vervolgens kunnen ze allemaal tegelijkertijd geëxtraheerd en geanalyseerd worden. Dit levert schaalvoordelen op en wordt de analysefout verkleind door één analysegang.

3.3 KOSTEN INDICATIE

Bij toepassing van passive sampling moet met de volgende kosten rekening gehouden worden. Voor partitiesamplers zijn de kosten voor siliconenrubbersamplers opgenomen omdat deze als veelvuldig toegepast worden. Voor adsorptiesamplers is een indicatie gegeven voor de Speedisk en de Chemcatcher.

- **Sampler materiaal:**
 - **Partitiesampler:** Siliconenrubbers, voorberekt en voorzien van PRC's, kosten vooralsnog 60-100 euro per set (bestaande uit 6 sheets). Het rubber zelf kost ca. 3 euro voor één set. De overige kosten worden bepaald door de tijd die nodig om de sheets voor te bewerken en te voorzien van PRC's. Hoe groter het aantal samplers dat wordt toegepast hoe te lager deze kosten.
Siliconenrubbersheets kunnen hergebruikt worden. Het voorbereken van de sheets hoeft alleen de eerste keer te gebeuren, als ze nieuw zijn. Hierbij worden componenten uit de sheets verwijderd die de latere analyse kunnen verstoren. De PRC's moeten wel elke keer opnieuw gedoseerd worden. Het voorbereken en het voorzien van PRC's kan met een grote hoeveelheid sheets tegelijk gebeuren. Hoe meer sheets ineens worden opgewerkt/gespiked, hoe goedkoper de samplers worden. Indien dit commercieel wordt opgepakt of centraal bij één waterschapslaboratorium gebeurt, kan de prijs aanzienlijk naar beneden.
- **Adsorptiesampler;** de kosten voor een adsorptie sampler zijn afhankelijk van het type dat gebruikt wordt. De kosten een Speedisksampler (bestaande uit 2 stuks die samen 1 sampler vormen) bedragen ca. 30 euro waarvan 20 euro voor het materiaal en 10 euro voor de voorberekingskosten. Voor de Chemcatcher zijn de kosten ongeveer 50 euro per stuk. Waarvan ca. 10 euro voor de Empore disks met het adsorptiemateriaal. Er zijn twee type Chemcatcher behuizingen; herbruikbare van teflon of wegwerp van recyclebaar plastic.
- **Extractie:** zolang de extractie van een passive sampler nog geen routine is zal dit meer tijd kosten dan de routinematige extractie van een watermonster. Zodra extractie van een passive sampler ook meer routinematig wordt, zal de extractietijd en daarmee de kosten dalen. Uiteindelijk zullen de kosten bij routinematige toepassing waarschijnlijk niet veel afwijken van de extractie van een steekmonster. De 6 sheets die een siliconenrubber sampler vormen worden als 1 monster geëxtraheerd.
- **Analyse:** de analyse van een passive samplingextract gaat op dezelfde wijze als de analyse van een watermonster extract. Echter, wanneer PRC's zijn aangebracht, zal ook analyse van deze verbindingen plaats moeten vinden. Dit geeft extra analysekosten ten opzichte van een steekmonster. Afhankelijk van de prijs van een PCB-analyse bij een laboratorium is dat 100 à 200 euro.
- Indien een semi-kwantitatieve/indicatieve concentratie gewenst is van de Speedisk, dient op zowel de Speedisk als de parallel blootgestelde siliconenrubber sampler geanalyseerd te worden op PAK's of een andere veelvoorkomende verbinding die goed door beide samplers wordt opgenomen.
- **Data verwerking:** de gehalten van de stoffen op de samplers moeten omgerekend worden naar concentraties. Er is daarom extra tijd nodig voor de data verwerking.

Indien één type sampler wordt toegepast zijn de kosten een factor 1,5 à 2 hoger ten opzichte van een steekmonster, zolang het niet routinematig is voor een lab. Als twee type samplers worden toegepast is het vooralsnog een factor 2 à 3 hoger. Ondanks dat de kosten van passieve sampler in euro's (vooralsnog) hoger zijn dan de kosten van steekmonsters moet er wel bedacht worden dat er lagere concentraties gemeten kunnen worden en er meerdere stoffen kunnen worden gedetecteerd. De monitoringsresultaten leveren dus beter inzicht in de waterkwaliteit op. Bovendien kunnen samplers voor langere tijd worden blootgesteld (enkele weken tot maanden afhankelijk van de soort stoffen die gemeten worden) waardoor zij mogelijk meerdere steekmonsters kan vervangen.

4

TOEPASSING VAN PASSIVE SAMPLERS

4.1 WAAR ALGEMEEN OP GELET MOET WORDEN

4.1.1 WANNEER IS PASSIVE SAMPLING ZINVOL?

Een groot aantal stoffen is in eerdere onderzoeken met passieve sampling bemonsterd, waardoor bekend is of passieve sampling geschikt is voor bemonstering van deze stoffen. Voor nieuwe te onderzoeken stoffen is deze informatie niet beschikbaar. Om inzicht te geven of passieve sampling wel of niet gebruikt kan worden voor een bepaalde stof, zijn er enkele afwegingen in een flowschema gezet (Figuur 4.1). Uit dit schema volgt of, en welk type passieve sampler het beste kan worden toegepast. Het betreft een globale afweging voor een eerste inschatting.

FIGUUR 4.1 FLOWSHEMA 1 VOOR EEN GLOBALE BEPALING OF PASSIVE SAMPLING ZINVOL IS EN WELK TYPE SAMPLER HET BESTE TOEGEPAST KAN WORDEN



- 1 Bepaal of normtoetsing noodzakelijk is. De methode van passieve sampling is nog niet officieel gevalideerd en internationaal niet erkend voor normtoetsing waardoor een legale basis ontbreekt. Als het om stoffen met $\log Kow < 5$ gaat en normtoetsing is noodzakelijk, is het gebruik van alleen passieve sampling niet zinvol omdat geen totaalconcentraties, maar vrij opgeloste concentraties bepaald worden. De combinatie met een steekmonster geeft wel extra inzicht over de aanwezigheid van stoffen in de tussenliggende periode tussen de steekmonsters. Echter voor stoffen zoals PCB's en zwaardere PAK's, die zeer slecht water oplosbaar zijn ($\log Kow > 5$) is passieve sampling mogelijk de enige oplossing omdat deze stoffen met een steekmonster niet goed bepaald kunnen worden. De KaderRichtlijnWater (KRW) staat voor deze stoffen alternatieve monitoringstechnieken toe.
- 2 Bekijk of de stof op de lijst van Hoofdstuk 5 staat. In deze lijst is voor een groot aantal stoffen weergegeven welke sampler gebruikt kan worden.
- 3 Staat de stof niet op de lijst, bepaal wat de wateroplosbaarheid ($\log Kow$) is van de te meten stof. De $\log Kow$ is namelijk een belangrijke parameter voor welk type sampler het meeste geschikt is. De $\log Kow$ is voor de meeste stoffen beschikbaar en kan eenvoudig opgezocht worden met het programma EPI Suite TM. Dit is gratis te downloaden op <http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm>.
 - Is $\log Kow < 2$ dan is de toepassing van passieve samplers over het algemeen niet zinvol omdat de stoffen dusdanig goed in water oplossen dat opname door een passieve sampler marginaal is.
 - Is $\log Kow$ 2-3 dan is een stof redelijk hydrofiel en is een adsorptiesampler waarschijnlijk geschikt. Dit kan eenvoudig getest worden door een water (ca. 1 liter) met daarin de stof over een SPE-kolom te gieten. Hecht de stof aan de SPE-kolom dan kan een adsorptiesampler worden toegepast. Hecht de stof niet dan is passieve sampling niet zinvol.
 - Is $\log Kow > 3$ dan kan over het algemeen een siliconenrubbersampler worden toegepast. Het toepassen van een adsorptiesampler is niet zinvol vanwege de kleinere opnamecapaciteit en daarmee samenhangend bemonsterd volume in vergelijking met siliconenrubber.

Uit de stoffenlijsten in hoofdstuk 5 en Bijlage C blijkt dat deze scheiding niet voor alle stoffen zo strikt is. Indien er nieuwe stoffen zijn die een hoge prioriteit hebben kan met aanvullend onderzoek bepaald worden welke sampler werkelijk het meest geschikt is.

4.1.2 KEUZES BLOOTSTELLINGSDUUR BIJ TOEPASSING SILICONENRUBBER PASSIVE SAMPLERS

Bij gebruik van siliconenrubber passieve samplers kan de tijd waarbinnen evenwicht wordt bereikt leidend zijn voor de keuze van de blootstellingsduur. Als een tijdsgemiddelde concentratie gewenst is, is dit ongeveer de halve evenwichtstijd (TWA).

Bij het meten van een brede set aan stoffen kan gekeken worden welke stoffen de langste blootstellingsduur nodig hebben om evenwicht te bereiken en de blootstellingsduur in de monitoring daarop af te stemmen. Voor stoffen die sneller in evenwicht zijn dan de totale blootstellingsduur zal de concentratie die is bepaald alleen het tijdsgemiddelde weergeven over een laatste periode. Als bijvoorbeeld een sampler 4 weken uithangt en de sampler is in 10 dagen in evenwicht dan is voor deze stof een het tijdsgewogen gemiddelde bepaald van de laatste 5 dagen. Van de concentratie in de periode ervoor is niets bekend. De sampler is die als het ware "vergeten".

Indien er stoffen bij zitten die vooral in de eerste periode van de blootstellingsduur in het water worden verwacht maar die belangrijk zijn om te meten moet de blootstellingsduur daarop worden afgestemd. In de praktijk wordt in monitoringsonderzoek over het algemeen wel een vaste blootstellingsduur gekozen. Bij een brede screening zijn de verkregen concentraties een mix een tijdsgemiddelde concentraties over de gehele blootstellingsduur en concentraties verkregen over een beperkt deel van de blootstellingsperiode.

In grondwater stroomt het water dusdanig langzaam dat voor de veel stoffen een sampler 3-12 maanden uitgehangen kan worden.

Om inzicht te hebben in de periode voordat de sampler in evenwicht is en over welke periode een gemiddelde concentratie wordt bepaald, kunnen de volgende globale regels gehanteerd worden:

- Is $\log K_{ow}$ 3-4 dan is de sampler in enkele dagen (< week) in evenwicht
- Is $\log K_{ow}$ 4-5, dan duurt het enkele weken voordat de sampler in evenwicht is,
- Is $\log K_{ow}$ >5 dan maakt de maximale blootstellingsduur niet uit want de sampler heeft maanden nodig om in evenwicht te komen. Voor deze stoffen moet echter de blootstellingsduur niet te kort zijn, minimaal enkele weken, om een voldoende groot volume te bemonsteren en dus voldoende van de oplosbare stoffen op de sampler te krijgen

4.1.3 KEUZE BLOOTSTELLINGSDUUR ADSORPTIESAMPLERS

In principe nemen adsorptiesamplers continue op en wordt er vanuit gegaan dat de opnamecapaciteit voldoende groot is om niet vol te raken (gedurende de blootstellingsperiode). De samplers kan dus in principe een onbeperkt aantal weken uitgehangen worden. Echter bij blootstelling langer dan 3 maanden kunnen er mogelijk wel dusdanig veel stoffen in de sampler komen dat de sampler toch volloopt. Hierom wordt een maximale blootstelling van ca. 3 maanden geadviseerd voor adsorptiesamplers.

4.2 PRAKTISCHE TOEPASSING IN HET VELD EN LABORATORIUM

De toepassing van siliconenrubber samplers staat uitgebreid beschreven in “Leidraad voor de passieve sampling van hydrofobe stoffen in water met siliconenrubber samplers”³

4.2.1 VELD

Bij toepassing in het veld moeten op de volgende praktische zaken gelet worden:

- Bij het uithangen van samplers in het veld moet erop gelet worden dat de adsorptiesamplers gedurende het uithangen vochtig blijven of onder water staan
- Gedurende de gehele bemonsteringsperiode moeten de samplers onder water staan.
- De samplers mogen de waterbodem niet raken
- Er dient enige stroming in het water aanwezig te zijn. Hoe harder het water stroomt hoe sneller de opname van stoffen plaatsvindt
- Bij het ophalen van de samplers moeten de samplers met gebiedseigen water schoongemaakt worden:

Siliconenrubber:

- De sheets worden met een schuurspons schoongemaakt in een metalen bak met gebiedseigen water
- Deze schuurspons bestaat alleen uit een schuurgedeelte en is gespoeld met methanol
- De schoongemaakte sheets blijven in het water in de bak totdat ze allemaal klaar zijn en worden vervolgens droog geveegd met een tissue en in een potje gestopt

Adsorptiesamplers:

- De samplers worden zo goed mogelijk met het schuursponsje schoongeveegd
- Na het schoonmaken worden ze droog geveegd en in een pot opgeslagen

4.2.2 LABORATORIUM

- De samplers kunnen na aankomst in het laboratorium gelijk geëxtraheerd of in de vriezer opgeslagen worden voor minimaal enkele maanden voordat ze verder opgewerkt worden. Een maximale tijd is niet bekend.
- De extractie van siliconenrubber sheets kan met soxhlet of dialyse (zie de Leidraad voor een uitgebreide beschrijving)
- Voor adsorptiesamplers is geen leidraad beschikbaar en de extractie van de adsorptie-sampler is afhankelijk van het type sampler dat gekozen wordt.
- Speedisk
- Deze sampler wordt op dezelfde wijze geëxtraheerd als bij de toepassing van een watermonster.
- Indien de analyse van PAK's noodzakelijk is dient een oplosmiddel zoals dichloormethaan en MtBE gebruikt te worden
- De sampler moet langzaam elueren

POCIS

- Het adsorptiemateriaal wordt uit de sampler verwijderd en geëxtraheerd volgens de beschrijving van de leverancier

Emporedisk

- De disk wordt direct met aceton geëxtraheerd en het monster wordt eventueel omgezet naar het juiste solvent voor de analyse
- Bij de extractie van samplers is het belangrijk dat een processtandaard wordt meegenomen om eventuele verliezen te signaleren en te kunnen corrigeren. Dit is overigens bij de extractie van een watermonster ook aan te bevelen.
- De extracten kunnen met de gangbare analysemethoden geanalyseerd worden

4.3 MOGELIJK ONDERZOEK MET PASSIVE SAMPLING

Waterschappen en andere waterbeheerders voeren verschillende soorten monitoringsonderzoek uit met betrekking tot waterkwaliteit. Bij deze onderzoeken kan de toepassing van passieve sampling in meer of mindere mate zinvol zijn. In dit hoofdstuk is per soort onderzoek beschreven waarom en hoe passieve sampling gebruikt kan worden. In de onderstaande tabel (Tabel 4.1) is dit samengevat en daaronder volgt een korte beschrijving per soort onderzoek.

TABEL 4.1 OVERZICHT SOORTEN MONITORINGSONDERZOEK EN DE MOGELIJKHEID VAN TOEPASSING VAN PASSIVE SAMPLERS.

Vraag	Toepassing	Wat is gewenst?	Type samplers/monster
1) Welke stoffen komen in het watersysteem voor (Brede screening op aanwezigheid stoffen)	<ul style="list-style-type: none"> Breed inzicht in waterkwaliteit Handhaving: opsporen of illegale lozing of gebruik plaatsvindt Early warning in grondwater 	<ul style="list-style-type: none"> Veel stoffen meten Lage concentraties Pieken bemonsteren Aanafwezigheid van stoffen (indicatieve concentratie is voldoende) 	<ul style="list-style-type: none"> Brede range aan stoffen: Siliconenrubber en adsorptiesampler Gericht op enkele stoffen: siliconenrubber of adsorptiesampler afhankelijk van stofeigenschap Voor toepassing in grondwater is toepassing PRC's wellicht niet mogelijk
2) In welke concentraties komen stoffen voor? Vormt dit een ecologisch risico?	<ul style="list-style-type: none"> Toestand en trendmonitoring van prioritaire of overige verontreinigende stoffen Monitoring grondwater bij bodemverontreinigingen Ter vervanging van meten in biota 	<ul style="list-style-type: none"> Kwantitatieve concentratie Normtoetsing Bemonstering zonder verstoring grondwater (bodemverontreiniging) Opname stoffen vergelijkbaar met vet (biota) 	<ul style="list-style-type: none"> Type sampler afhankelijk van stoffen die gemeten moeten worden. <p>Bodemverontreinigingen</p> <ul style="list-style-type: none"> Siliconenrubber voor hydrofobe verbindingen zoals PAK's Zeer hydrofiele verbindingen zoals vinylchloride zijn niet mogelijk <p>Biota</p> <ul style="list-style-type: none"> Siliconenrubber
3) Waar komen de stoffen vandaan?	<ul style="list-style-type: none"> Handhaving: bronnen opsporen waar illegale lozing/gebruik plaatsvindt Toestand en trendmonitoring van prioritaire of overige verontreinigende stoffen Oorsprong achterhalen na calamiteit bij drinkwaterinnamepunten Bepalen emissieroutes gewasbeschermingsmiddelen Foutieve aansluitingen riolering 	<ul style="list-style-type: none"> Monitoring op het moment van lozing/ emissie/ piekconcentratie Afhankelijk van toepassing indicatieve concentratie (aanof afwezigheid) of (semi) kwantitatieve concentraties Lage concentraties Gericht op enkele stoffen 	<ul style="list-style-type: none"> Type sampler afhankelijk van te monitoren stoffen Illegale lozing Aanvullende parameters (pH, EGV) voor momentbepaling <p>T&T-monitoring:</p> <ul style="list-style-type: none"> -Steekmonsters op T&T-locaties Siliconenrubber en adsorptiesamplers stroomopwaarts in stroomgebied voor nader onderzoek <p>Emissie GBM</p> <ul style="list-style-type: none"> Drift: siliconenrubber Uitspoeling: adsorptiesampler
Wat is het effect?	<ul style="list-style-type: none"> Toepassing passive samplerextracten in bioassays 	<ul style="list-style-type: none"> -Veel stoffen meten Lage concentraties Pieken bemonsteren 	<ul style="list-style-type: none"> Siliconenrubber zonder PRC's en adsorptiesamplers

1) Welke stoffen komen in het watersysteem voor?

Brede screening van oppervlakte water en grondwater wordt uitgevoerd om een beeld te krijgen welke stoffen in het water voorkomen. Het wordt toegepast bij reguliere monitoring van oppervlaktewater kwaliteit en voor handhavingdoeleinden om te bepalen of er illegale lozingen of illegaal gebruik van bijvoorbeeld gewasbeschermingsmiddelen plaatsvinden. Ook vindt brede screening van stoffen plaats in de monitoring van de kwaliteit van grondwater voor drinkwaterwinning. Bij al deze onderzoeken is in eerste instantie de aan-afwezigheid van stoffen het belangrijkste om te weten. In principe is dus een indicatieve concentratie voldoende. Voor een goed beeld van de waterkwaliteit en het monitoren van een lozing is van belang om ook pieken te bemonsteren. Met steekmonsters is de kans groot dat deze niet bemonsterd worden, terwijl dat met passive sampling wel mogelijk is. De hoogte van de piek en het moment is niet te bepalen met passive sampling maar de verhoogde concentratie wordt wel verdisconteerd in de gemiddelde concentratie.

Tevens is het belangrijk om lage stofconcentraties te kunnen detecteren. Het gebruik van de samplers verlaagd de detectiegrens met een factor 5-100-afhankelijk van het watervolume dat bemonsterd wordt.

Om een brede range aan stoffen te detecteren wordt geadviseerd om zowel een partitiesampler als een adsorptiesampler toe te passen.

Voor een brede screening voor reguliere monitoring van bijvoorbeeld gewasbeschermingsmiddelen kunnen de samplers enkele weken uitgehangen worden. Als dit een aantal periodes

achter elkaar gebeurd kunnen ook seizoensvariaties gemonitord worden. De aanwezigheid van een stof kan hiermee al aan een specifieke bron of toepassing gekoppeld worden. De samplers kunnen op een breed pakket aan stoffen geanalyseerd worden.

Voor handhaving kunnen samplers ook enkele weken worden blootgesteld. Echter met een passive sampler kan niet het exacte lozingsmoment worden bepaald. Hiervoor zou gebruik gemaakt kunnen worden van het continu meten van bijvoorbeeld de EGV of pH. Passive samplers worden gelijktijdig blootgesteld met de continue metingen. Zodra de EGV of pH een afwijking laten zien kan de passive sampler geanalyseerd worden of er werkelijk een lozing heeft plaatsgevonden. Indien het niet mogelijk is een aanvullende parameter continue te meten maar een inschatting van het lozingsmoment wel gewenst is, moeten de tijdsintervallen tussen het wisselen van een sampler niet te lang zijn (bijvoorbeeld twee weken). Hierbij wordt de monitoringsperiode zo klein mogelijk te houden.

In grondwater kunnen de samplers enkele maanden worden blootgesteld in de peilbuizen. Omdat grondwater langzaam stroomt, is het bemonsterd volume in de tijd klein. Bij de toepassing van siliconenrubber moet goed gekeken worden of de toepassing van PRC's gewenst is, ondanks dat het hele kleine hoeveelheden PCB's betreft die worden afgegeven. Mogelijk kunnen andere stoffen als referentie gebruikt worden die altijd in constante concentraties in het grondwater aanwezig en die opgenomen worden door de siliconenrubber.

2) In welke concentraties komen stoffen voor? Wat zijn de ecologische risico's?

Om inzicht te krijgen in concentraties van stoffen is het van belang dat kwantitatief gemeten kan worden.

Bij Toestand- en Trendmonitoring (T&T-monitoring) is normtoetsing noodzakelijk. Het toepassen van passive sampling is (nog) niet geschikt omdat deze methode internationaal niet erkend is voor normtoetsing. Daarbij komt dat voor veel stoffen nog een norm is gedefinieerd voor de totale fractie en niet de opgeloste fractie, die met passive sampling bepaald wordt. Ook is er discussie hoe aan de Maximale Acceptabele Concentratie (MAC) getoetst moet worden. Daarom moeten op de T&T-monitoringslocaties vooralsnog gewoon steekmonsters genomen worden om aan de eisen voor normtoetsing te kunnen voldoen. Voor een groot aantal stoffen kan wel een betrouwbare concentratie bepaald worden en met de vrij opgeloste concentratie kan direct het ecologisch risico geschat worden.

Ditzelfde geldt ook voor het monitoren van grondwater met passive sampling bij bodemverontreinigingen. Echter het voordeel van het toepassen van passive samplers is dat het grondwater tijdens de bemonstering niet verstoord raakt en er een representatiever monster genomen kan worden over een langere periode. Voor een goede toepassing is uitgebreider onderzoek noodzakelijk.

Volgens de huidige Europese regelgeving (KRW) moeten een aantal slecht wateroplosbare stoffen ook in biota gemeten worden. In eerste instantie zal dit alleen in de Rijkswateren gebeuren door RWS. Goed meten in biota is echter niet eenvoudig omdat niet altijd voldoende vis gevangen kan worden en de vissen verschillende leeftijden kunnen hebben. Daarnaast metaboliseert een vis opgenomen stoffen waardoor niet een volledig beeld ontstaat van de totale blootstelling. Een siliconenrubber kan als 'kunstmatig organisme' ingezet worden. De samplers zijn wel altijd vergelijkbaar en metaboliseren de stoffen niet. Onderzoeken laten zien dat evenwichtsconcentraties in siliconenrubber goed correleren met evenwichtsconcentraties in mosselen, blankvoorn en paling^{10,11}. In het kader van meten in biota wordt momenteel volop onderzoek aan gedaan naar de vervanging van biota door monitoring met siliconenrubber.

3) Waar komen stoffen vandaan?

Voor diverse soorten onderzoek zoals het achterhalen van lozingsbronnen en emissies van gewasbeschermingsmiddelen is het achterhalen van de bron van de verontreiniging belangrijk. Hierbij is het van belang dat de bemonstering plaatsvindt als de stoffen in het water komen. Bij enkele onderzoeken zoals het achterhalen van lozingsbronnen en foutieve aansluitingen van riolering is de aan-afwezigheid van de stof van belang en is een indicatieve concentratie voldoende. Voor de toepassing bij T&T-monitoring is een (semi)kwantitatieve concentratie gewenst. Het meten van lage concentraties is voor alle onderzoeken wenselijk.

Afhankelijk van de soort stof kan in Flowschema 1 (Figuur 4.1) gekeken worden welke sampler het meest geschikt is of dat beide samplers worden toegepast. Bij het opsporen van foutieve aansluitingen van rioleringen bijvoorbeeld gaat het om specifieke stoffen die in rioolafvalwater zitten en niet in hemelwater. Hierbij kan gedacht worden aan cafeïne, 17- β -estradiol of een geneesmiddel en kan een adsorptiesampler gebruikt worden die in de rioleringsbuis wordt geplaatst.

Voor het onderzoeken van emissieroutes van gewasbeschermingsmiddelen kunnen voor de route “drift” siliconenrubber samplers gebruikt worden omdat deze samplers ook lucht kunnen bemonsteren. Voor uitspoeling kunnen het beste adsorptiesamplers gebruikt worden omdat het meer hydrofiele stoffen betreft. Deze kunnen bijvoorbeeld in drainagebuizen worden geplaatst.

Bij de invulling van het nader onderzoek op de T&T-monitoringslocatie wordt geadviseerd twee type samplers te gebruiken. Door deze uit te hangen stroomopwaarts van een T&T-locatie kan bij overschrijding van normen herleid worden waar de aangetroffen stoffen vandaan komen in het (deel)stroomgebied). De samplers worden gedurende meerder periodes uitgehangen maar enkele geanalyseerd als normoverschrijdingen worden geconstateerd.

4) Wat is het effect van stoffen?

Bepaling van ecologische effecten kan plaatsvinden door het uitvoeren van bioassays. Het extract van een steekmonster wordt omgezet naar een extract dat gedoseerd wordt aan een bioassay. Hiermee wordt bepaald of het water toxische effecten kan veroorzaken. Bij het nemen van een steekmonster voor toepassing in een bioassay gelden dezelfde nadelen als voor gewone monitoring met steekmonsters. Deze kunnen worden weggenomen door de extracten van passieve samplers te gebruiken in de bioassays. Bij toepassing van siliconenrubbersamplers moeten geen PRC's worden gebruikt omdat deze effect kunnen hebben op de response van sommige bioassays. Hierbij moet wel bedacht worden dat pieken worden verdisconteerd in het extract en dus het effect van de bioassay en dat niet alle stoffen door 1 type sampler worden opgenomen.

De toepassing van passieve sampler extracten in bioassays wordt uitgevoerd onder andere door Waternet.

5

GESCHIKT TYPE PASSIVE SAMPLER

5.1 OVERZICHT TOE TE PASSEN PASSIVE SAMPLERS VOOR DIVERSE STOFFEN

Er worden veel verschillende stoffen gemonitord zoals gewasbeschermingsmiddelen, hormoon verstorende stoffen, brandvertragers, enz. Sommige stoffen zijn niet geschikt om in een watermonster te meten omdat ze erg slecht wateroplosbaar zijn en sterk aan vaste materialen binden. Deze stoffen kunnen met passieve samplers bemonsterd worden. Andere stoffen kunnen juist niet met passieve samplers gemonitord worden, omdat ze zo goed oplosbaar zijn in water waardoor ze niet tot nauwelijks door een passieve sampler worden opgenomen. Tussen deze uitersten bevindt zich een groep stoffen die zowel met passieve sampling als in een watermonster gemeten kunnen worden.

Van een uitgebreide lijst aan stoffen is bepaald of bemonstering met passieve sampling mogelijk is. De lijst is samengesteld op basis van aangeleverde data door verschillende samenwerkingsverbanden met waterschappen, provincies en drinkwaterbedrijven. Deze lijst is niet uitputtend en mogelijk missen een aantal stoffen die veelvuldig gemonitord worden. Voor deze stoffen kan op basis van Flowschema 1 in hoofdstuk 4 een inschatting gemaakt worden of passieve sampling en welke sampler mogelijk geschikt is.

Op basis van data uit onderzoeken die de afgelopen jaren zijn uitgevoerd, of op basis van chemische eigenschappen en molecuul samenstelling is aangegeven of een stof het beste met siliconen rubber, een adsorptiesampler of in een watermonster gemeten kan worden. Hierbij is tevens aangegeven of de concentratie die bepaald is kwantitatief, semi-kwantitatief of kwalitatief is. Ook is voor de stoffen die met een siliconenrubber gemeten kunnen worden een grove indicatie gegeven hoe snel de sampler voor de desbetreffende stof in evenwicht komt.

In de totale lijst staan 844 stoffen, waarvan Tabel 5.1 een overzicht geeft van de typen stoffen die op genomen zijn.

TABEL 5.1 TYPEN STOFFEN MET AANTALLEN DIE IN DE OVERZICHTSLIJST OPGENOMEN ZIJN

Type stof	Aantal
Geen beschrijving*	188
Brandvertragers	13
Bulkchemicaliën	1
Conserveringsmiddel	1
Fenolen	6
Geneesmiddelen	87
Gewasbeschermingsmiddelen	358
Hormonen	8
Oplosmiddelen	33
Diverse Organische microverontreinigingen*	107
PAK's	17
PCB's	11
Röntgencontrastmiddelen	10
Weekmakers	5

* Een deel van de stoffen in de lijsten waren niet gespecificeerd. Enkele hiervan kunnen mogelijk in de andere categorieën ingedeeld worden

De totale lijst is te vinden in bijlage C. Tevens is het bestand digitaal beschikbaar en te downloaden op <http://www.stowa.nl/bibliotheek/publicaties/> en vervolgens zoeken op rapportnummer.

In Tabel 5.2 staan de categorieën beschreven die aangeven in welke mate passieve sampling geschikt is voor de bemonstering van een stof. Tevens staat uitgelegd hoe de categorieën zijn afgeleid en welk vervolgonderzoek nodig is om de concentratiebepaling te verbeteren. Dit vervolgonderzoek wordt in Hoofdstuk 6 nader beschreven.

TABEL 5.2 BESCHRIJVING CODERING OVERZICHTSTABEL TOEPASSING PASSIVE SAMPLING

Categorie	Type sampler	Status	Benodigd vervolgonderzoek
A		Kwantitatieve concentratie bepaling is mogelijk	
	Partitiesampler-Siliconenrubber	Diffusie in de siliconenrubber is toereikend, verdelingscoëfficiënt water-siliconenrubber (Kpw) is bekend en >2,5.	
B		Concentratie bepaling is semi-kwantitatief (met bandbreedte factor 10)	
	Partitiesampler-Siliconenrubber	Op basis molecuulstructuur is een goede diffusie in SR heel waarschijnlijk (>90% van de atomen zijn C, H, Cl, Br). Verder is de logKow>3 zodat passieve sampling toepasbaar is. Er is geen verdelingscoëfficiënt siliconenrubber/water (Kpw) bekend. Een concentratie kan alleen via de Kow worden afgeleid. Dit geeft een grotere onzekerheid en daarom is de bepaling van concentratie semi-kwantitatief	Mate van diffusie bevestigen en Kpw bepalen
	Adsorptie-passive sampler	Laboratorium onderzoek heeft sterke opname aangetoond. Bepaling van het bemonsterd volume kent nog onzekerheid. Deze onzekerheid kan beperkt worden door parallelle toepassing van een siliconenrubber- sampler.	Verder ontwikkelen sampler, inzicht verkrijgen in opnameproces
C		Screening, wel of niet aanwezig met indicatieve concentraties	
	Partitiesampler-Siliconenrubber (SR)	Er is wel opname van de stof in het veld aangetoond, ook als dat niet verwacht werd op basis van stofeigenschappen, maar door gebrek aan diffusie- en logKpw -gegevens is alleen onderlinge vergelijking mogelijk. Globaal kan uit de opname een indicatief concentratie niveau worden aangegeven	Bepaling diffusie en Kpw
	Adsorptie-passive sampler	Er is wel opname van de stof in het veld aangetoond maar of de sampler voldoende capaciteit voor de stof heeft is niet bevestigd	Verder ontwikkelen sampler, inzicht verkrijgen in opnameproces

VERVOLG TABEL 5.2

Categorie	Type sampler	Status	Benodigd vervolonderzoek
C1	Partitiesampler-Siliconenrubber	Opname is aangetoond, logKpw>2.5 en bekend, maar de diffusie is aantoonbaar laag waardoor het opnamemodel om de concentratie te berekenen niet toepasbaar is.	Ander opnamemodel o.b.v van diffusie in sampler toepassen ¹² en praktisch verifiëren
D	Toepassingsmogelijkheid van passieve sampling onzeker/onbekend		
	Partitiesampler-Siliconenrubber	Stof valt niet in bovenstaande categorieën maar heeft wel een logKow>2. Deze stoffen zijn nog niet aangetoond op siliconenrubber maar kunnen er mogelijk wel door opgenomen worden.	Opname door SR onderzoeken
	Adsorptie-passive sampler	Toepassing in adsorptie passieve sampling is onbekend. Echter voor vrijwel alle stoffen geldt dat ze wel ergens aan adsorberen. Soms zullen specifieke materialen als ion-exchange sorbentia nodig zijn.	Ontwikkeling van een nieuw type sampler noodzakelijk
E	Geen passieve sampling mogelijk		
	Partitiesampler-Siliconenrubber	De stof valt niet in bovenstaande categorieën is dermate hydrofiel, logKow<2, dat meting met partitie passieve sampling onwaarschijnlijk is.	
	Adsorptie-passive sampler	Er is maar van enkele stoffen bekend dat ze vrijwel nergens aan adsorberen zoals glyfosaat (niet in lijst). De stoffen in deze categorie op lijst hebben aantoonbaar onvoldoende sorptie aan speedisk materiaal maar adsorberen mogelijk wel aan specifieke materialen als ion-exchange sorbentia.	

Siliconenrubber is een evenwichtssampler waardoor de sampler bij het bereiken van evenwicht ook weer stoffen afgeeft. Het kan zijn dat tijd voordat de sampler evenwicht heeft bereikt korter is dan de totale blootstellingsduur. De tijd voor het bereiken van evenwicht is onder ander afhankelijk van de soort stof en de waterturbulentie. Om een inschatting te geven of een stof snel dan wel langzaam evenwicht bereikt is in de lijst aangegeven of deze periode (aangeduid als TWA) kort, middel of lang is. In Tabel 5.3 staat weergegeven wat deze aanduiding precies betekent.

TABEL 5.3

BESCHRIJVING CODERING BINNEN HOEVEEL TIJD DE STOF IN EVENWICHT IS MET DE SAMPLER (TIME WEIGHTED AVERAGE =TWA)

TWA	Beschrijving
Kort	Evenwicht binnen enkele dagen
Middel	Evenwicht binnen 2-4 weken
Lang	Evenwicht > 4 weken

In het onderstaande tekstblok staat uitgelegd hoe de tabel te lezen is.

HOE DE TABELLEN TE LEZEN

Met enkele gewasbeschermingsmiddelen als voorbeeld

Cas-nr	Stofnaam	LogK _{ow}	Categorie	Siliconenrubber		Adsorptiesampler
				TWA	LogK _{pw}	Categorie
107-06-2	1,2-dichloorethaan	1,5	E	kort		D
2008-58-4	2,6-Dichloorbenzamide (BAM)	0,8	C	kort	1,3	C
71751-41-2	abamectine	4,4	C1	lang	3,3	B
15972-60-8	alachlor	3,5	D	middel		B
2921-88-2	ethylchlorpyrifos	5	A	lang	4,7	B
7786-34-7	mevinfos	0,1	E	kort		B
87-86-5	pentachloorfenol	5,1	B	lang		D

Cas-nr = Cas-nummer, LogK_{ow} = mate van oplosbaarheid,

TWA = tijdsgemiddelde concentratie, LogK_{pw} = verdelingscoëfficiënt water en siliconenrubber.

In kolom "Siliconenrubber" staat de categorie waarin de stof valt als deze met siliconenrubber wordt gemeten en in de kolom "Adsorptiesampler" als een adsorptiesampler wordt toegepast.

- De stof ethylchlorpyrifos bijvoorbeeld, kan gemeten worden met siliconenrubber en hiermee kan een kwantitatieve concentratie bepaald worden (Siliconenrubber (SR) =A). De periode waarover evenwicht wordt bereikt is lang (TWA = lang), de verdelingscoëfficiënt siliconenrubber- water is bepaald en is 4,7 (logK_{pw}). Indien de stof met een adsorptiesampler wordt gemeten dan kan een semi-kwantitatieve concentratie worden bepaald (Adsorptie (Ads) = B).
- Stoffen zoals pentachloorfenol worden goed opgenomen siliconenrubber, maar doordat er geen verdelingscoëfficiënt bekend is kan voor deze stoffen vooralsnog alleen een semi-kwantitatieve concentratie bepaald worden (SR=B). Deze stof is nog niet eerder op een adsorptiesampler aangetoond en valt daarom in Ads=D
- Er zijn stoffen die voor siliconenrubber in categorie C vallen zoals BAM. Doordat er geen goede verdelings- en diffusiecoëfficiënten bekend zijn kan vooralsnog alleen een indicatieve concentratie bepaald worden voor deze categorie. Zodra deze wel bepaald zijn en de diffusie blijkt voldoende snel dan kan de concentratie van deze stoffen mogelijk wel (semi)-kwantitatief bepaald worden. Echter de periode van het bereiken van evenwicht (TWA) is kort, dus voor deze stof is siliconenrubber niet de meest logische keus. Voor de adsorptiesampler valt BAM ook in categorie C waardoor hiermee ook een indicatieve concentratie bepaald wordt. Van adsorptiesamplers wordt aangenomen dat ze wel over de gehele periode gemiddelde concentratie bepalen.
- Voor siliconenrubber is er ook een categorie C1, waar bijvoorbeeld de stof abamectine in valt. Deze stof wordt opgenomen door siliconenrubber maar de diffusie is traag, waardoor het opnamemodel dat wordt gebruikt om de vrij opgeloste concentratie te meten niet gebruikt kan worden en er dus enkel een indicatieve concentratie bepaald kan worden met siliconenrubber. Alleen bij de ontwikkeling van een nieuw opnamemodel kunnen deze stoffen met siliconenrubber kwantitatief gemeten worden.
- Er zijn stoffen, zoalsalachlor, waarvoor de toepassing van siliconenrubber niet zinvol is

maar die met een adsorptiesampler semi-kwantitatief bemonsterd kan worden, (SR=D, Ads=B)

- De goed water oplosbare stof mevinfos valt voor siliconenrubber in categorie E, maar is wel aangetoond in adsorptiesamplers. Hiervoor is de adsorptiecapaciteit voldoende waardoor met een adsorptiesampler een semi-kwantitatieve concentratie bepaald kan worden (Ads=B).
- Andere goed wateroplosbare stoffen zoals 1,2-dichloorethaan zijn ook goed wateroplosbaar en zullen niet door een siliconenrubber sampler worden opgenomen (SR = E). Voor een adsorptiesampler echter is geen informatie over de opname bekend. Daardoor valt de stof in categorie D voor deze sampler. Zolang er geen aanvullende informatie is toepassing van passieve sampling voor deze stoffen niet zinvol.
- Als een stof zeer goed water oplosbaar is en tevens bekend is dat een stof niet aan speedisk-materiaal adsorbeert valt deze voor zowel siliconenrubber als adsorptiesamplers in categorie E. Geen enkel gewasbeschermingsmiddel voldoet hieraan maar wel het geneesmiddel amoxicilline (zie tabel bijlage C). Passieve sampling is voor deze stof niet zinvol.

5.2 TOEPASSING PASSIVE SAMPLERS VOOR ENKELE GENEESMIDDELEN EN NL-WATCHLIST STOFFEN

Het Integraal Laboratorium Overleg Waterkwaliteitsbeheerders (ILOW) heeft in opdracht van STOWA een selectie gemaakt van 28 geneesmiddelen. Selectiecriteria waren onder andere het voorkomen in oppervlaktewater en afvalwater, gedrag in de zuivering, milieurelevantie en een evenwichtige vertegenwoordiging van diverse groepen geneesmiddelen. Tabel 5.4 geeft de mogelijkheden van de toepassing van passieve samplers voor deze 28 geneesmiddelen. Vier van de middelen uit deze tabel zijn ook op de Nederlandse watchlist geplaatst¹⁴. Dit zijn amidotrizoïnezuur, metformine, metoprolol en carbamazepine.

Uit de tabel is op te maken dat vooralsnog de toepassing van een adsorptiesampler voor de meeste van de geneesmiddelen het meest geschikt is. Voor 12 van de 28 geneesmiddelen kan een semi-kwantitatieve concentratie worden bepaald met dit type sampler (categorie B), waaronder de NL-watchlist stoffen metoprolol en carbamazepine. Voor overige geneesmiddelen zal nader onderzocht moeten worden of deze opgenomen worden door een adsorptiesampler (categorie D).

Siliconenrubbersamplers lijken vooralsnog minder geschikt. Negen van de geneesmiddelen in de lijst worden niet door een siliconenrubber opgenomen zoals de NL-watchlist stoffen amidotrizoïnezuur en metformine (categorie E.). Voor een ander deel zal onderzocht moeten worden of opname door siliconenrubber mogelijk is (categorie D) of is er aanvullend onderzoek nodig naar de K_{pw} en de diffusiecoëfficiënt om in plaats van een indicatieve concentratie een kwantitatieve concentratie te kunnen bepalen (categorie C). Voor geen van de geneesmiddelen is het nu al mogelijk om een kwantitatieve concentratie bepaling te kunnen doen met passieve sampling.

TABEL 5.4 CATEGORISERING VAN PASSIVE SAMPLINGSMETHODES VOOR DE 28 GENEESMIDDELEN VAN DE ILOW-LIJST. CAS-NR = CAS-NUMMER, LOG K_{ow} = MATE VAN OPLOSBAARHEID, T_{wa} = TIJDGEMIDDELDE CONCENTRATIE, LOG KPW = VERDELINGSCOËFFICIËNT WATER EN SILICONENRUBBER. STOF CURSIEF GEDRUKT STAAT OP NL-WATCHLIST

Stofeigenschappen		Siliconenrubber			Adsorptiesampler		
Nr. ILOW-lijst	Cas-nr	Stofnaam	Log Kow	Cat.	TWA	Log Kpw	Cat.
1	657-24-9	metformine	-2,6	E	kort		D
2	58-32-2	dipyridamol	2,7	D	kort		D
3	137-58-6	lidocaïne	2,4	C	lang		B
4	58-93-5	hydrochloorthiazide	-0,1	E	kort		D
5	6493-05-6	pentoxifylline	0,3	E	lang		B
6	37350-58-6	metoprolol	1,9	C	lang	1,2	B
7	138402-11-6	irbesartan	5,3	D	lang		D
8	41859-67-0	bezafibraat	4,2	D	lang		B
9	551-92-8	dimetridazol	0,3	E	kort		D
10	738-70-5	trimethoprim	0,9	C	lang	1,3	B
11	723-46-6	sulfamethoxazol	0,9	C	lang	0,9	B
12	81103-11-9	claritromycine	3,2	D	lang		B
13	18323-44-9	clindamycine	2,2	D	kort		D
14	85721-33-1	ciproflaxine	0,3	E	kort		B
15	15307-86-5	diclofenac	4,5	C	kort	1,6	B
16	22071-15-4	ketoprofen	3,1	D	kort		B
17	60-80-0	fenazon (antipyrene)	0,4	C	lang		D
18	298-46-4	carbamazepine	2,4	C	lang	2,2	B
19	60142-96-3	gabapentine	?	D	middel		D
20	1893-33-0	pipamperon	2	D	kort		D
21	5786-21-0	clozapine	3,2	D	kort		D
22	604-75-1	oxazepam	2,2	D	kort		D
23	117-96-4	amidotrizoïnezuur	1,4	E	kort		D
24	62883-00-5	jopamidol	-1	E	kort		D
25	17675-60-4	guanyl urea	-2,5	E	kort		D
26	51146-55-5	2-hydroxyibuprofen	2,3	D	kort		D
27	137862-53-4	valsartan	3,6	D	middel		D
28	3930-20-9	sotalol	0,2	E	lang		B

6

BELANGRIJKE ZAKEN VOOR DE TOEKOMST

Toepassing van passive sampling is een waardevol instrument bij waterkwaliteitsmonitoring in diverse soorten onderzoek. Voor een goede en brede toepassing van passive samplers door waterbeheerders moeten een aantal zaken goed geregeld worden.

6.1 MAKEN SILICONENRUBBERSAMPLERS

In de "Leidraad voor de passive sampling van hydrofobe stoffen in water met siliconenrubber samplers"³, staat beschreven waar siliconenrubbersamplers besteld kunnen worden en hoe ze gemaakt, voorbereid en met PRC's gespikt moeten worden. Voor routinematig onderzoek kan dit voorbereiden en spiken ineens voor een grote hoeveelheid siliconenrubber samplers uit gevoerd worden. Deze samplers zijn langdurig te bewaren in de vriezer. Eén waterschapslaboratorium kan deze voorbereiding van siliconenrubber sheets verzorgen. Er is dan een grote batch aan vergelijkbare samplers beschikbaar die op hetzelfde moment en vergelijkbaar gespikt zijn. Dit verbetert de onderlinge vergelijkbaarheid van analysedata. Tevens worden de kosten per set samplers gereduceerd.

6.2 GESTANDAARDISEERDE EXTRACTIE

Om de resultaten van passive sampling goed te kunnen vergelijken is een gestandaardiseerde extractie-methode noodzakelijk. De extractie voor siliconenrubber staat beschreven in de genoemde leidraad. Voor adsorptiesamplers is een dergelijke leidraad nog niet beschikbaar. Het is aan te bevelen om deze voor veel toegepaste adsorptiesamplers, zoals de speedisk op te stellen, zodat waterschapslaboratoria hier ook mee aan de slag kunnen. Dit kan door het Integraal Laboratorium Overleg Waterkwaliteitsbeheerders opgepakt worden. Het is aan te bevelen hier ook andere laboratoria of partijen bij te betrekken die ervaring hebben met het extraheren van adsorptiesamplers, zodat deze extractie optimaal wordt uitgevoerd.

6.3 KWALITEITSBORGING

Om de kwaliteit van de passive sampling extractie en analyses goed te kunnen waarborgen, is het gewenst om periodiek een ringonderzoek uit te voeren waarbij enkele passive samplers tegelijkertijd in hetzelfde watersysteem worden blootgesteld en deze door verschillende labs te laten analyseren. Tevens moet een laboratorium-gespikte sampler in dit ringonderzoek worden meegenomen, om inzicht te krijgen of alle laboratoria tot de juiste resultaten komen.

6.4 AQUO-STANDAARD

Waterschappen slaan data van waterkwaliteitsmonitoring op conform de Aquo-standaard. Er is nog geen standaard beschikbaar voor het archiveren van passive samplingdata. De concentraties die bepaald worden met passive sampling zijn anders dan de concentraties van een steekmonster. Bij het eerste betreft het vrij opgeloste concentraties, en bij het tweede totaal

concentraties in de waterkolom. Deze twee concentraties zijn naarmate stoffen meer hydrofoob zijn, steeds minder goed met elkaar te vergelijken. Er dienen afspraken gemaakt te worden hoe de gegevens die verkregen zijn met passive sampling in de Aquo-standaard opgeslagen kunnen worden zodat dit op dezelfde gangbare wijze kan gebeuren als de data van steekmonsters.

6.5 KALIBRATIE PARAMETERS VOOR SILICONENRUBBER

Van de stoffen die in de overzichtstabel gekwalificeerd zijn als B: semi-kwantitatief te meten met siliconenrubber moet een betrouwbare verdelingscoëfficiënt tussen siliconenrubber (partitiesampler) en water (K_{pw}) bepaald worden zodat uit de opname van deze stoffen ook een kwantitatieve concentratie te herleiden is. Het bepalen van K_{pw} 's voor stoffen kan in een relatief eenvoudig laboratoriumexperiment dat enkele weken duurt. Deltares heeft hier veel ervaring mee en heeft in het verleden van veel stoffen de K_{pw} bepaald. Onder begeleiding kan dit mogelijk ook door een waterschapslaboratorium uitgevoerd worden. Voor de volledigheid moeten ook de diffusiecoëfficiënten (D_p) in de siliconenrubber worden gemeten, of in ieder geval worden vastgesteld dat deze voldoende hoog is. Dit is specialistisch werk en kan het beste door een onderzoekslaboratorium worden uitgevoerd. Op basis van de lijst met B en C-categorie stoffen en de wenselijkheid om deze stoffen te monitoren is een prioritering nodig van de stoffen voor het palen van de K_{pw} 's en D_p 's. Het meenemen van relevante stoffen uit de D-categorie geeft slechts weinig extra meerwerk omdat tijdens de bepaling van diffusiecoëfficiënten veel stoffen tegelijk onderzocht kunnen worden.

Op basis van de ILOW-prioriteitenlijst voor geneesmiddelen kan een eerste selectie gemaakt worden van stoffen waarvan sterk gewenst is dat ze met passive sampling (semi)-kwantitatief gemeten kunnen worden en waarvoor een vervolgonderzoek zal worden opgezet.

6.6 KALIBRATIE ADSORPTIESAMPLERS

Er zijn veel kalibratieonderzoeken voor adsorptiesamplers in de literatuur te vinden, voornamelijk uitgevoerd in laboratoria. Experimenten onder veldomstandigheden worden pas sinds enkele jaren uitgevoerd en de negatieve rol van toegepaste membranen bij de opname is nog maar kort geleden vastgesteld. Al dit werk heeft in tegenstelling tot het onderzoek aan partitiesamplers niet geleid tot een betrouwbaar opnamemodel dat kan helpen het bemonsterd volume vast te stellen om tot een kwalitatieve concentratie te komen voor adsorptiesamplers. De in paragraaf 2.2 beschreven aanpak, om met behulp van een siliconenrubbersampler het bemonsterdvolume van een adsorptiesampler af te leiden, lijkt nog de beste methode. Deze is echter gebaseerd op de aanname dat dit bemonsterde volume voor alle stoffen hetzelfde is en deze aanname is niet geverifieerd. Verder is het een nadeel dat er altijd twee types samplers moeten worden toegepast om met een adsorptiesampler een semi-kwantitatieve concentratie te bepalen. Vervolgonderzoek kan het beste twee wegen volgen:

- Het testen van de aanname dat alle stoffen op gelijke wijze/snelheid worden opgenomen zodat een kwantificering door parallelle blootstelling van een SR sampler betrouwbaarder wordt
- Een ander type sampler ontwikkelen.

Het onderzoek moet plaatsvinden op basis van een prioritering van categorie C- en D-stoffen die de grootste problemen geven met de huidige manier van bemonsteren en een alternatieve methode dus erg gewenst is. In het onderzoek naar een betere sampler of de doorontwikkeling van de huidige samplers, kunnen deze stoffen als eerste verder onderzocht worden om een betrouwbare concentratiebepaling te kunnen uitvoeren.

6.7 HELPDESK PASSIVE SAMPLING

Om passive sampling op een goede wijze toe te gaan passen door waterschappen en waterschapslaboratoria kan een helpdesk passive sampling opgezet worden. Deze helpdesk adviseert en begeleidt waterschappen en waterschapslaboratoria bij het uitvoeren van onderzoek met passive sampling op een goede en vergelijkbare manier.

7

REFERENTIES

- 1 Smedes, F. Bakker, D. en De Weert, J. (2010) Het gebruik van passieve sampling in KRW-monitoring. Deltaresrapport 1202337-004
- 2 Smedes, F., Beeltje, H. en Jonker, C. (2013) Onderzoek en veldpilot van passieve sampling met partitie- en adsorptiesamplers. Deltaresrapport 1206124-000-BGS-0005
- 3 Smedes, F. en Booij, K. (2012) Leidraad voor de passieve sampling van hydrofobe stoffen in water met siliconenrubber samplers. Deltaresrapport 1206124-000-BGS-0002
- 4 De Weert, J. (2012) Monitoring gewasbeschermingsmiddelen met passieve sampling bij Hoogheemraadschap van Delfland. Deltaresrapport 1207267
- 5 De Weert, J. (2012) Vervolgonderzoek 2012 passieve sampling in de Pieterbuurstermaar, de Westernielandstermaar en de Houwerzijlstervaart. Deltaresrapport 1206279
- 6 De Weert, (2012) Monitoring gewasbeschermingsmiddelen met passieve sampling; Samenwerking Ministerie van Infrastructuur en Milieu / Deltares en de 10 waterschappen Noord-, Oost-, en Midden Nederland. Deltaresrapport 1206111
- 7 Smedes, F. Bakker, D. Weert, J. de (2010) Het gebruik van passieve sampling in KRW-monitoring; De mogelijkheden van siliconenrubber als passieve sampler. Deltaresrapport 1202337-004
- 8 Smedes, F., Beeltje, H., Kotte, M., Jonker, M. (2013) Sorption of various polar chemicals to different sorbent and membrane materials applied in passive sampling. Poster SETAC, Glasgow, Great Britain.
- 9 Smedes, F., Beeltje, H. Jonker, M. (2013) Passive sampling met partitie- en adsorptie-samplers voor een groep fosforhoudende verbindingen. Deltaresrapport 1206124
- 10 Smedes, F. (2007). Monitoring of chlorinated biphenyls and polycyclic aromatic hydrocarbons by passive sampling in concert with deployed mussels. In *Comprehensive Analytical Chemistry*, vol 48: Passive sampling techniques in environmental monitoring. Ed. Greenwood R., Mills, G., Vrana, B., pp 407-448.
- 11 Smedes F. (2010). Passive sampling en biomonitoring. Deltares report 1202337-004.
- 12 Crank, J., 1975. *The Mathematics of Diffusion*, second ed. University Press, Oxford, Chapter 4
- 13 Smedes, F., Wijdenveldt, A., Meijer, O. (2007) Passive sampling in peilbuizen op IJsselooog Resultaten voor hydrofobe stoffen in twee peilbuizen rond het IJsselooog. Rapport Ministerie van Verkeer en Waterstaat, 4 juni 2007

BIJLAGE A

VERKLARENDE WOORDENLIJST

Absorptie	Stoffen worden in het samplermateriaal opgenomen
Adsorptie	Stoffen worden aan het grensvlak van het samplermateriaal gebonden
Diffusie	de verplaatsing van een opgeloste stof van een plaats met een hoge concentratie van die stof naar een plaats met een lage concentratie van die stof, totdat evenwicht is bereikt.
hydrofiel	Goed water oplosbaar
hydrofoob	Slecht water oplosbaar
K_{ow}	Octanol-water verdelingscoëfficiënt (L/L). Geeft de mate van wateroplosbaarheid aan. Log Kow < 2 is goed water oplosbaar
K_{pw}	Partitiesampler-water verdelingscoëfficiënt (kg/kg)
KRW	KaderRichtlijn Water
LDPE	Low density polyethylene; type partitiesampler
POCIS	Polar Organic Chemical Integrative Sampler; type adsorptiesampler
PRC	Performance Reference Compound; stof vooraf op samplers gebracht
SPMD	Semi permeable membrane device; type partitiesampler
SPME	Solid Phase Micro Extraction, type passive sampler
TWA	Time weighted average. Periode waarover de concentratie bepaald uit de opname van een passive sampler een tijdsgemiddelde is

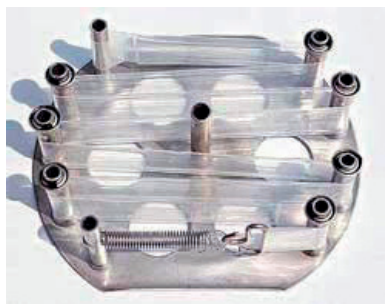
BIJLAGE B

TYPE SAMPLERS

De referenties behorende bij de referentieverwijzingen staan onderaan deze bijlage.

PARTITIE SAMPLERS

SEMI PERMEABLE MEMBRANE DEVICE (SPMD)



De SPMD-sampler is een partitie sampler waarbij synthetisch vet, triolein, tussen twee membranen van low density polyethylene (LDPE) wordt geplaatst. De sampler bestaat dus uit twee fasen. De sampler is geschikt voor hydrofobe stoffen met een $\log K_{ow} > 3$. Stoffen die zich normaliter in het vet van organismen ophopen doen dat ook in deze hydrofobe passieve samplers. Het is een evenwichtssampler waarvan het gebruik is gestandaardiseerd¹². Op de sampler kunnen eenvoudig PRC's worden aangebracht.

De sampler is eenvoudig in het veld toe te passen, al bestaat er een kans dat de triolein uit de sampler weglekt en dan dus niet meer te gebruiken is. De extractie van de sampler is niet zo eenvoudig omdat het extract makkelijk verontreinigd kan raken met het triolein. Bovendien zijn er grote hoeveelheden oplosmiddel nodig bij de extractie. Er is een opnamemodel (polynoommodel) beschikbaar om vanuit de PRC's het bemonsterd volume te bepalen. Voor het polynoommodel¹³ is het echter wel noodzakelijk om in het laboratorium bemonsteringssnelheden af te leiden en dit model sluit niet goed aan bij de theorie. Bij het model voor de relatie $\log K_{ow}$ - sampling rate voor SPMD wordt rekening gehouden met de afname van de bemonsteringssnelheid voor grotere moleculen¹⁴. Voor dit model is het noodzakelijk om de diffusiecoëfficiënten van LDPE te kennen. Voor PCB's en PAK's zijn deze bepaald¹⁵.

LOW DENSITY POLY ETHYLENE (LDPE)



De LDPE-sampler bestaat alleen uit een LDPE-membraan en is een enkelvoudige partitie sampler¹⁶. De sampler is geschikt voor hydrofobe stoffen met $\log K_{ow} > 3$. De sampler bestaat uit dun materiaal. Hierdoor kan deze eenvoudig scheuren of in de war raken. Dit maakt de veldtoepassing niet robuust. De voorbereidings- en extractieprocedures zijn eenvoudig en de sam-

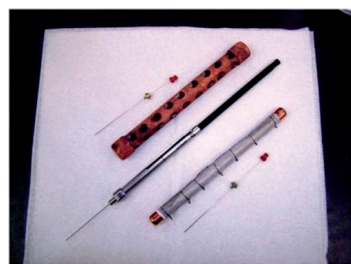
pler kan voorzien worden van PRC's (Booij et al., 2002). Hierdoor is het mogelijk de sampling rate te bepalen en de concentraties in de waterfase te kwantificeren. Hiervoor kan het model voor de relatie $\log K_{ow}$ -sampling rate gebruikt worden dat ook beschreven is bij de SPME. EN uiteraard geldt ook hiervoor dat de diffusiecoëfficiënten in het LPDE nodig zijn.

SILICONENRUBBER



Siliconenrubber samplers is een enkelvoudige sampler op basis van een sheet polydimethylsiloxaan (PDMS). Het is een partitiesampler die geschikt is voor stoffen met $\log K_{ow} > 3$, al heeft onderzoek van de laatste jaren laten zien dat ook hydrofiele stoffen goed door de sampler opgenomen kunnen worden. Op siliconenrubber kunnen PRC's toegepast worden¹⁷. Voor stoffen met een $\log K_{ow}$ tot 4 à 5 wordt in de praktijk meestal evenwicht bereikt. Siliconenrubber is robuust en kan eenvoudig in het veld worden toegepast. Voorafgaande aan het gebruik moet de sampler eenmalig gronding geëxtraheerd worden om de oligomeren te verwijderen die de analyse kunnen verstoren. Bij hergebruik van de sampler is herhaling van deze voorbereiding niet meer nodig. De extractie van de geadsorbeerde stoffen na blootstelling kan eenvoudig gebeuren met soxhlet-extractie of dialyse (schudden van de samplers in oplosmiddel). Er is een betrouwbaar model beschikbaar om de vrij opgeloste concentraties te berekenen¹⁸. Hiervoor zijn wel verdelingscoëfficiënten tussen water en siliconenrubber nodig.

SOLID PHASE MICROEXTRACTION (SPME)



SPME bestaat uit een silica fiber die is gecoat met een bepaald sorbent¹⁹ (Pawliszyn 1997). Afhankelijk van het soort sorbent kunnen verschillende soorten stoffen bemonsterd worden. Na blootstelling in het veld of aan een monster kan de SPME-fiber direct in de injector van een GC gedesorbeerd en geanalyseerd worden. Voor een HPLC-toepassing wordt de fiber in een injectieflesje geëxtraheerd voordat het monster geanalyseerd kan worden. Dit maakt de analyse eenvoudig en er zijn nauwelijks tot geen oplosmiddelen nodig. De SPME-fiber zelf is fragiel waardoor de veldtoepassing minder robuust is. SPME wordt dan ook voornamelijk in het laboratorium toegepast. Het bemonsterd volume van deze sampler is laag waardoor de detectielimiet hoger is in vergelijking met andere passieve samplers²⁰.

POLYOXYMETHYLENE (POM)



POM bestaat uit een enkele fase van het plastic polyoxymethylene en wordt gebruikt voor de bemonstering van hydrofobe stoffen ($\log K_{ow} > 3$) (Cornelissen et al., 2008). Het materiaal kan eenvoudig geëxtraheerd worden met oplosmiddelen. De diffusiecoëfficiënten in POM zijn extreem laag. Hierdoor is het niet mogelijk om PRC's toe te passen omdat de diffusiecoëfficiënten in het polymeer extreem laag zijn^{21,22}. Voor de meeste stoffen is de opname door deze sampler membraan gecontroleerd. Dit heeft een trage opname tot gevolg en wordt er zeer langzaam evenwicht bereikt²³.

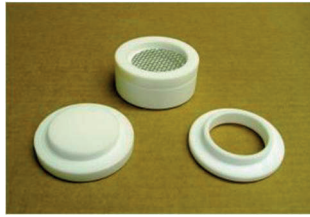
ADSORPTIESAMPLERS

POLAR ORGANIC CHEMICAL INTEGRATIVE SAMPLER (POCIS)



De POCIS bestaat uit twee polyethersulphone (PES) membranen waar tussen een vast sorbentmateriaal aanwezig is²⁴. (Alvarez, et al., 2004). Het voordeel van PES is dat er weinig biofouling plaatsvindt. Het nadeel is dat diffusie door het membraan heel traag is zodat veel stoffen aan het membraan blijven zitten en het sorptiemateriaal niet bereiken. De POCIS is bedoeld om hydrofiele organische stoffen te bemonsteren. Hydrofobe organische stoffen worden ook wel opgenomen maar door het lage bemonsterd volume zijn de gehalten veelal gelegen beneden de detectielimiet van de analyse. De stoffen kunnen eenvoudig met een organisch oplosmiddel geëxtraheerd worden. Bij toepassing in het veld worden de membranen tussen metalen ringen aangebracht. Bij harde stroming kunnen de membranen los kunnen raken of scheuren. Dit maakt de sampler voor veldtoepassing minder robuust. Doordat het een adsorptiesampler betreft kunnen er geen PRC's gebruikt worden om de waterconcentratie te berekenen.

CHEMCATCHER MET EMPORE® DISK



De Empore® disk is een gepatenteerd systeem van een inerte filter van polytetrafluoroethylene (PTFE) met daarin de sorbentdeeltjes verwerkt. Afhankelijk van het sorbent is de sampler geschikt voor hydrofobe of hydrofiele stoffen. Deze disks kunnen worden aan gebracht in een Chemcatcher. Een Chemcatcher bestaat uit een herbruikbare behuizing van teflon of wegwerpbehuizing van een recyclebaar plastic, waar de Empore disk in aangebracht kan worden. Vervolgens wordt er een diffusielimiterend membraan op aan gebracht. Empore disks zijn commercieel beschikbaar en worden veelvuldig gebruikt. Er zijn protocollen beschikbaar voor de extractie van diverse stoffen en de extractie is eenvoudig²⁵. De sampler heeft een hoge gevoeligheid doordat het een groot oppervlak/volume ratio heeft. Afhankelijk van het sorbent kunnen voor hydrofobe stoffen PRC's worden toegepast om een schatting van de sampling rate te maken. Voor alle stoffen bij alle sorbents en bij elke toepassing moet apart de opnamesnelheid bepaald om een concentratie te kunnen berekenen. Voor de relatie tussen sampling rate en $\log K_{ow}$ is wel een empirisch model ontwikkeld dat vergelijkbaar is aan het model voor SPMDs²⁶.

SPEEDISK



De Speedisk van de leverancier Baker bestaat uit een plastic behuizing met daarin divinylbenzeen als adsorptiemateriaal. Het adsorptiemateriaal wordt op zijn plaats gehouden door een glasfiber filter. Eigenlijk is de Speedisk niet gemaakt als passieve sampler. Het is ontworpen om water te filteren en daaruit de stoffen te extraheren en te concentreren. Vervolgens worden met een oplosmiddel weer van de speedisk geëxtraheerd en kunnen ze geanalyseerd worden. De constructie van de is geschikt als passieve sampler en lijkt veel op de configuratie van de Chemcatcher. Het voordeel van de Speedisk is dat deze al in laboratoria wordt gebruikt voor de waterextractie en is daardoor dus eenvoudig te extraheren. Ook heeft een grotere opnamecapaciteit dan een Chemcatcher. De Speedisk is robuust en eenvoudige toe te passen in het veld. Ze moeten voor gebruik wel geprepareerd worden door het enkele keren met oplosmiddelen te spoelen. Dit is dezelfde procedure als die gevolgd moeten worden bij een waterextractie. Bij de toepassing in het veld wordt de uitstroomopening aan de onderzijde van de sampler dicht gemaakt zodat er geen water doorheen stroomt maar opname plaats vindt door diffusie. Zoals ook met de andere adsorptiesamplers kunnen er geen PRC's op de sampler aangebracht worden en kan het bemonsterd volume alleen geschat worden. Dit kan gebeuren door de samplers in combinatie met bijvoorbeeld een siliconenrubbersampler uit te hangen en op basis van concentratie bepaald op de siliconenrubber een inschatting te maken van het bemonsterd volume van de Speedisk. Hierdoor kunnen wel enkel indicatieve concentraties worden bepaald.

REFERENTIES BIJLAGE

- 12 Huckins, J.N., Petty, J.D., Prest, H.F., Orazio, C.E., Clark, R.C. (2002). A guide for the use of semipermeable embrane devices (SPMDs) as samplers of waterborne hydrophobic organic contaminants. Report no. 4690. American Petroleum Institute, Washington, DC
- 13 Huckins, J.N., Petty, J.D., Booij, K. (2006). Monitors of organic chemicals in the environment: semipermeable membrane devices. Springer, New York.
- 14 Booij, K., Hofmans, H.E., Fischer, C.V., van Weerlee, E.M. (2003) Temperature-dependent uptake rates of non-polar organic compounds by semipermeable membrane devices and low density polyethylene membranes. *Environmental Science & Technology*, vol. 37, pp 361-366.
- 15 Rusina, T.P., Smedes, F., Klanova, J. (2010). Diffusion coefficients of polychlorinated biphenyls and polycyclic aromatic hydrocarbons in polydimethylsiloxane and low-density polyethylene polymers. *Journal of Applied Polymere Science*, vol. 116, pp 1803-1810.
- 16 Adams, R.G., Lohmann, R., Fernandez, L.A., Macfarlane, J.K., Gschwend, P.M., 2007. Polyethylene devices: passive samplers for measuring dissolved hydrophobic organic compounds in aquatic environments. *Environmental Science & Technology*. vol. 41, pp 1317-1323.
- 17 Booij, K., Smedes, F., van Weerlee, E.M., 2002. Spiking of performance reference compounds in low density polyethylene and silicone passive water samplers. *Chemosphere*, vol. 46, pp 1157-1161.
- 18 Rusina, T.P., Smedes, F., Koblizkova, M., Klanova, J., 2010b. Calibration of Silicone Rubber Passive Samplers: Experimental and Modeled Relations between Sampling Rate and Compound Properties. *Environmental Science & Technology*, vol. 44, pp 362-367.
- 19 Pawliszyn, J., 1997. *Solid Phase Microextraction Theory and Practice*, Wiley-VCH. Inc., New York.
- 20 Vrana, B., Mills, G.A., Allan, I.J., Dominiak, E., Svensson, K., Knutsson, J., Morrison, G., Greenwood, R., 2005. Passive sampling techniques for monitoring pollutants in water. *Trends in Analytical Chemistry*, vol. 24, pp 845-868.
- 21 Ahn, S., Werner, D., Karapanagioti, H.K., McGlothlin, D.R., Zare, R.N., Luthy, R.G., 2005. Phenanthrene and pyrene sorption and intraparticle diffusion in polyoxymethylene, coke, and activated carbon. *Environmental Science & Technology*, vol. 39, pp 6516-6526.
- 22 Rusina, T.P., Smedes, F., Klanova, J., Booij, K., Holoubek, I., 2007. Polymer selection for passive sampling: A comparison of critical properties. *Chemosphere*, vol. 68, pp 1344-1351.
- 23 Ter Laak, T.L., Busser, F.J.M., Hermens, J.L.M., 2008. Poly(dimethylsiloxane) as passive sampler material for hydrophobic chemicals: Effect of chemical properties and sampler characteristics on partitioning and equilibration times. *Analytical Chemistry*, vol. 80, pp 3859-3866.
- 24 Alvarez, D.A., Petty, J.D., Huckins, J.N., Jones-Lepp, T., Getting, D.T., Goddard, J., Manahan, S.E. (2004). Development of a passive, in situ, integrative sampler for hydrophilic organic contaminants in aquatic environments. *Environmental Toxicology and Chemistry*, vol 23, pp 1640-1648.
- 25 Stuer-Lauridsen, F., 2005. Review of passive accumulation devices for monitoring organic micropollutants in the aquatic environment. *Environmental Pollution*, vol. 136, pp 503-524.
- 26 Vrana, B., Mills, G.A., Kotterman, M., Leonards, P., Booij, K., Greenwood, R., 2007. modelling and field application of the Chemcatcher passive sampler calibration data for the monitoring of hydrophobic organic pollutants in water. *Environmental Pollution*, vol. 145, pp 895-904

BIJLAGE C

OVERZICHTSLIJST STOFFEN EN TOEPASSINGSMOGELIJKHEDEN PASSIVE SAMPLERS

Voor 844 stoffen is bepaald welke type sampler zinvol is om toe te passen en wat voor een concentratie er bepaald kan worden ((semi)-kwantitatief of kwalitatief). In tabel C1 staan de type stoffen met afkorting en het aantal van deze stoffen die zijn opgenomen in de totale lijst.

TABEL C1 TYPE STOFFEN MET AFKORTINGEN AANTALLEN OPGENOMEN DE OVERZICHTSLIJST

Type stof	Afkorting	Aantal
Geen beschrijving*	nn	189
Brandvertragers	BrdV	13
Conserveringsmiddel	CnsM	1
Fenolen	FenL	6
Geneesmiddelen	GnMd	87
Gewasbeschermingsmiddelen	GBM	358
Hormonen	Horm	8
Oplosmiddelen	OpLM	33
Diverse Organische microverontreinigingen*	Div	107
PAK's	PAK	17
PCB's	PCB	11
Röntgencontrastmiddelen	RnCt	10
Weekmakers	Wkmk	5

In Tabel C2 staan de verschillende categorieën met de bepaling van de concentratie. Hoe de categorieën precies gedefinieerd zijn staat beschreven in Hoofdstuk 5.

TABEL C2 CATEGORIEËN VAN PASSIVE SAMPLING METHODE MET EN TYPE CONCENTRATIE DAT BEPAALD KAN WORDEN

Categorie	
A	Kwantitatieve concentratie bepaling is mogelijk
B	Concentratie bepaling is semi kwantitatief
C	Screening, bepaling indicatieve concentraties
C1 (alleen Siliconenrubber)	Screening, bepaling indicatieve concentraties
D	Toepassing van passieve sampling onzeker/onbekend
E	Geen passieve sampling mogelijk

In Tabel C2 staat de totale lijst van de stoffen met de mogelijkheden om passieve sampling toe te passen. Voor siliconenrubber staan tevens de K_{pw} 's gegeven als die bepaald zijn. Hierbij is aangegeven hoe betrouwbaar de K_{pw} is. Ook is vermeld of de stof snel of langzaam in evenwicht komt met de siliconenrubber (TWA). De lijst is ook digitaal beschikbaar op <http://www.stowa.nl/bibliotheek/publicaties> (en vervolgens zoeken op rapportnummer).

CATEGORISERING VAN PASSIVE SAMPLINGSMETHODES VOOR DE 844 STOFFEN. CAS-NR = CAS-NUMMER, TYPE= AFKORTING TYPE STOF (ZIE TABEL C1.) LOG K_{ow} = MATE VAN OPLOSBAARHEID, TWA = TIJDSGEMIDDELDE CONCENTRATIE, LOG K = VERDELINGSCOËFFICIËNT WATER EN SILICONENRUBBER. STOF CURSIEF GEDRUKT STAAT OP NL-WATCHLIST.

Stofidentificatie en eigenschap				Siliconen			Ads
CASnummer	AquoNaam	Type	Log K_{ow}	Cat	Log K_{pw}	TWA	Cat
2921-88-2	ethylchlorpyrifos	GBM	5	A	4.7*	lang	B
62-73-7	dichloorvos	GBM	1.4	C	2.3*	kort	B
117-81-7	bis(2-ethylhexyl)ftalaat (DEHP)	Wkmk	7.6	C	4.6	lang	D
122-34-9	simazine	GBM	2.2	C	2.2	kort	B
134-62-3	diethyltoluamide	GBM	2.2	C1	2.8	kort	C
140-66-9	4-tertiair-octylfenol	FenL	5.3	B		lang	D
330-54-1	diuron	GBM	2.7	C	2.2	kort	B
330-55-2	linuron	GBM	3.2	A	2.9	kort	B
1912-24-9	atrazine	GBM	2.6	C	2.4	kort	B
2032-65-7	methiocarb	GBM	2.9	A	2.9	kort	B
5915-41-3	terbutylazine	GBM	3.2	C1	3.1	kort	B
7786-34-7	mevinfos	GBM	0.1	E		kort	B
10605-21-7	carbendazim	GBM	1.5	C	1.7*	lang	B
23103-98-2	pirimicarb	GBM	1.7	C	2.4*	midden	B
32809-16-8	procymidon	GBM	3.1	A	3	kort	C
34123-59-6	isoproturon	GBM	2.9	C	2.4*	midden	B
72490-01-8	fenoxycarb	GBM	4.3	C1	4.3*	lang	C
119446-68-3	difenoconazool	GBM	4.3	C		lang	B
121552-61-2	cyprodinil	GBM	4	A	4	midden	C
131860-33-8	azoxystrobin	GBM	2.5	C1	3.4	lang	B
138261-41-3	imidactoprid	GBM	0.6	C	1.7*	lang	B
143390-89-0	kresoxim-methyl	GBM	3.4	A	3.6	midden	B
161050-58-4	methoxyfenozide	GBM	3.7	C	3.1	kort	B
60-51-5	dimethoaat	GBM	0.8	C	1.9	midden	B
60-57-1	dieldrin	GBM	5.4	B		lang	D
60-80-0	fenazon (antipyrene)	GnMd	0.4	C		lang	D
67-66-3	trichloormethaan (chloroform)	OpLM	2	E		kort	D
75-09-2	dichloormethaan	GBM	1.2	E		kort	D
78-51-3	tris(2-butoxyethyl)fosfaat	Div	3.8	C	5.2	lang	C
79-01-6	trichlooretheen (tri)	OpLM	2.4	D		kort	D
80-05-7	bisfenol-A	Horm	3.3	C	1.4*	kort	B
86-50-0	methylazinfos	GBM	2.8	D		midden	B
87-86-5	pentachloorfenol	GBM	5.1	B		lang	D
91-20-3	naftaleen	PAK	3.3	A	3	kort	D
95-14-7	1,2,3-benzotriazool	Div	1.4	E		kort	D
101-21-3	chloorprofam	GBM	3.5	A	3.1	kort	C
104-40-5	4-nonylfenol	FenL	5.8	B		lang	D
107-06-2	1,2-dichloorethaan	GBM	1.5	E		kort	D
108-20-3	diisopropylether	OpLM	1.5	E		kort	D
114-26-1	propoxur	GBM	1.5	C	1.8*	kort	B
116-06-3	aldicarb	GBM	1.1	C	1.8*	midden	C
118-74-1	hexachloorbenzeen	GBM	5.7	A	5	lang	D
123-91-1	1,4-dioxaan	OpLM	-0.3	E		kort	D
127-18-4	tetrachlooretheen (per)	OpLM	3.4	B		kort	D
137-58-6	lidocaïne	GnMd	2.4	C		lang	B
298-00-0	methylparathion	GBM	2.9	A	3.1*	kort	B
298-46-4	carbamazepine	GnMd	2.4	C	2.2*	lang	B
309-00-2	aldrin	GBM	6.5	A	4*	midden	C
335-67-1	perfluorocetaanzuur	Div	4.8	D		lang	D
470-90-6	chloorfenvinfos	GBM	3.8	C1	4.3	lang	B

Stofidentificatie en eigenschap				Siliconen			Ads
CASnummer	AquoNaam	Type	Log K _{ow}	Cat	Log K _{pw}	TWA	Cat
637-92-3	2-ethoxy-2-methylpropan	Div	1.9	E		kort	D
657-24-9	metformine	GnMd	-2.6	E		kort	D
723-46-6	sulfamethoxazol	GnMd	0.9	C	0.9*	lang	B
791-28-6	trifenylfosfineoxide	Div	2.8	D		kort	D
886-50-0	terbutrin	GBM	3.7	C1	3.8*	midden	B
1024-57-3	cis-heptachloorepoxide	GBM	5	B		lang	D
1085-98-9	dichlofluamide	GBM	3.7	A	3.7	midden	C
1194-65-6	dichlobenil	GBM	2.7	A	2.8	kort	C
1222-05-5	hexahydrohexamethylcyclopentabenzopyran (HHCB)	Div	5.9	A	5.3	lang	C
1582-09-8	trifluraline	GBM	5.3	A	5.4	lang	D
1634-04-4	methyl-tertiair-butylether	Div	0.9	E		kort	D
1646-87-3	aldicarbulsulfoxide	GBM	-0.8	C		kort	D
1698-60-8	chlorigazon	GBM	1.1	C	1.3*	midden	B
1746-81-2	monolinuron	GBM	2.3	C	2.3*	kort	B
1763-23-1	perfluoroctaansulfonaat	Div	4.5	D		lang	D
2008-58-4	2,6-dichloorbenzamide	GBM	0.8	C	1.3*	kort	C
2593-15-9	etridiazol	GBM	3.4	A	3.3	kort	C
3930-20-9	sotalol	GnMd	0.2	E		lang	B
6190-65-4	desethylatrazine	GBM	1.5	C	1.3*	kort	B
13457-18-6	pyrazofos	GBM	3.8	D		lang	B
15307-86-5		diclofenac	GnMd		C	1.6*	B
15545-48-9	chloortoluron	GBM	2.4	C		midden	B
15687-27-1	ibuprofen	GnMd	4	C	1.8*	kort	B
15972-60-8	alachloor	GBM	3.5	D		midden	B
16752-77-5	methomyl	GBM	0.6	C	1*	midden	C
19937-59-8	metoxuron	GBM	1.6	C	1.6*	lang	B
22204-53-1	naproxen	GnMd	3.2	C	1.2*	kort	B
22224-92-6	fenamifos	GBM	3.2	C1	3.5	lang	C
23135-22-0	oxamyl	GBM	-0.5	C	2*	lang	B
25812-30-0	gemfibrozil	GnMd	4.8	A	2.6*	kort	B
26225-79-6	ethofumesaat	GBM	2.7	A	3	kort	C
29122-68-7	atenolol	GnMd	0.2	E		lang	B
33213-65-9	beta-endosulfan	GBM	3.8	D		midden	D
35554-44-0	imazalil	GBM	3.8	C1	4*	lang	B
36734-19-7	iprodion	GBM	3	A	2.9	kort	B
37350-58-6	metoprolol	GnMd	1.9	C	1.2*	lang	B
51218-45-2	metolachloor	GBM	3.1	A	3.3	kort	B
52888-80-9	prosulfocarb	GBM	4.6	A	4.7	lang	C
53112-28-0	pyrimethanil	GBM	2.8	A	3.1	kort	C
55179-31-2	bitertanol	GBM	4.2	C1	3.5	midden	C
55219-65-3	triadimenol	GBM	2.9	C	2.5	midden	B
57018-04-9	tolclofos-methyl	GBM	4.6	A	4.3	lang	B
57837-19-1	metalaxyl	GBM	1.6	C	2.3	midden	B
66230-04-4	esfenvaleraat	GBM	6.2	A	4.7	lang	C
66332-96-5	flutolanil	GBM	3.7	C1	3.1	kort	B
67129-08-2	metazachloor	GBM	2.1	C1	2.6	kort	B
71751-41-2	abamectine	GBM	4.4	C1	3.3*	lang	B
78649-41-9	jomeprol	Rn Ct	-2.8	E		lang	E
81103-11-9	claritromycine	GnMd	3.2	D		lang	B
95737-68-1	pyriproxyfen	GBM	5.6	D		lang	D
96489-71-3	pyridaben	GBM	6.4	D		lang	D
107534-96-3	tebuconazol	GBM	3.7	C1	3.4	midden	B
111988-49-9	thiacloprid	GBM	2.3	C	2.1*	lang	B
120068-37-3	fipronil	nn	4	C		midden	C

Stofidentificatie en eigenschap				Siliconen			Ads
CASnummer	AquoNaam	Type	Log K _{ow}	Cat	Log K _{pw}	TWA	Cat
123312-89-0	pymetrozine	GBM	-0.2	C1	2.6*	lang	C
141517-21-7	trifloxystrobin	GBM	4.5	C1	4.8	lang	C
153719-23-4	thiamethoxam	GBM	0.8	E		kort	C
168316-95-8	spinosad	GBM	5.6	D		lang	D
173584-44-6	indoxacarb	GBM	4.6	D		lang	D
50-18-0	cyclofosfamide	GnMd	0.6	E		kort	D
50-28-2	17beta-estradiol	Horm	4	C	1.8*	kort	B
50-29-3	4,4'-dichloordifenyiltrichloorethaan	GBM	6.9	A	6.1	lang	D
50-32-8	benzo(a)pyreen	PAK	6.1	A	5.7	lang	C
51-28-5	2,4-dinitrofenol	FenL	1.7	C		kort	C
55-38-9	fenthion	GBM	4.1	D		lang	B
56-23-5	tetrachloormethaan (tetra)	OpLM	2.8	D		kort	D
56-38-2	ethylparathion	GBM	3.8	A	4.1*	midden	B
57-63-6	ethinylestradiol	Horm	3.7	B		midden	B
57-68-1	sulfamidine	GnMd	0.2	E		lang	B
58-08-2	caffeine	GnMd	-0.1	C	2.2*	kort	D
60-00-4	ethyleendiaminetetraethaanzuur (EDTA)	Div	-3.9	E		kort	D
63-25-2	carbaryl	GBM	2.4	C	2.2*	kort	B
67-43-6	di-ethyleentriaminepentaazijnzuur (DTPA)	GnMd	-4.9	E		kort	D
71-43-2	benzeen	OpLM	2.1	D		kort	D
71-55-6	1,1,1-trichloorethaan	OpLM	2.5	D		kort	D
72-20-8	endrin	GBM	5.2	B		lang	D
75-00-3	chloorethaan	OpLM	1.4	E		kort	D
75-01-4	chlooretheen (vinylchloride)	Div	1.6	E		kort	D
75-34-3	1,1-dichloorethaan	BrdV	1.8	E		kort	D
76-44-8	heptachloor	GBM	6.1	B		lang	D
78-40-0	triethylfosfaat	OpLM	0.8	C		kort	D
78-87-5	1,2-dichloorpropan	GBM	2	E		kort	D
79-11-8	chloorazijnzuur	GBM	0.2	E		kort	D
83-32-9	acenafteen	PAK	3.9	A	3.6	midden	C
84-65-1	antrachinon	GBM	3.4	A	3.3	kort	C
84-66-2	diethylftalaat	OpLM	2.4	C	3.2	kort	D
84-69-5	diisobutylftalaat	OpLM	4.1	C	4	midden	D
85-01-8	fenantreen	PAK	4.5	A	4.1	midden	C
85-68-7	benzylbutylftalaat	Wkmk	4.7	C		lang	D
86-73-7	fluoreen	PAK	4.2	A	3.8	midden	C
87-68-3	hexachloorbutadien	GBM	4.8	A	4.9	lang	D
88-04-0	chloorxylenol	Div	3.3	B		kort	D
88-85-7	dinoseb	GBM	3.6	D		midden	D
93-65-2	mecoprop	GBM	3.1	D		kort	C
94-74-6	2-methyl-4-chloorfenoxiazijnzuur	GBM	3.2	D		kort	C
95-47-6	1,2-xyleen	OpLM	3.1	B		kort	D
95-63-6	1,2,4-trimethylbenzeen	Div	3.6	B		midden	D
96-18-4	1,2,3-trichloorpropan	Div	2.3	D		kort	D
101-42-8	fenuron	GBM	1	C		kort	C
103-90-2	paracetamol	GnMd	0.5	C	1.2*	midden	D
105-67-9	2,4-dimethylfenol	Div	2.3	D		kort	D
106-42-3	1,4-xyleen	OpLM	3.2	B		kort	D
106-47-8	4-chlooraniline	Div	1.8	E		kort	D
108-38-3	1,3-xyleen	OpLM	3.2	B		kort	D
108-43-0	3-chloorfenol	Div	2.5	D		kort	D
108-88-3	tolueen	OpLM	2.7	D		kort	D
111-96-6	bis(2-methoxyethyl)ether	OpLM	-0.4	E		kort	D
115-29-7	endosulfan (som alfa- en beta-isomeer)	GBM	3.8	D		midden	D

Stofidentificatie en eigenschap				Siliconen			Ads
CASnummer	AquoNaam	Type	Log K _{ow}	Cat	Log K _{pw}	TWA	Cat
115-32-2	dicolfol	nn	5	B		lang	D
115-86-6	trifenylofosfaat	Wkmk	4.6	C	5	lang	C
117-96-4	amidotrizo »nezuur	Rn Ct	1.4	E		kort	D
118-79-6	2,4,6-tribroomfenol	Div	4.1	D		midden	D
120-12-7	antraceen	PAK	4.4	A	4.2	midden	C
120-36-5	2,4-dichloorfenoxypropionzuur	GBM	3.4	C		kort	C
120-83-2	2,4-dichloorfenol	GBM	3.1	B		kort	D
121-75-5	malathion	GBM	2.4	A	3.4	kort	B
122-14-5	fenitrothion	GBM	3.3	A	3.6*	midden	B
122-42-9	profam	GBM	2.6	D		kort	D
125-33-7	primidon	GnMd	0.9	E		kort	D
126-71-6	triisobutylfosfaat	Div	3.6	D		midden	D
126-73-8	tributylfosfaat	GBM	4	C1	4.9	lang	C
133-06-2	captan	GBM	2.8	C		kort	C
139-40-2	propazine	GBM	2.9	C		kort	B
148-79-8	thiabendazol	GBM	2.5	C1	2.5	lang	B
150-68-5	monuron	GBM	1.9	C	1.8*	midden	B
154-21-2	lincomycine	GnMd	0.2	E		lang	B
156-59-2	cis-1,2-dichlooretheen	OpLM	1.9	E		kort	D
156-60-5	trans-1,2-dichlooretheen	OpLM	2.1	D		kort	D
191-24-2	benzo(ghi)peryleen	PAK	6.6	A	6	lang	D
193-39-5	indeno(1,2,3-cd)pyreen	PAK	6.7	A	6.1	lang	C
205-99-2	benzo(b)fluorantheen	PAK	5.8	A	5.7	lang	C
206-44-0	fluorantheen	PAK	5.2	A	4.6	lang	C
207-08-9	benzo(k)fluorantheen	PAK	6.1	A	5.7	lang	C
298-04-4	disulfoton	GBM	4	D		midden	E
314-40-9	bromacil	GBM	2.1	C		kort	B
319-84-6	alfa-hexachloorcyclohexaan	GBM	3.8	A	3.3	kort	D
319-85-7	beta-hexachloorcyclohexaan	GBM	3.8	B	2.3	kort	D
333-41-5	diazinon	GBM	3.8	A	4.5	lang	B
465-73-6	isodrin	GBM	6.5	B		lang	D
554-00-7	2,4-dichlooraniline	GBM	2.8	D		kort	D
608-93-5	pentachloorbenzeen	GBM	5.2	A	4.6	lang	D
640-15-3	thiometon	nn	3.2	D		kort	D
731-27-1	tolyfluamide	GBM	3.9	A	4.1	midden	C
738-70-5	trimethoprim	GnMd	0.9	C	1.3*	lang	B
834-12-8	ametryn	GBM	3	D		kort	D
919-86-8	demeton-S-methyl	GBM	1	E		kort	D
950-37-8	methidathion	GBM	2.2	D		kort	D
959-98-8	alfa-endosulfan	GBM	3.8	A	4.8	lang	C
961-11-5	tetrachloorinfos (mixed isomeren)	GBM	3.5	D		lang	B
1007-28-9	desisopropylatrazine	GBM	1.2	E		kort	D
1014-69-3	desmetryn	GBM	2.4	C		kort	B
1066-51-9	aminomethylfosfonzuur	GBM	-2.5	E		kort	D
1071-83-6	glyfosaat	GBM	-3.4	E		kort	D
1420-07-1	dinoterb	GBM	3.6	D		kort	C
1563-66-2	carbofuran	GBM	2.3	C	1.8*	kort	C
1593-77-7	dodemorf	GBM	5.7	C1	3*	kort	C
1646-88-4	aldicarbulsulfon	GBM	-0.6	E		kort	D
1702-17-6	clopyralid	GBM	1.1	C		midden	C
1897-45-6	chloorthalonil	GBM	3	D	3	kort	D
1918-00-9	dicamba	GBM	2.2	D		kort	C
1918-16-7	propachloor	GBM	2.2	D		kort	B
2104-96-3	methylbromofos	GBM	5.2	D		lang	D

Stofidentificatie en eigenschap				Siliconen			Ads
CASnummer	AquoNaam	Type	Log K _{ow}	Cat	Log K _{pw}	TWA	Cat
2163-68-0	2-hydroxyatrazine	GBM	2.1	D		kort	D
2179-25-1	methiocarbsulfon	GBM	0.8	E		kort	D
2276-90-6	jotalaminezuur	RnCt	1.5	E		kort	D
2303-17-5	triallaat	GBM	4.6	A	4.7	lang	C
2635-10-1	methiocarbsulfoxide	GBM	0.7	E		kort	D
2642-71-9	ethylazinfos	GBM	3.4	D		lang	B
3567-62-2	1-(3,4-dichloorfenyl)-3-methylureum	GBM	2.9	D		kort	D
4824-78-6	ethylbromofos	GBM	6.2	D		lang	D
5598-13-0	methylchlorpyrifos	GBM	4.3	D		lang	D
6153-64-6	oxytetracycline	GnMd		D		midden	D
6493-05-6	pentoxifylline	GnMd	0.3	E		lang	B
7287-19-6	prometryne	GBM	3.5	C		midden	B
12002-48-1	trichloorbenzeen	GBM	4.2	B		midden	D
13171-21-6	fosfamidon	GBM	0.8	E		kort	D
13360-45-7	chlorbromuron	GBM	3.1	C		kort	D
13674-84-5	trichloorpropylfosfaat	BrdV	2.6	C		kort	C
13684-56-5	desmedifam	GBM	3.4	C		kort	C
18181-80-1	broompropylaar	GBM	5.4	A	4.5	lang	C
18323-44-9	clindamycine	GnMd	2.2	D		kort	D
18691-97-9	metabenzthiazuron	GBM	2.6	A	2.6*	kort	B
21087-64-9	metribuzin	GBM	1.7	C	1.7*	kort	B
22071-15-4	ketoprofen	GnMd	3.1	D		kort	B
23560-59-0	heptenofos	GBM	2.3	D		kort	B
23564-05-8	thiofaaat-methyl	GBM	1.4	E		kort	C
23893-13-2	anhydro-erythromycine	GnMd		D		midden	D
23950-58-5	propyzamide	GBM	3.4	A	2.7	kort	C
24017-47-8	triazofos	GBM	3.3	D		lang	B
24579-73-5	propamocarb	GBM	1.1	C		lang	B
25057-89-0	bentazon	GBM	2.3	D		kort	C
28044-83-9	trans-heptachloorepoxide	GBM	5.2	B		lang	D
28179-44-4	joxitalaminezuur	RnCt	0.5	E		kort	D
29232-93-7	methylpirimifos	GBM	4.2	A	4.3	lang	C
30125-63-4	desethylterbutylazine	GBM	1.9	C		kort	B
34681-24-8	butocarboximulfoxide	GBM	-0.9	E		kort	D
40487-42-1	pendimethalin	GBM	5.2	A	4.7	lang	C
41394-05-2	metamitron	GBM	0.8	C	1*	midden	B
41483-43-6	bupirimaat	GBM	2.7	C1	4.3*	lang	C
41859-67-0	bezafibraat	GnMd	4.2	D		lang	B
42576-02-3	bifenox	GBM	4.5	A	4.8	lang	C
43121-43-3	triadimefon	GBM	2.8	D		kort	D
50471-44-8	vinclozolin	GBM	3.1	A	3.2	kort	C
51276-47-2	glufosinaat	GBM	-4.5	E		kort	D
51630-58-1	fenvaleraat	GBM	6.2	A	4.6*	lang	C
52315-07-8	cypermethrin	GBM	6.6	A	5	lang	C
52918-63-5	deltamethrin	GBM	6.2	A	5.4*	lang	C
55335-06-3	triclopyr	GBM	2.5	D		kort	C
57646-30-7	furalaxyl	GBM	2.6	D		kort	D
60207-90-1	propiconazol	GBM	3.7	C		lang	B
62883-00-5	jopamidol	RnCt	-1	E		kort	D
66108-95-0	johexol	RnCt	-3	E		kort	D
66215-27-8	cyromazine	GBM	1	E		kort	C
66840-71-9	4-dimethylaminosulfotoluidide	nn	1.7	E		kort	D
67564-91-4	fenpropimorf	GBM	4.9	A	3.6*	midden	C
68694-11-1	triflumizool	GBM	1.4	C	4.2	midden	C

Stofidentificatie en eigenschap				Siliconen			Ads
CASnummer	AquoNaam	Type	Log K _{ow}	Cat	Log K _{pw}	TWA	Cat
69327-76-0	buprofezin	GBM	4.3	D		lang	D
70288-86-7	ivermectine	GnMd	4.1	D		midden	D
74070-46-5	aclonifen	GBM	4	A	3.8*	midden	C
78587-05-0	hexythiazox	GBM	5.6	C		lang	B
78763-54-9	monobutyltin (kation)	Div	3.3	D		kort	D
79622-59-6	fluazinam	GBM	4	C		midden	D
80214-83-1	roxitromycine	GnMd	2.8	D		lang	B
81777-89-1	clomazon	GBM	2.5	A	2.9*	kort	C
83121-18-0	teflubenzuron	GBM	4.6	C		midden	B
83905-01-5	azitromycine	GnMd	4	C1	2.8*	lang	B
85535-84-8	som C10-C13-chlooralkanen	Div	5.4	B		lang	D
85721-33-1	ciprofloxacine	GnMd	0.3	E		kort	B
87130-20-9	diethofencarb	GBM	2.9	D		kort	D
87674-68-8	dimethenamide	GBM	2.2	A	2.7	kort	C
88283-41-4	pyrifenox	GBM	3.7	D		midden	D
91465-08-6	lambda-cyhalothrin	GBM	7	A	5.1	lang	C
110488-70-5	dimethomorf	GBM	2.7	C		kort	D
111991-09-4	nicosulfuron	GBM	0	E		lang	B
119168-77-3	tebufenpyrad	GBM	4.6	C1	4.9*	lang	C
122931-48-0	rimsulfuron	GBM	0.3	E		lang	B
135410-20-7	acetamiprid	GBM	2.6	D		kort	B
175013-18-0	pyraclostrobin	nn	4	D		midden	D
188425-85-6	boscalid	nn	3	C	3.6	midden	B
50-27-1	estriol	Horm	2.4	D		kort	D
50-78-2	aspirine	GnMd	1.2	E		kort	E
51-03-6	piperonyl-butoxide	GBM	4.8	D		lang	D
52-68-6	trichloorfon	GBM	0.5	E		kort	D
53-16-7	oestron	Horm	3.1	C	2.3	kort	B
53-19-0	2,4'-dichloordifenyldichloorethaan	GBM	5.9	A	5.5	lang	D
53-70-3	dibenzo(a,h)antraceen	PAK	6.8	A	6.2	lang	C
53-86-1	indometacine	GnMd	4.3	D		lang	D
54-31-9	furosemide	GnMd	2	D		kort	D
56-55-3	benzo(a)antraceen	PAK	5.8	A	5.3	lang	C
56-72-4	cumafos	GBM	4.1	D		lang	B
56-75-7	chlooramfenicol	GnMd	1.1	E	2.2*	lang	B
57-74-9	chloordaan	GBM	6.2	B		lang	D
57-83-0	progesteron	Horm	3.9	A	4	midden	B
57-91-0	17alpha-estradiol	Horm	4	C	1.7	kort	B
58-15-1	aminofenazon	GnMd	1	E		kort	D
58-32-2	dipyridamol	GnMd	2.7	D		kort	D
58-89-9	gamma-hexachloorcyclohexaan (lindaan)	GBM	3.7	A	3.3	kort	C
58-90-2	2,3,4,6-tetrachloorfenol	Div	4.4	B		lang	D
58-93-5	hydrochloorthiazide	GnMd	-0.1	E		kort	D
59-40-5	sulfaquinoxaline	GnMd	1.7	E		kort	D
59-50-7	4-chloor-3-methylfenol	Div	3.1	D		kort	D
61-72-3	cloxacilline	GnMd	2.5	D		kort	D
61-82-5	amitrol	GBM	-1	E		kort	D
62-44-2	fenacitine	GnMd	1.6	E		kort	D
62-53-3	aniline	Div	0.9	E		kort	D
62-75-9	dimethylnitrosamine	nn	-0.6	E		kort	D
66-79-5	oxacilline	GnMd	2.4	D		kort	D
67-45-8	furazolidon	GnMd	0	E		midden	B
67-72-1	hexachloorethaan	Div	4.1	B		midden	D
68-35-9	sulfadiazine	GnMd	-0.1	E		lang	B

Stofidentificatie en eigenschap				Siliconen			Ads
CASnummer	AquoNaam	Type	Log K _{ow}	Cat	Log K _{pw}	TWA	Cat
72-33-3	mestranol	Horm	4.7	B		lang	D
72-43-5	methoxychlor	GBM	5.1	A	5.2	lang	D
72-54-8	4,4'-dichloordifenyldichloorethaan	GBM	6	A	5.4	lang	D
72-55-9	4,4'-dichloordifenyldichlooretheen	GBM	6.5	A	6.3	lang	D
74-95-3	dibroommethaan	GBM	1.7	E		kort	D
74-97-5	broomchloromethaan	Div	1.4	E		kort	D
75-18-3	dimethylsulfide	nn	0.9	E		kort	D
75-25-2	tribroommethaan	Div	2.4	D		kort	D
75-27-4	dichloorbroommethaan	GBM	2	D		kort	D
75-35-4	1,1-dichlooretheen	Div	2.1	D		kort	D
75-69-4	Trichloorfluormethaan	OplM	2.5	D		kort	D
76-03-9	trichloorazijnzuur	nn	1.3	E		kort	D
76-13-1	1,1,2-trichloor-1,2,2-trifluorethaan	OplM	3.2	B		kort	D
78-42-2	tris(2-ethylhexyl)fosfaat	nn	9.5	C	6.1	lang	C
78-88-6	2,3-dichloorpropeen	Div	2.4	D		kort	D
79-00-5	1,1,2-trichloorethaan	Div	1.9	E		kort	D
79-34-5	1,1,2,2-tetrachloorethaan	OplM	2.4	D		kort	D
79-43-6	dichloorazijnzuur	nn	0.9	E		kort	D
80-08-0	dapson	GnMd	1	E		kort	D
80-09-1	4,4-sulfonyldifenol	nn	1.6	E		kort	D
80-32-0	sulfachloorpyridazine	GnMd	0.3	E		lang	B
83-42-1	2-chloor-6-nitrotolueen	Div	3.1	D		kort	D
84-61-7	dicyclohexylftalaat	Div	6.2	C	5.7	lang	D
84-74-2	dibutylftalaat	GBM	4.5	C	4.6	lang	D
84-77-5	Didecylftalaat	Div	9	D		lang	D
85-40-5	tetrahydroftalimide	nn	0.3	E		kort	D
87-40-1	TCA (2,4,6-trichlooranisol)	nn	4.1	B		midden	D
87-60-5	3-chloor-2-methylaniline	Div	2.3	D		kort	D
87-61-6	1,2,3-trichloorbenzeen	GBM	4	A	3.7	midden	D
87-62-7	2,6-xylydine	nn	1.8	E		kort	D
87-65-0	2,6-dichloorfenol	FenL	2.8	D		kort	D
88-06-2	2,4,6-trichloorfenol	GBM	3.7	B		midden	D
88-73-3	1-chloor-2-nitrobenzeen	Div	2.2	D		kort	D
88-75-5	2-nitrofenol	nn	1.8	E		kort	D
89-59-8	4-chloor-2-nitrotolueen	Div	3	D		kort	D
89-60-1	4-chloor-3-nitrotolueen	Div	3	D		kort	D
89-61-2	2,5-dichloornitrobenzeen	Div	3.1	D		kort	D
89-63-4	4-chloor-2-nitroaniline	Div	2.7	D		kort	D
89-83-8	6-isopropyl-m-cresol	GBM	3.3	B		kort	D
90-00-6	2-ethylfenol	Div	2.5	D		kort	D
90-13-1	1-chloornaftaleen	Div	4	B		midden	D
90-43-7	2-fenylfenol	FenL	3.1	B		kort	D
92-52-4	bifenyl	Div	4	B		midden	D
92-87-5	benzidine	Div	1.3	E		kort	D
93-72-1	2,4,5-trichloorfenoxypionzuur	GBM	3.8	C		midden	D
93-76-5	2,4,5-trichloorfenoxiazijnzuur	GBM	3.3	C		kort	D
94-75-7	2,4-dichloorfenoxiazijnzuur	GBM	2.8	D		kort	C
94-81-5	2-methyl-4-chloorfenoxyboterzuur	GBM	3.5	D		midden	D
94-82-6	2,4-dichloorfenoxyboterzuur	GBM	3.5	D		midden	D
95-49-8	2-chloortolueen	OplM	3.4	B		kort	D
95-50-1	1,2-dichloorbenzeen	OplM	3.4	A	3.2	kort	D
95-51-2	2-chlooraniline	Div	1.9	E		kort	D
95-53-4	2-methylaniline	nn	1.3	E		kort	D
95-57-8	2-chloorfenol	Div	2.2	D		kort	D

Stofidentificatie en eigenschap				Siliconen			Ads
CASnummer	AquoNaam	Type	Log K _{ow}	Cat	Log K _{pw}	TWA	Cat
95-65-8	3,4-dimethylfenol	Div	2.2	D		kort	D
95-74-9	3-chloor-4-methylaniline	GBM	2.3	D		kort	D
95-76-1	3,4-dichlooraniline	GBM	2.7	D		kort	D
95-77-2	3,4-dichloorfenol	GBM	3.3	B		kort	D
95-79-4	5-chloor-2-methylaniline	Div	2.3	D		kort	D
95-82-9	2,5-dichlooraniline	GBM	2.8	D		kort	D
95-87-4	2,5-dimethylfenol	Div	2.3	D		kort	D
95-94-3	1,2,4,5-tetrachloorbenzeen	Div	4.6	B		midden	D
95-95-4	2,4,5-trichloorfenol	GBM	3.7	B		midden	D
96-12-8	1,2-dibroom-3-chloorpropaan	GBM	3	D		kort	D
96-23-1	1,3-dichloor-2-propanol	Div	0.8	E		kort	D
96-45-7	ethyleenthioureum	GBM	-0.7	E		kort	D
96-83-3	jopanoïnezuur	Rn Ct	5.8	C	2.2*	kort	B
97-00-7	1-chloor-2,4-dinitrobenzeen	Div	2.2	D		kort	D
98-06-6	tertiair-butylbenzeen	GBM	4.1	B		midden	D
98-82-8	cumeen	Div	3.7	B		midden	D
98-87-3	alfa,alfa-dichloortolueen	Div	3	D		kort	D
98-95-3	nitrobenzeen	Div	1.8	E		kort	D
99-30-9	2,6-dichloor-4-nitroaniline	GBM	2.8	D		kort	D
99-54-7	3,4-dichloornitrobenzeen	Div	3.1	D		kort	D
99-87-6	1-isopropyl-4-methyl-benzeen	Div	4.1	B		midden	D
99-88-7	4-isopropylaniline (Cumidine)	Div	2.5	D		kort	D
100-00-5	1-chloor-4-nitrobenzeen	Div	2.4	D		kort	D
100-41-4	ethylbenzeen	OpLM	3.2	B		kort	D
100-42-5	styreen	Div	3	D		kort	D
100-97-0	Urotropine	CnsM	-4.2	E		kort	D
102-06-7	1,3 diphenylguanidine	nn	2.9	D		kort	D
102-30-7	dicloran	GBM	4.2	B		midden	D
103-65-1	1-propylbenzeen	OpLM	3.7	B		midden	D
104-51-8	butylbenzeen	Div	4.4	B		lang	D
106-43-4	4-chloortolueen	Div	3.3	B		kort	D
106-46-7	1,4-dichloorbenzeen	Div	3.4	A	3.2	kort	D
106-48-9	4-chloorfenol	Div	2.4	D		kort	D
106-89-8	epichloorhydrine	OpLM	0.4	E		kort	D
106-93-4	1,2-dibroomethaan	GBM	2	E		kort	D
107-05-1	3-chloorpropeen	Div	1.9	E		kort	D
107-07-3	2-chloorethanol	Div	0	E		kort	D
108-39-4	m-cresol	nn	2	E		kort	D
108-41-8	3-chloortolueen	Div	3.3	B		kort	D
108-42-9	3-chlooraniline	Div	1.9	E		kort	D
108-60-1	2,2'-Dichloordiisopropyl ether	Div	2.5	D		kort	D
108-67-8	1,3,5-trimethylbenzeen	OpLM	3.4	B		kort	D
108-70-3	1,3,5-trichloorbenzeen	GBM	4.2	A	3.8	midden	D
108-77-0	cyanuurzuurchloride	Div	1.7	E		kort	D
108-86-1	broombenzeen	OpLM	3	D		kort	D
108-90-7	chloorbenzeen	OpLM	2.8	D		kort	D
108-95-2	fenol	Div	1.5	E		kort	D
109-89-7	diethylamine	GBM	0.6	E		kort	D
109-99-9	tetrahydrofuraan	nn	0.5	E		kort	D
112-49-2	2,5,8,11-tetraoxadodecaan	nn	-0.8	E		kort	D
114-07-8	erytromycine	GnMd	3.1	D		lang	B
115-96-8	tri(2-chloorethyl)fosfaat	BrdV	1.4	C	2.9	kort	C
117-18-0	tecnazeen	GBM	4.4	D		lang	D
117-84-0	dioctylftalaat	Wkmk	8.1	C	6.1	lang	D

Stofidentificatie en eigenschap				Siliconen			Ads
CASnummer	AquoNaam	Type	Log K _{ow}	Cat	Log K _{pw}	TWA	Cat
120-82-1	1,2,4-trichloorbenzeen	GBM	4	A	3.7	midden	D
121-73-3	1-chloor-3-nitrobenzeen	Div	2.5	D		kort	D
121-86-8	2-chloor-4-nitrotolueen	Div	3	D		kort	D
122-11-2	sulfadimethoxine	GnMd	1.6	E		kort	D
122-88-3	4-chloorfenoxiazijnzuur	GBM	2.2	D		kort	D
124-18-5	decaan	nn	5	B		lang	D
124-40-3	dimethylamine	Div	-0.4	E		kort	D
124-48-1	dibroomchloormethaan	Div	2.2	D		kort	D
126-75-0	demeton-S	GBM	2	E		kort	D
126-99-8	chloropreen	Div	2.5	D		kort	D
127-63-9	difenylsulfon	Div	2.4	D		kort	D
127-79-7	sulfamerazin	nn	0.1	E		kort	D
129-00-0	pyreen	PAK	4.9	A	4.7	lang	C
131-11-3	dimethylftalaat	Div	1.6	C	2.5	kort	D
131-16-8	dipropylftalaat	Div	3.3	D		kort	D
132-64-9	dibenzofuran	GBM	4.1	B		midden	D
135-98-8	secundair-butylbenzeen	Div	4.6	B		lang	D
137-42-8	metham-natrium	nn	-2.6	E		kort	D
139-13-9	nitrotriazijnzuur (NTA)	Div	-3.8	E		kort	D
142-28-9	1,3-dichloorpropaan	Div	2	D		kort	D
144-83-2	sulfapyridine	nn	0.4	E		kort	D
147-52-4	nafcilline	GnMd	3.8	D		midden	D
208-96-8	acenaftyleen	PAK	3.9	A	3.3	kort	C
218-01-9	chryseen	PAK	5.8	A	5.2	lang	C
297-78-9	telodrin	GBM	4.5	B		lang	D
297-99-4	trans-fosfamidon	GBM	0.8	E		kort	D
298-03-3	demeton-0	GBM	3.2	D		kort	D
301-12-2	methyloxydemeton	GBM	-0.7	C1	2.6*	kort	C
302-17-0	chloralhydraat	GnMd	1	E		kort	D
304-55-2	succimer	GBM	-1	E		kort	D
319-86-8	delta-hexachloorcyclohexaan	GBM	4.1	B		midden	D
479-92-5	propyfenazon	GnMd	1.9	E		kort	D
484-47-9	Trifenyl-imidazool-triglycine (Mw431)	nn	5.4	B		lang	D
525-66-6	propranolol	GnMd	3.5	D		kort	D
534-52-1	4,6-dinitro-o-cresol	GBM	2.1	D		kort	C
535-89-7	crimidine	GBM	1.3	E		kort	D
540-59-0	1,2-dichlooretheen	OpIM	2	D		kort	D
541-05-9	Cyclotrisiloxaan, hexamethyl	Div	5.6	D		lang	D
541-73-1	1,3-dichloorbenzeen	OpIM	3.5	A	3.1	kort	D
542-75-6	1,3-dichloorpropeen	GBM	2	D		kort	D
551-92-8	dimetridazol	GnMd	0.3	E		kort	D
551-93-9	2-aminoacetofenon	GBM	1.6	C	1.7*	kort	C
558-13-4	Tetrabroommethaan	Div	3.4	B		kort	D
563-12-2	ethion	nn	5.1	D		lang	D
563-58-6	1,1-dichloorpropeen	Div	2.5	D		kort	D
564-25-0	doxycycline	GnMd	0	E		kort	B
576-24-9	2,3-dichloorfenol	GBM	2.8	D		kort	D
576-26-1	2,6-dimethylfenol	Div	2.4	D		kort	D
583-78-8	2,5-dichloorfenol	nn	3.1	B		kort	D
584-79-2	allethrin	GBM	4.8	D		lang	D
591-35-5	3,5-dichloorfenol	GBM	3.6	B		midden	D
594-20-7	2,2-dichloorpropaan	Div	2.9	D		kort	D
604-75-1	oxazepam	GnMd	2.2	D		kort	D
606-17-7	jodipamide	RnCt	5.2	D		lang	D

Stofidentificatie en eigenschap				Siliconen			Ads
CASnummer	AquoNaam	Type	Log K _{ow}	Cat	Log K _{pw}	TWA	Cat
608-27-5	2,3-dichlooraniline	GBM	2.8	D		kort	D
608-31-1	2,6-dichlooraniline	GBM	2.8	D		kort	D
609-19-8	3,4,5-trichloorfenol	GBM	4	B		midden	D
611-06-3	2,4-dichloornitrobenzeen	Div	3.1	D		kort	D
615-65-6	2-chloor-4-methylaniline	Div	2.3	D		kort	D
618-62-2	1,3-dichloor-5-nitrobenzeen	Div	3.1	D		kort	D
620-17-7	3-ethylfenol	Div	2.4	D		kort	D
626-43-7	3,5-dichlooraniline	GBM	2.9	D		kort	D
630-20-6	1,1,1,2-tetrachloorethaan	OplM	2.9	D		kort	D
631-64-1	dibroomazijnzuur	nn	0.7	E		kort	D
634-66-2	1,2,3,4-tetrachloorbenzeen	Div	4.6	A	4.2	midden	D
634-90-2	1,2,3,5-tetrachloorbenzeen	Div	4.6	B		lang	D
637-07-0	clofibrat	GnMd	3.6	D		midden	D
645-83-0	3-(methylsulfonyl)propanoic acid / MSPA	nn	-1.4	E		kort	D
668-34-8	trifenylytin (kation)	GBM	3.5	D		midden	D
709-98-8	propanil	GBM	3.1	D		kort	D
789-02-6	2,4'-dichloordifenylyl-trichloorethaan	GBM	6.8	A	6.3	lang	D
879-39-0	2,3,4,5-tetrachloornitrobenzeen	Div	3.9	D		midden	D
882-09-7	clofibrinezuur	GnMd	2.6	D		kort	B
892-20-6	difenylytin (kation)	GBM	3.5	D		midden	D
933-75-5	2,3,6-trichloorfenol	GBM	3.8	B		midden	D
933-78-8	2,3,5-trichloorfenol	GBM	3.8	B		midden	D
935-95-5	2,3,5,6-tetrachloorfenol	Div	3.9	B		midden	D
944-22-9	fonofos	GBM	3.9	D		midden	D
956-48-9	DCIP (2,6 dichloorindofenol)	nn	2.8	D		kort	D
1000-05-1	octamethyltetrasiloxaan	nn	7.1	D		lang	D
1002-53-5	dibutylytin (kation)	GBM	1.5	E		kort	D
1031-07-8	endosulfansulfaat	GBM	3.7	D		kort	D
1113-02-6	omethoat	GBM	-0.7	E		kort	D
1331-47-1	dichloorbenzidine	Wkmk	3.2	D		kort	D
1401-69-0	tylosine	GnMd	1.6	E		lang	B
1461-25-2	tetrabutyltin	Div	9.4	D		lang	D
1689-83-4	ioxynil	GBM	3.4	D		kort	C
1689-84-5	broomoxynil	GBM	3.4	D		kort	C
1891-95-8	chlooroxynil	GBM	2.9	D		kort	D
1893-33-0	pipamperon	GnMd	2	D		kort	D
1951-25-3	amiodarone	GnMd	7.6	D		lang	D
1982-47-4	chlooroxuron	GBM	3.7	D		midden	D
2013-58-3	meclocycline	GnMd		D		midden	D
2164-08-1	lenacil	GBM	3.1	C	2.1	midden	B
2310-17-0	fosalon	nn	4.4	D		lang	D
2327-02-8	1-(3,4-dichloorfenyl)ureum	GBM	2.6	D		kort	D
2385-85-5	mirex	GBM	6.9	B		lang	D
2439-10-3	dodine	GBM	1.2	C1	3*	lang	B
2611-82-7	1,2,6-trisulfonaat	nn	-1.7	E		kort	D
2954-94-1	dicyclohexyltin (kation)	GBM	2.2	D		kort	D
3060-89-7	metobromuron	GBM	2.4	C		kort	C
3091-25-6	mono-octyltin	Div	2.1	D		kort	D
3091-32-5	tricyclohexyltin (kation)	GBM	7.1	B		lang	D
3116-76-5	dicloxacilline	GnMd	2.9	D		kort	D
3209-22-1	2,3-dichloornitrobenzeen	Div	3	D		kort	D
3347-22-6	dithianon	GBM	2.8	D		kort	D
3380-34-5	triclosan	nn	4.8	A	3.9	midden	D
3424-82-6	2,4'-dichloordifenyldichlooretheen	GBM	6	B		lang	D

Stofidentificatie en eigenschap				Siliconen			Ads
CASnummer	AquoNaam	Type	Log K _{ow}	Cat	Log K _{pw}	TWA	Cat
3622-84-2	butylbenzeensulfonamide	nn	2.3	D		kort	D
3648-20-2	Diundecylftalaat	Div	11.5	D		lang	D
3648-21-3	diheptylftalaat	nn	7.6	D		lang	D
3766-60-7	buturon	GBM	3	D		kort	D
3778-73-2	ifosfamide	GnMd	0.9	C1	3.2*	lang	B
3861-47-0	ioxynil_octanoaat	GBM	6.4	D		lang	D
3878-45-3	trifenylfosfinesulfide	nn	4.9	D		lang	D
4849-32-5	Karbutilaat	GBM	1.7	E		kort	D
4901-51-3	2,3,4,5-tetrachloorfenol	Div	4.2	B		midden	D
5103-71-9	cis-chloordaan	GBM	6.1	B		lang	D
5103-74-2	trans-chloordaan	GBM	6.2	B		lang	D
5367-28-2	5-chloor-2-nitrotolueen	Div	3	D		kort	D
5436-43-1	2,2',4,4'-tetrabroomdifenylether	BrdV	6.8	B		lang	D
5786-21-0	clozapine	GnMd	3.2	D		kort	D
6781-42-6	1,3-diacetylbenzeen	Div	1.4	E		kort	D
7012-37-5	2,4,4'-trichloorbifenyl	PCB	5.6	A	5.5	lang	D
7060-74-4	oleandomycine	GnMd		D		midden	D
7286-69-3	sebutylazine	GBM	2.6	D		kort	D
7421-93-4	endrinaaldehyde	GBM	4.8	B		lang	D
7696-12-0	tetramethrin	GBM	4.7	A	4.7	lang	C
8001-58-9	creosoot	PAK		D		midden	D
8025-81-8	spiramycine	GnMd	1.9	E		kort	D
8065-48-3	Demeton	GBM		D		midden	D
9002-91-9	metaldehyde	GBM	0.1	E		kort	D
10061-01-5	cis-1,3-dichloorpropeen	GBM	2.1	D		kort	D
10061-02-6	trans-1,3-dichloorpropeen	GBM	2	D		kort	D
10265-92-6	methamidofos	GBM	-0.8	E		kort	D
10543-57-4	tetraacetyltheleendiamine	Div	-2.4	E		kort	D
12427-38-2	maneb	nn	1.3	E		kort	D
13194-48-4	ethoprofos	GBM	3.6	C1	3.4*	kort	B
13356-08-6	fenbutatinoxide	GBM	14.6	B		lang	B
13392-18-2	fenoterol	GnMd	1.2	E		kort	D
13674-87-8	tris(2-chloor-1-(chloormethyl)ethyl)fosfaat	BrdV	3.6	C	3.9	midden	C
13684-63-4	fenmedifam	GBM	3.6	C1	3.1*	midden	D
13710-19-5	tolfenaminezuur	GnMd	5.2	D		lang	D
14816-18-3	foxim	GBM	4.4	D		lang	D
15764-16-6	2,4-dimethylbenzaldehyde	Div	2.8	D		kort	D
15950-66-0	2,3,4-trichloorfenol	GBM	3.8	B		midden	D
16118-49-3	carbetamide	GBM	1.6	C		kort	D
16484-77-8	mecoprop-P	GBM	3.2	D		kort	D
16606-02-3	2,4',5-trichloorbifenyl	PCB	5.7	A	5.4	lang	D
16887-00-6	chloride	nn	0.5	E		kort	D
17040-19-6	demeton-S-methylsulfon	GBM	-0.9	E		kort	D
17090-79-8	monensin	GnMd	5.4	D		lang	D
17675-60-4	Guanyl urea		-2.5	E		kort	D
18467-77-1	dikegulac	nn	1.4	E		kort	D
18559-94-9	salbutamol	GnMd	0.6	E		kort	D
18695-01-7	-apo-oxytetracycline*	GnMd	-0.9	E		kort	D
18708-86-6	beta-chloorfenvinfos	GBM	3.8	C1	4.9	lang	D
18708-87-7	alfa-chloorfenvinfos	GBM	3.8	A	4.6	lang	D
18751-99-0	beta-apo-oxytetracycline	GnMd	0.5	E		kort	D
21312-10-7	acetylsulfamethoxazol	GnMd	1.2	E		kort	D
21725-46-2	cyanazine	GBM	2.2	D		kort	B
22781-23-3	bendiocarb	GBM	1.7	E		kort	D

Stofidentificatie en eigenschap				Siliconen			Ads
CASnummer	AquoNaam	Type	Log K _{ow}	Cat	Log K _{pw}	TWA	Cat
22967-92-6	methyalkwik	Div	0.1	E		kort	D
23505-41-1	ethylpirimifos	nn	4.8	D		lang	D
23783-98-4	cis-fosfamidon	GBM	0.8	E		kort	D
25154-52-3	nonylfenol	GBM	5.8	A	4.6	lang	D
25311-71-1	isofenfos	GBM	4.1	D		midden	D
25637-99-4	hexabroomcyclododecaan	nn	7.7	B		lang	D
26787-78-0	amoxicilline	GnMd	0.9	E		kort	E
27193-28-8	som tertiair-octylfenol-isomeren	Fenl	5.5	A	3.8	midden	D
27304-13-8	Oxy-chloordaan	GBM	5.5	B		lang	D
27314-13-2	norflurazon	GBM	2.3	D		kort	D
28159-98-0	irgarol	nn	4.1	D		midden	D
28343-61-5	4-hydroxy-2,5,6-trichloorisofaltonitril	GBM	3.1	D		kort	D
29973-13-5	ethiofencarb	GBM	2	C		kort	D
30043-49-3	ethidimuron	GBM	-0.2	E		kort	D
30391-89-0	isopropylanthranilamide	Div	1.8	E		kort	D
31508-00-6	2,3',4,4',5-pentachloorbifenyl	PCB	7.1	A	6.4	lang	D
31879-05-7	fenoprofen	GnMd	3.9	D		midden	D
32774-16-6	3,3',4,4',5,5'-hexachloorbifenyl	PCB	7.4	B		lang	D
34205-21-5	dimefuron	GBM	2.5	D		kort	D
34681-10-2	butocarboxim	GBM	1.1	E		kort	D
35065-27-1	2,2',4,4',5,5'-hexachloorbifenyl	PCB	7.8	A	6.7	lang	D
35065-28-2	2,2',3,4,4',5'-hexachloorbifenyl	PCB	7.4	A	6.8	lang	D
35065-29-3	2,2',3,4,4',5,5'-heptachloorbifenyl	PCB	8.3	A	7	lang	D
35065-30-6	2,2',3,3',4,4',5'-heptachloorbifenyl	PCB	8.3	A	7.1	lang	D
35367-38-5	diflubenzuron	GBM	3.9	A	3.2	kort	C
35693-99-3	2,2',5,5'-tetrachloorbifenyl	PCB	6.1	A	5.8	lang	D
36643-28-4	tributyltin (kation)	nn	4.1	D		midden	D
37680-73-2	2,2',4,5,5'-pentachloorbifenyl	PCB	6.8	A	6.3	lang	D
38260-54-7	etrimfos	GBM	2.9	D		kort	D
38939-88-7	3-chloor-4-nitrotolueen	Div	3	D		kort	D
39148-24-8	fosetyl-aluminium	GBM	-2.4	E		kort	D
41318-75-6	2,4,4'-tribroomdifenylether	BrdV	5.9	B		lang	D
41464-40-8	2,2',4,5'-tetrachloorbifenyl	PCB	6.2	A	5.9	lang	D
42200-33-9	Nadolol	GnMd	0.8	E		kort	D
42835-25-6	flumequine	GnMd	1.6	C	2.5*	lang	B
49562-28-9	fenofbraat	GnMd	5.2	A	4.7	lang	B
51146-55-6	2-hydroxyibuprofen		2.3	D		kort	D
51235-04-2	hexazinon	GBM	1.8	E		kort	D
52645-53-1	permethrin	GBM	6.5	A	5.3	lang	C
53494-70-5	Endrin keton	GBM	5	B		lang	D
55297-95-5	tiamuline	GnMd	4.8	D		lang	D
55512-33-9	pyridaat	GBM	5.7	D		midden	B
56046-17-4	1-(4-isopropylfenyl)ureum	nn	2.2	D		kort	D
57960-19-7	acequinocyl	GBM	7.4	D	3	kort	C
59017-64-0	joxaglinezuur	RnCt	2.5	D		kort	D
60142-96-3	gabapentine	GnMd		D		midden	D
60168-88-9	fenarimol	GBM	3.6	C		midden	B
60207-31-0	azaconazool	GBM	2.3	C1	2.9	lang	B
60348-60-9	2,2',4,4',5-pentabroomdifenylether	BrdV	6.8	B		lang	D
61213-25-0	flurochloridon	GBM	3.4	D		kort	D
61949-76-6	cis-permethrin	GBM	6.5	D		lang	D
61949-77-7	trans-permethrin	nn	6.5	D		lang	D
63284-71-9	nuarimol	GBM	3.2	C		kort	D
66063-05-6	pencycuron	GBM	4.8	C1	4.3*	lang	B

Stofidentificatie en eigenschap				Siliconen			Ads
CASnummer	AquoNaam	Type	Log K _{ow}	Cat	Log K _{pw}	TWA	Cat
66246-88-6	penconazool	GBM	4.7	C1	4.1	midden	B
66441-23-4	fenoxaprop-ethyl	GBM	4.6	D		lang	D
66722-44-9	bisoprolol	nn	1.9	C	1.6*	lang	B
67375-30-8	alfa-cypermethrin	nn	6.9	D		lang	D
67747-09-5	prochloraz	GBM	4.1	C1	4.8	lang	B
68085-85-8	cyhalothrin	GBM	6.8	D		lang	D
68359-37-5	cyfluthrin	GBM	6	A	5	lang	C
68631-49-2	2,2',4,4',5,5'-hexabroomdifenylether	BrdV	8.6	B		lang	D
69377-81-7	fluroxypyr	GBM	1.2	E		kort	C
69806-34-4	haloxyfop-P	GBM	3.4	C		kort	D
69806-50-4	fluazifop-butyl	GBM	4.5	A	5.4*	lang	C
71283-80-2	fenoxaprop-P-ethyl	GBM	4.6	D		lang	D
72619-32-0	haloxyfop-P-methyl	GBM	4	D		midden	D
73334-07-3	jopromide	RnCt	-2	E		lang	B
74011-58-8	enoxacine	GnMd	-0.2	E		kort	D
74051-80-2	sethoxydim	GBM	4.4	D		lang	D
74223-64-6	methyl-metsulfuron	GBM	2.2	D		lang	B
76253-60-6	TCBT-27,28,52,74,80	Div	7.1	B		lang	D
77182-82-2	glufosinaat-ammonium	GBM	-5.3	E		kort	D
79241-46-6	fluazifop-P-butyl	GBM	4.5	D		lang	D
79902-63-9	simvastatine	GnMd	4.7	D		lang	D
82097-50-5	triasulfuron	GBM	1.1	E		lang	B
82419-36-1	ofloxacin	GnMd	-0.4	E		kort	D
82558-50-7	isoxaben	GBM	3.9	D		midden	D
82657-04-3	bifenthrin	GBM	8.2	A	4.8*	lang	C
83066-88-0	fluazifop-P	GBM	3.2	D		kort	D
83164-33-4	diflufenican	GBM	4.9	A	4.7	lang	C
90717-03-6	quinmerac	GBM	0.8	E		kort	D
94125-34-5	prosulfuron	GBM	3.6	D		midden	B
94361-06-5	cyproconazool	GBM	2.9	C		midden	B
94410-05-6	dioctyltin (kation)	Div	4.5	D		lang	D
96525-23-4	flurtamon	GBM	3.2	D		kort	D
99105-77-8	sulcotrion	GBM	2.3	D		lang	B
101205-02-1	cycloxydim	GBM	3.9	C1	3.2*	midden	B
103361-09-7	flumioxazin	GBM	2.6	D		kort	D
104206-82-8	mesotrion	GBM	1.5	E		kort	D
112143-82-5	triazamaat	GBM	2.7	C1	3.1	midden	C
113158-40-0	fenoxaprop-P	GBM	4.2	D		midden	D
120116-88-3	cyazofamide	GBM	2.9	A	3.4	kort	B
120983-64-4	Prothioconazole-desthio	nn	3	D		kort	D
124495-18-7	quinoxifen	nn	4.7	B		lang	D
126535-15-7	triflusulfuron-methyl	GBM	3.6	C		midden	C
126833-17-8	fenhexamide	GBM	3.5	C	2	kort	B
131341-86-1	fludioxonil	nn	4.1	D		midden	D
131807-57-3	famoxadone	GBM	4.6	C1	4*	midden	C
133855-98-8	epoxiconazool	GBM	3.4	C		kort	D
135590-91-9	mefenpyr-diethyl	GBM	3.8	D		midden	D
137862-53-4	valsartan	GnMd	3.6	D		midden	D
138402-11-6	irbesartan	GnMd	5.3	D		lang	D
141112-29-0	isoxaflutool	GBM	2.3	D		kort	B
142459-58-3	flufenacet	GBM	3.2	D		kort	D
142469-14-5	tritosulfuron	GBM	3	D		kort	D
142891-20-1	cinidon-ethyl	GBM	4.8	A	5.2*	lang	C
145701-23-1	florasulam	nn	2.1	D		kort	D

Stofidentificatie en eigenschap				Siliconen			Ads
CASnummer	AquoNaam	Type	Log K _{ow}	Cat	Log K _{pw}	TWA	Cat
153233-91-1	etoxazool	GBM	7.2	C	4.4	lang	D
154361-50-9	capectiabine	GnMd	0.6	E		kort	D
158062-67-0	flonicamid	GnMd		C		midden	C
162354-96-3	isochloridazon	GBM	5.1	D		lang	D
182346-21-0	2,2',3,4,4'-pentabroomdifenyloether	BrdV	7.7	B		lang	D
182677-30-1	2,2',3,4,4',5'-hexabroomdifenyloether	BrdV	8.6	B		lang	D
189084-64-8	2,2',4,4',6-pentabroomdifenyloether	BrdV	7.7	B		lang	D
207122-15-4	2,2',4,4',5,6'-hexabroomdifenyloether	BrdV	8.6	B		lang	D
210631-68-8	topramezon	GBM	1.1	E		kort	D
239110-15-7	fluopicolide	GBM	4.6	C		kort	B
243973-20-8	pinoxaden	GBM	3.6	D		midden	D
243982-82-3	2,2',4,5'-tetrabroomdifenyloether	BrdV	6.8	B		lang	D
374726-62-2	mandipropamide	GBM	3.6	C		lang	B
500008-45-7	Chloantraniliprole	nn	4	D		midden	D
658066-35-4	fluopyram	nn	4.8	D		lang	D
1172134-11-0	Spirotetramat cis-keto-hydroxy	nn	2.9	D		kort	D
54-11-5	nicotine	nn	1.2	E		kort	D
57-55-6	1,2-propyleenglycol	nn	-0.9	E		kort	D
59-48-3	2,3-dihydroindol-2-on	nn	1.2	E		kort	D
70-55-3	p-tolueensulfonamide	nn	0.8	E		kort	D
76-22-2	camfor	nn	2.4	D		kort	D
77-90-7	tributylacetylacryaat	nn	4.3	D		lang	D
77-93-0	triethylacryaat	nn	0.3	E		kort	D
80-39-7	N-ethyl-4-methylbenzeensulfonamide	nn	1.9	E		kort	D
85-41-6	ftalimide	nn	1.2	E		kort	D
85-44-9	ftaalzuuranhydride	nn	1.6	E		kort	D
88-18-6	2-tert-butylfenol	nn	3.3	B		kort	D
88-19-7	o-tolueensulfonamide	nn	0.8	E		kort	D
90-12-0	1-methylnaftaleen	nn	3.9	B		midden	D
91-22-5	quinoline	nn	2	D		kort	D
91-57-6	2-methylnaftaleen	nn	3.9	B		midden	D
91-63-4	2-methylquinoline	nn	2.6	D		kort	D
91-66-7	N,N-diethylaniline	nn	3.3	B		kort	D
93-04-9	2-methoxynaftaleen	nn	3.5	B		kort	D
95-16-9	benzothiazool	nn	2	D		kort	D
96-76-4	2,4-di-tertiar-butylfenol	nn	5.2	B		lang	D
98-53-3	4-tert-butylcyclohexanon	nn	2.9	D		kort	D
98-54-4	4-tertiair-butylfenol	nn	3.3	B		kort	D
100-86-7	2-methyl-1-fenyl-2-propanol	nn	2.4	D		kort	D
102-76-1	glyceroltriacetaat	nn	0.2	E		kort	D
103-23-1	bis(2-ethylhexyl)adipaat	nn	8.1	D		lang	D
103-33-3	azobenzeen	nn	3.8	D		midden	D
105-60-2	epsilon-caprolactam	nn	0.7	E		kort	D
106-44-5	p-cresol	nn	1.9	E		kort	D
107-21-1	glycol (monoethyleenglycol)	nn	-1.4	E		kort	D
111-46-6	diethyleenglycol	nn	-1.5	E		kort	D
112-27-6	triethyleenglycol	nn	-1.8	E		kort	D
116-29-0	tetradifon	nn	4.6	D		lang	D
119-33-5	2-nitro-p-cresol	nn	2.4	D		kort	D
119-61-9	benzofenon	nn	3.2	B		kort	D
121-33-5	vanilline	nn	1.2	E		kort	D
122-39-4	difenylamine	nn	3.5	B		midden	D
122-99-6	2-fenoxyethanol	nn	1.2	E		kort	D
124-17-4	2-(2-butoxyethoxy)ethylacetaat	nn	1.3	E		kort	D

Stofidentificatie en eigenschap				Siliconen			Ads
CASnummer	AquoNaam	Type	Log K _{ow}	Cat	Log K _{pw}	TWA	Cat
126-86-3	2,4,7,9-tetramethyl-5-decyn-4,7-diol	nn	3.6	D		midden	D
127-51-5	alfa-isomethylionon	nn	4.8	B		lang	D
128-37-0	butylhydroxytolueen (BHT)	nn	5.1	B		lang	D
128-39-2	2,6-di-tert-butylfenol	nn	4.9	B		lang	D
132-75-2	1-naftaleenacetonitril	nn	2.7	D		kort	D
143-22-6	2-(2-(2-butoxyethoxy)ethoxy)ethanol	nn	0	E		kort	D
150-86-7	fytol	nn	8.3	B		lang	D
256-96-2	5H-dibenz[b,f]azepine	nn	4.1	B		midden	D
260-94-6	acridine	nn	3.4	B		kort	D
464-48-2	(1S)-kamfer	nn	2.7	D		kort	D
499-75-2	5-isopropyl-2-methylfenol	nn	3.5	B		midden	D
504-63-2	trimethyleenglycol (1,3-propyleenglycol)	nn	-1	E		kort	D
532-12-7	myosmine	nn	1.1	E		kort	D
585-34-2	3-tertiair-butylfenol	nn	3.3	B		kort	D
599-64-4	4-cumylfenol	nn	4.1	B		midden	D
615-22-5	2-methylthiobenzothiazool	nn	3.2	D		kort	D
638-36-8	2,6,10,14-tetramethylhexadecaan	nn	9.9	B		lang	D
645-72-7	3,7,11,15-tetramethyl-1hexadecanol	nn	8.4	B		lang	D
696-23-1	2-methyl-5-nitroimidazool	nn	0.2	E		kort	D
719-22-2	2,6-di-tert-butyl-1,4-benzochinon	nn	4.4	D		lang	D
761-65-9	N,N-dibutylformamide	nn	2	D		kort	D
765-70-8	3-methyl-1,2-cyclopentaandion	nn	-0.5	E		kort	D
877-43-0	2,6-dimethylquinoline	nn	3.2	B		kort	D
934-34-9	2-hydroxybenzothiazol	nn	1.8	E		kort	D
1002-84-2	pentadecaanzuur	nn	6.5	D		lang	D
1009-61-6	1,4-diacetylbenzeen	nn	1.3	E		kort	D
1077-56-1	ethyl-2-methylbenzeensulfonamide	nn	1.9	E		kort	D
1124-53-4	N-cyclohexylacetamide	nn	1.6	E		kort	D
1125-21-9	4-oxoisofofon	nn	1.9	E		kort	D
1134-23-2	cycloaat	nn	3.9	D		midden	D
1198-37-4	2,4-dimethylquinoline	nn	3.2	B		kort	D
1469-48-3	tetrahydroftaalimide	nn	0.3	E		kort	D
1506-02-1	tonalide	nn	5.7	A	5.3	lang	C
1921-70-6	2,6,10,14-tetramethylpentadecaan	nn	9.4	B		lang	D
2387-23-7	1,3 dicyclohexylurea	nn	3.9	D		midden	D
2425-06-1	captafol	nn	3.8	C		midden	D
2445-83-2	7-methylcoumarin	nn	2.1	D		kort	D
2471-83-2	1-ethylideenindeen	nn	4.2	B		midden	D
2568-91-4	diisobutoxymethaan	nn	2.6	D		kort	D
3152-68-9	1-fenyl-1-penteen-3-on	nn	2.5	D		kort	D
3770-48-7	4-methylcarbazol	nn	3.8	B		midden	D
3796-70-1	trans-geranylaceton	nn	4.4	B		lang	D
4057-31-2	alfa-fenchylacetaat	nn	3.9	D		midden	D
4337-65-9	mono-(2-ethylhexyl)-hexaandioaat	nn	4.5	D		lang	D
4534-53-6	1-methyldodecylbenzeen	nn	8.8	B		lang	D
5466-77-3	2-ethylhexyl-4-methoxycinnamaat	nn	5.8	D		lang	D
7492-41-3	bornylformiaat	nn	3.3	D		kort	D
7803-58-9	sulfamides	nn	-1.8	E		kort	D
8018-01-7	mancozeb	nn	1.3	E		kort	D
10375-96-9	1,4-dimethyl-2,5-diisopropylbenzeen	nn	6	B		lang	D
13199-54-7	1,4-dimethoxy-2,3,5,6-tetramethylbenzeen	nn	4.3	D		lang	D
14214-32-5	difenoxuron	nn	2.5	D		kort	D
15356-74-8	5,6,7,7a-tetrahydro-4,4,7a-trimethyl-2-benzofuranon	nn	2.3	D		kort	D
16584-00-2	2-methyl-2-benzotriazool	nn	1.6	E		kort	D

Stofidentificatie en eigenschap				Siliconen			Ads
CASnummer	AquoNaam	Type	Log K _{ow}	Cat	Log K _{pw}	TWA	Cat
20189-42-8	3-ethyl-4-methylpyrrol-2,5-dion	nn	1.5	E		kort	D
20200-86-6	1,3,3-trimethyloxindol	nn	1.7	E		kort	D
21494-57-5	3-vinyl-4-methylpyrrol-2,5-dion	nn	1.3	E		kort	D
22248-79-9	cis-tetrachloorinfos (Z-isomeer)	nn	3.5	D		midden	D
22446-38-4	ethyl-(3-hydroxyfenyl)acetaat	nn	2.1	D		kort	D
23184-66-9	butachloor	nn	4.5	D		lang	D
23593-75-1	clotrimazol	nn	6.3	A	6	lang	B
24800-44-0	tripropyleenglycol	nn	-0.5	E		kort	D
24851-98-7	methyl-dihydrojasmonaat	nn	3	D		kort	D
25265-77-4	texanol	nn	3	D		kort	D
25395-31-7	glyceroldiacetaat	nn	-0.6	E		kort	D
27323-28-0	methylindool	nn	2.5	D		kort	D
36653-82-4	1-hexadecanol	nn	6.7	B		lang	D
39515-41-8	fenpropathrin	nn	5.7	D		lang	D
41195-90-8	2,3-dichloorfenylisocyanaat	nn	3.9	D		midden	D
41902-42-5	tri-tert-butylmethanol	nn	4.8	B		lang	D
50563-36-5	dimethachloor	nn	2.2	D		kort	D
54446-78-5	1-(2-butoxyethoxy)-ethanol	nn	0.2	E		kort	D
54549-72-3	4-(1-hydroxy-1-methylethyl)-acetofenon	nn	1.6	E		kort	D
57966-95-7	cymoxanil	nn	0.6	C	1.5*	midden	B
67306-00-7	fenpropidin	nn	6.4	B		lang	D
68002-20-0	hexa(methoxymethyl)melamine	nn		D		midden	D
76543-83-4	beta-heptachloorepoxide	nn		D		midden	D
99607-70-2	cloquintoceet-mexyl	nn	5	D		lang	D
100646-51-3	quizalofop-P-ethyl	nn	4.3	D		lang	D
117428-22-5	picoxystrobin	nn	3.7	D		midden	D
120923-37-7	amidosulfuron	nn	1.6	E		kort	D
125116-23-6	metconazool	nn	3.8	D		midden	D
128639-02-1	carfentrazon-ethyl	nn	3.4	D		kort	D
129630-19-9	pyraflufen-ethyl	nn	3.5	D		midden	D
131929-60-7	spinosynA	nn	3.3	C	2.9	kort	C
131929-63-0	spinosynD	nn		C	3.1	kort	C
144550-06-1	jodosulfuron-methyl	nn	3.2	D		kort	D
149979-41-9	tepraloxymid	nn	3.2	C		kort	D
193740-76-0	fluoxastrobin	nn	2	D		kort	D
208465-21-8	mesosulfuron-methyl	nn	0.8	E		kort	D
220899-03-6	metrafenon	nn	4.7	D		lang	D
422556-08-9	pyroxsulam	nn	1.9	E		kort	D

