

Classic DFS, 5 mm for 31-50 sheets
www.bindomatic.com



**Screeningsonderzoek naar organische microverontreinigingen
in Maaswater te Eijsden
1998 tot en met 2000
met behulp van gaschromatografie massaspectrometrie en
de RIZA GC/MS database**



december 2001

RIZA werkdocument nr. 2001.211x



Screeningsonderzoek naar organische microverontreinigingen
in Maaswater te Eijsden
1998 tot en met 2000
met behulp van gaschromatografie massaspectrometrie en
de RIZA GC/MS database

RIZA werkdocument nr. 2001.211x

December 2001

Karin de Beer
Joan Staeb
Philip Steketee
Wietske de Haan
Peter Adriaens
Nel Frijns

Voordat u als beheerder afhaakt in het af en toe technische verhaal met vele stofnamen het volgende: Hoewel er nog weinig normen zijn voor deze contaminanten in het oppervlaktewater zijn wij er van overtuigd dat deze problematiek aan de orde gesteld moet worden, dat er betrouwbaardere schattingen van de concentraties van deze stoffen moeten komen en mogelijk dat er normen opgesteld zouden moeten worden. Maar zo ver is het nog niet. Wij hopen dat u het rapport met plezier leest en ons steunt om dit probleem op de agenda te zetten en te houden

Rijkswaterstaat heeft behoefte aan informatie over verontreinigingen in het (waterige) milieu. Deze informatie wordt op verschillende manieren verkregen: Een bruikbare indeling is de volgende: (1) monitoring van specifieke verbindingen (voor lange termijn trendonderzoek) (2) alarmering door de meetstations (bij calamiteiten) en (3) in het kader van specifieke projecten.

Het voorliggende rapport gaat over een project waarbij gezocht is naar verbindingen die in veel andere studies niet worden onderzocht. De stoffen zijn ook wel bekend als "vergeten stoffen" en het onderzoek ernaar wordt vaak (GC/MS) screeningsonderzoek genoemd. Voor dit onderzoek is door het organisch analytisch laboratorium van het RIZA (IMLO) gewerkt aan een systematiek waarbij, in tegenstelling tot de gebruikelijke aanpak, **alle signaalverhogingen (pieken)** die met het meetsysteem worden aangetroffen in een computer worden opgeslagen. Naderhand werden al die honderdduizenden opgeslagen pieken nader bekeken. Dit rapport vormt het verslag daarvan.

In andere woorden geeft dit rapport een overzicht van apolaire en matig polaire organische microverontreinigingen die in het kader van het GC/MS (gas chromatografie massa/spectrometrie) screenings-programma in de periode januari 1998 - december 2000 zijn aangetroffen in de Maas bij Eijsden. De aanwezigheid en indien mogelijk de identiteit van de verbindingen is vastgesteld met behulp van een door de afdeling IMLO ontwikkelde procedure en een rapportage database.

De automatische detectie en verwerking van de pieken is voor het huidige rapport verbeterd ten opzichte van het rapport van vorig jaar. Mede vanwege die verbetering is in het voorliggende rapport de gehele periode waarover GC/MS analyseresultaten beschikbaar waren opnieuw onderzocht. Het rapport van vorig jaar (vd Velde en Staeb, 2000) kan daarmee als achterhaald beschouwd worden.

Screening van organische microverontreinigingen (ook wel "vergeten stoffen genoemd") is recent ook meer in de belangstelling komen te staan door het rapport "vergeten stoffen" dat is uitgebracht door het RIZA. Dit rapport en onderzoek sluit daarop aan en moet gezien worden als een aanvulling op "vergeten stoffen". "Vergeten stoffen" concentreerde zich op een beperkt aantal monsters en omvatte tevens een toxicologische inschatting. Het voorliggende rapport omvat een veel groter aantal monsters en een semi-

geautomatiseerde gegevensverwerking en een expertsysteem. Voor het komend jaar wil het RIZA de beide filosofieën combineren om zo de krachten te bundelen.

De database heeft over de onderzoeksperiode 22365 keer een organische verbinding gerapporteerd. Dit waren 174 verschillende stoffen. De 10 belangrijkste (qua aantal keer voorkomen) waren TAED, 2-methyl-Quinoline, atrazine, desethylatrazine, HHCB (Galaxolide), cafeïne, N-butylsulfonamide, Acridine, Benzophenon en Surfino 104.

Screening naar stoffen die niet in een of andere standaard zitten zoals de database doet is uitermate waardevol voor het vaststellen van verontreinigingen waar niet direct aan gedacht wordt of waar geen of weinig monitoring voor bestaat. Het analytisch screeningswerk en de verwerking m.b.v. de database voorziet hier in een belangrijke witte vlek in de waterkwaliteitsevaluatie.

Het afgelopen jaar is ook de RIZA GCMS database verder ontwikkeld. Op dit moment (dec 2001) omvat de lijst van de in het expertsysteem bekende verbindingen een aantal van 2512 verbindingen terwijl dat aantal ten tijde van het uitvoeren van de zoekacties voor het huidige rapport op 912 lag.

Omdat de automatische toekenning geen sinecure is zijn er voor volgend jaar verbeterplannen opgesteld om de betrouwbare toekenning verder te verbeteren. Hierin wordt samengewerkt met het RIKZ en verscheidene nationale en internationale instituten.

Ook al is het een complexe lijst van allerlei verschillende organische verbindingen, is het RIZA van mening dat "vergeten stoffen" eigenlijk nooit meer vergeten mogen worden.

	Samenvatting	3
1	Inleiding	6
1.1	Vraagstelling	6
2	Werkwijze	8
2.1	Beschrijving van het analysesysteem	8
2.2	Beginsel van de analysemethode	8
2.3	De database voor organische analyseresultaten	10
2.3.1	Ontwerp	10
2.3.2	Identificatie / indicatie van verbindingen	10
2.3.3	Invoer analyseresultaten meetstation Eijsden	11
3	Resultaten	12
3.1.1	Inleiding	12
3.1.2	Periode januari 1998 - december 2000	12
3.1.3	Periode januari 2000 - december 2000	14
3.1.4	Vergelijking 2000 met hele periode (1998-2000)	15
3.1.5	Verloop van piekoppervlaktes in de loop van het jaar	16
3.1.6	Vergeten stoffen	17
3.2	Ontwikkelingen aan de RIZA GC/MS database	18
4	Conclusies	21
5	Aanbevelingen	22
6	Literatuur	23
7	Bijlagen	24

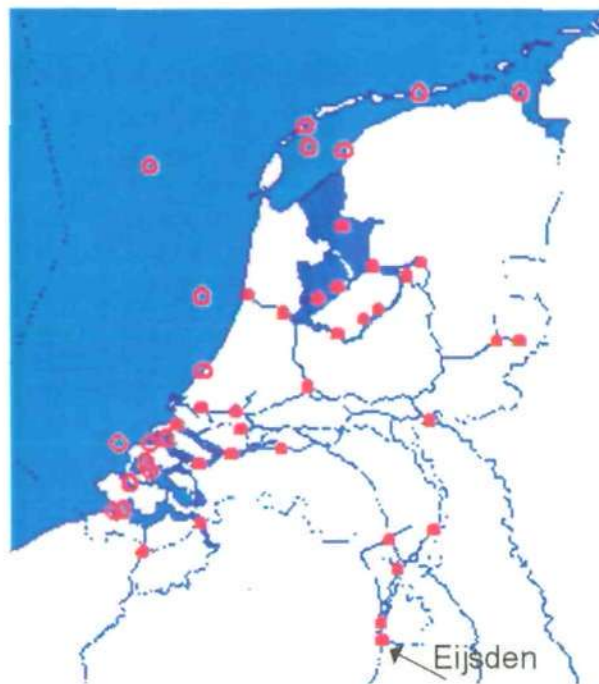
1 Inleiding

1.1 Vraagstelling

Dit rapport geeft een overzicht van de organische microverontreinigingen die in de periode januari 1998 – december 2000 met GC/MS in de Maas bij Eijsden zijn aangetroffen. In onderstaande figuur is de locatie Eijsden weergegeven.

Figuur 1

Kaart van Nederland met enkele belangrijke monsterlocaties van Rijkswaterstaat. De monster-locatie Eijsden is met een pijl aangegeven.



Dit rapport is een vervolg op het in juli 2000 verschenen rapport *Organische microverontreinigingen in de Maas bij Eijsden* (van der Velde en Staeb, 2000). Eerdere rapporten zijn het rapport met uitgebreidere informatie over de opzet van de database *Een database voor organische analyseresultaten* (de Rijke, 1998) en het rapport met de resultaten uit 1998, *Evaluatie van GC/MS-metingen op het meetstation Eijsden in de periode april-november 1998* (de Rijke en Epema, 1999). Verder zijn belangrijk voor achtergrond informatie: van Kuijck en Staeb (2000), Freriks (1996) en Epema en Freriks (1997).

Onlangs is ook het rapport *'Vergeten' stoffen in Nederlands oppervlaktewater* (Barreveld et al. 2001) verschenen. In het rapport wordt onderzoek beschreven dat is uitgevoerd om aanwezigheid en milieurelevantie van 'vergeten' stoffen in oppervlaktewater te bestuderen. Het onderzoek is gebaseerd op een nadere analyse van monsters uit Lobith en Maassluis. De resultaten uit het onderzoek naar de 'vergeten' stoffen en de andere genoemde rapporten worden in het voorliggende rapport gebruikt bij de nadere analyse van de waterkwaliteitsgegevens van de locatie Eijsden.

De monsters die in dit onderzoek worden gebruikt zijn genomen en geanalyseerd door de medewerkers van meetstation Eijsden (IMM). De

ontwikkeling en verwerking van de gevonden pieken met de 'RIZA-macro' en de 'RIZA-database' is gedaan door de afdelingen IML en IMI van het RIZA in Lelystad.

Om dit rapport goed te kunnen lezen worden eerst een aantal begrippen ingevoerd: Voor dit rapport zijn de aangetroffen verbindingen ingedeeld in 3 categorieën:

1-Verbindingen in de standaard

De standaard van het analysesysteem te Eysden omvat een aantal verbindingen, die zijn geselecteerd op basis van hun voorkomen in de Maas en Rijn in de afgelopen 10 jaar. De concentraties van deze verbindingen in monsters worden berekend aan de hand van vergelijking met bekende concentratie in de standaard. Deze verbindingen krijgen kwaliteitscode "0" (dit is een maat voor de betrouwbaarheid van de identificatie en de concentratie)

2-Toegekende verbindingen

Dit zijn verbindingen die door de database zijn toegekend (Deze verbindingen krijgen kwaliteitscode "DB"). De naamstoekenning vindt plaats op grond van de overeenkomst in massaspectrum en Kovats Index. De concentraties kunnen berekend worden met behulp van een relatieve responsfactor ten opzicht van een interne standaard. Toegekende concentraties zijn slechts indicatief en hebben een spreiding van ca. 100%.

3-De resterende verbindingen

Deze verbindingen zijn nog niet toegekend. Ze hebben op dit moment nog de naam "onbekende verbinding". Het feit dat een verbinding als onbekend staat geregistreerd kan twee redenen hebben: a) Het is een verbinding die wel al bekend is bij IML, maar die door kleine afwijkingen in de analyseapparatuur of door coëlutie met een andere verbinding niet automatisch kan worden toegekend. b) Het is echt een onbekende verbinding die ook door IML nog niet eerder is herkend en benoemd.

In dit rapport wordt alleen aandacht geschonken aan de verbindingen uit categorie 1 en 2. Er is zowel een analyse uitgevoerd van de gegevens uit de gehele periode (januari 1998-december 2000) als een analyse van alleen de gegevens van 2000.

2 Werkwijze

2.1 Beschrijving van het analysesysteem

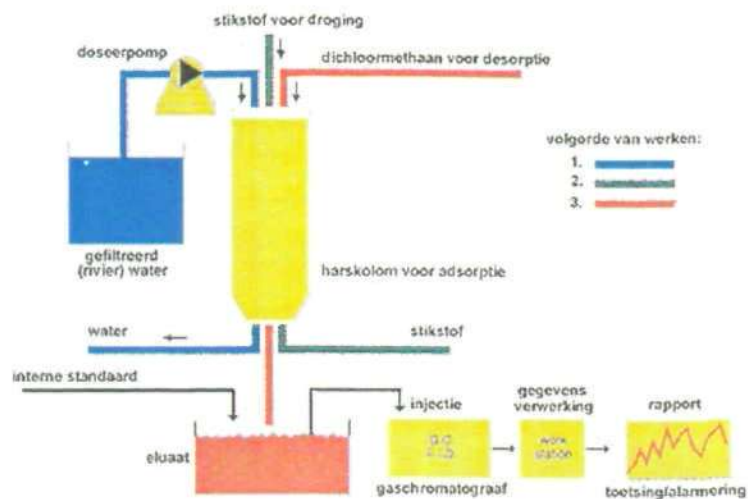
Met de ontwikkelde analysemethode (Sijpersma, 1998) wordt op het meetstation Eijsden de concentratie van de verbindingen die aanwezig zijn in de standaard in oppervlakte-water bepaald. Een lijst van deze componenten is weergegeven in bijlage 1. Het analysesysteem is een gas-chromatografie / massa-spectrometrie opstelling, meestal afgekort tot GC/MS. De analysemethode is van toepassing op de analyse van matig polaire tot apolaire stoffen in water en wordt zowel toegepast bij het onderzoek naar het voorkomen van verhoogde gehalten van bekende verbindingen (alarmering) als voor de screening van niet-bekende verbindingen (met behulp van een database met kovats-indices en massaspectra).

Uit het oogpunt van de bewakingsfunctie moeten alle componenten uit de standaard te detecteren zijn op een alarmeringsconcentratie van 1 µg/l. Voor onbekende verbindingen wordt een alarmeringsconcentratie van 3 µg/l gehanteerd. Parallel aan de bewaking en eventuele alarmering door het meetstation worden de gegevens van alle gedetecteerde verbindingen (pieken in het chromatogram) in de database voor organische analyseresultaten opgeslagen (kortweg RIZA-GC/MS database), en in een later stadium uitgewerkt.

2.2 Beginsel van de analysemethode

Gedurende 24 uur wordt ongeveer 3 liter gefiltreerd oppervlaktewater over een XAD-4 harskolom geleid. De beladen kolom wordt gedroogd met stikstofgas en gedesorbeerd (geëluueerd) met dichloormethaan. Aan het eluaat wordt een interne standaardoplossing toegevoegd, waarna analyse plaatsvindt met gaschromatografie met massaspectrometrie (MS) en vlamionisatie (FID) als detectie. De kwantificering vindt plaats op basis van de responsfactoren t.o.v. een interne standaard. Voor de 43 stoffen in de standaard zijn de responsfactoren bekend. Voor de resterende verbindingen wordt een responsfactor 1 gehanteerd. De toegekende concentratie voor onbekende verbindingen is hierdoor slechts indicatief. In figuur 2 is het principe schematisch weergegeven.

Figuur 2
Schematische weergave van de analysemethode.



2.3 Rol van meetstation Eijsden en de rol van de RIZA-GC/MS database

Bij de identificatie van de geanalyseerde verbindingen met de massaspectrometer worden de specifieke GC/MS criteria gehanteerd. Identificatie betekent in deze termen dat een verbinding alleen als **geïdentificeerd** wordt beschouwd als aan een aantal strenge criteria wordt voldaan. Deze strenge criteria worden toegepast om het risico op zogenaamd vals-positieve resultaten zo klein mogelijk te maken. Een eigenschap van deze werkwijze is dat in twijfelgevallen de verbinding niet gerapporteerd wordt terwijl hij mogelijk toch wel aanwezig is (dit zal met name optreden als het om lage concentraties gaat).

Het meetstation Eijsden werkt volgens de EPA (environmental protection agency) criteria om het gevaar op een vals alarm te beperken. De alarmeringsfunctie van Eijsden is vooral belangrijk bij wat hogere concentraties, in die gevallen kan doorgaans gemakkelijk aan de strenge criteria worden voldaan.

De EPA criteria zijn:

1. Er moeten minimaal 5 ionen van de component in het massaspectrum aanwezig zijn,
2. De afwijking in de ratio's van de ionen in een monster t.o.v. een standaard bedraagt maximaal 50%,
3. Het venster van de retentietijd waarbinnen de chromatografische piek van een verbinding in een monster t.o.v. een standaard mag liggen bedraagt maximaal 15 seconden.

De RIZA-GC/MS database vervult een aanvullende rol op de primaire bewakingsfunctie van het meetstation Eijsden. In de database worden alle verbindingen die door het GC/MS meetsysteem te Eijsden worden gedetecteerd opgeslagen. Bij een periodieke evaluatie, of bij specifieke vragen kan onderzocht worden wat er naast de eventuele alarmering nog meer is aangetroffen. Hierbij worden zowel bekende als niet bekende verbindingen geregistreerd.

2.3 De database voor organische analyseresultaten

2.3.1 Ontwerp

De database is een relationele database opgebouwd uit een aantal tabellen. De belangrijkste tabellen zijn de tabellen met alle gedetecteerde pieken. Op dit moment staan er meer dan een miljoen pieken met spectra in de MS tabel met Massaspectrometrie resultaten. Verder zijn er tabellen met bekende (al of niet door het RIZA geïdentificeerde) verbindingen (912 bekende verbindingen) met hun bijbehorend spectrum en Kovats index. Een uitgebreid overzicht van de opzet en het ontwerp van de database is terug te vinden in de voortgangsrapportage ontwikkeling IMLO database (Epema en Freriks, 1997). Ontwikkelingen van het afgelopen jaar staan vermeld in hoofdstuk 3.2 van dit rapport.

2.3.2 Identificatie / indicatie van verbindingen

Voor het identificeren of indiceren van onbekende verbindingen uit de database wordt het spectrum van een onbekende vergeleken met spectra van stoffen uit de bibliotheek. Hierbij wordt gekeken naar de overeenkomst tussen 3 specifieke (meestal de hoogste) massapieken en het patroon van de bijbehorende intensiteiten. Het is echter bekend dat er zoveel verbindingen in het milieu voorkomen dat identificatie alleen op basis van het massaspectrum onvoldoende zekerheid biedt. Als aanvulling hierop wordt in de database gebruik gemaakt van de Kovats retentie index om meer zekerheid te verkrijgen. Deze aanpak ligt in lijn met de identificatie en indicatie criteria die recent door de NEN zijn opgesteld (Binnenkort worden de criteria door het NEN als een voornorm (VPR) gepubliceerd (zie Tabel 2))

Tabel 1

Overzicht van door de NEN geformuleerde criteria voor de identificatie van stoffen op basis van het massaspectrum.

Criterium	EPA identificatie	NEN identificatie	NEN indicatie	Voor huidig rapport
Aantal massa's	5	3	3 (boven beslisgrens)	3
Intensiteit venster	0.5 * Intensiteit	0.1 * Intensiteit + 10%	Moet aanwezig zijn	20%
Kovats venster	15 sec	0,2%	1,0%	1,0%

Tabel 2

Leidraad voor de keuze van diagnostische ionen

- * bij voorkeur het molecuulion opnemen (dit is er niet altijd)
 - * de m/z-waarden (=massagetallen) zijn zo hoog mogelijk
 - * de intensiteit is bij voorkeur groter dan 15 % van de meest intensieve piek (=base-piek) in het massaspectrum
 - * bij isotoopclusters niet meer dan twee diagnostische ionen uit dezelfde cluster.
- .. en nog een aantal bijkomende factoren

Het uitgangspunt is om vrij strenge criteria te hanteren voor het "zeker toekennen" oftewel **identificatie** van een verbinding. De reden is dat de zogenaamde "vals-positieven" zoveel mogelijk voorkomen moeten worden (vals positief is het als een laboratorium meldt dat stof X is aangetroffen terwijl dat feitelijk onjuist is). Een bijkomend effect van strenge criteria is echter dat in twijfelgevallen altijd gezegd moet worden dat stof X NIET aanwezig is. Om in

die gevallen toch een uitspraak te kunnen doen - met een geaccepteerde *grotere kans op een vals positieve uitspraak* - is in de NEN richtlijn de toekenning **indicatie** geïntroduceerd voor deze twijfelgevallen. De RIZA GC/MS database is zo flexibel opgezet dat deze en andere identificatie of indicatie criteria zonder meer toegepast kunnen worden. De criteria die voor de huidige rapportage zijn gehanteerd voor de indicatie van de verbindingen uit de database staan in de laatste kolom van tabel 1 vermeld.

De criteria die in het voorliggende rapport gebruikt zijn, zijn dus minder streng dan de voorgestelde identificatie criteria. Dat is bewust gedaan omdat dit een inventariserend onderzoek betreft en de vraag is dus of er aanwijzingen zijn voor de aanwezigheid van stoffen oftewel indicatie. Op het moment dat de zoekacties voor dit rapport werden uitgevoerd was de discussie nog minder ver dan hij momenteel is, daarom zijn de hier gebruikte criteria nog weer net iets anders dan nu door het NEN wordt voorgesteld. De discussie over de te hanteren criteria is echter vrij complex en het voert voor dit rapport te ver om hier uitvoeriger op in te gaan. Meer informatie is te verkrijgen bij het NEN (www.nen.nl).

2.3.3 Invoer analyseresultaten meetstation Eijsden

Direct nadat op het meetstation te Eijsden een watermonster is geanalyseerd en er dus een chromatogram is verkregen wordt er op het meetstation onderzocht of alarmeringswaarden worden overschreden. Periodiek worden de ruwe GC/MS databestanden doorgestuurd naar het RIZA in Lelystad. Met behulp van een *MS-chemstation® macro* worden alle pieken *geïntegreerd* en met het bijbehorende spectrum in de RIZA-GC/MS database opgenomen waar het in de database wordt opgenomen. Later wordt de toekenning van de pieken uitgevoerd. De resultaten en interpretatie van deze toekenningen staan beschreven in dit rapport.

3 Resultaten

3.1.1 Inleiding

De RIZA-GC/MS database bevat gegevens van 1219 monsters die in de periode januari 1998 – december 2000 in Eysden genomen zijn. Hiervan zijn 237 monsters zogenaamde 'blanco' monsters, monsters van schoon water die het hele analysetraject doorlopen ter controle van de analysemethode. Van de 1219 monsters zijn er 429 monsters uit de periode januari 2000 – december 2000, waarvan 60 blanco monsters.

Verbindingen die aangetroffen worden in blanco monsters zijn 'verontreinigingen' uit het analysetraject. In dit rapport is voor het voorkomen van stoffen in blanco's een criterium aangehouden. Als een stof niet alleen in de maaswater monsters maar ook in meer dan 10% van de blanco's wordt aangetroffen, kan van deze stof niet meer met voldoende zekerheid worden gezegd dat deze ook daadwerkelijk in het maaswater aanwezig is, of dat de stof een contaminatie van de analytische procedure is. Deze stoffen worden dan verder niet meegenomen in de lijst van vaak aangetroffen verbindingen. Verder zijn er ook een aantal verbindingen die wel worden aangetroffen in de monsters, maar slechts voorkomen in minder dan 1% van de monsters. Ook deze verbindingen worden in onderstaande paragrafen buiten beschouwing gelaten.

3.1.2 Periode januari 1998 - december 2000

Bij het doorzoeken van de database met de in 2.3.2 genoemde instellingen worden 173 stoffen in één of meerdere monsters aangetroffen (zie bijlage 4). Echter een aantal van deze verbindingen worden te vaak ook aangetroffen in de blanco (in meer dan 10% van de blanco monsters), en zijn verder buiten beschouwing gelaten. Als ook de verbindingen die in minder dan 1% van de monsters voorkomen buiten beschouwing gelaten worden blijft er een lijst over met 61 stoffen. Van de top 16 van deze lijst zijn de spectra en de toekenning door de RIZA-database handmatig gecontroleerd. Handmatig zijn de massaspectra steekproefsgewijs doorgelopen en vergeleken met het uit de bibliotheek bekende spectrum van de betreffende stof en interpretatie door enkele experts. Van vier van de gecontroleerde stoffen is geconstateerd dat de toekenning niet zeker is. Deze stoffen zijn verwijderd uit de lijst met meest aangetroffen stoffen. Bij onderstaande tabel moet dus opgemerkt worden dat de eerste twaalf stoffen met een grotere zekerheid ook echt in het Maaswater worden aangetroffen dan het onderste deel van de tabel.

Tabel 3

Verbindingen aangetroffen in Eijsden in de periode januari 1998 - december 2000, gesorteerd op aantal maal aangetroffen. De eerste 12 stoffen uit de tabel (grijs gemarkeerd) hebben een grotere zekerheid omdat de toekenning handmatig is gecontroleerd.

Rang	CAS	Stofnaam	Aantal
1	10543-57-4	TAED	925
2	91-63-4	Quinoline, 2-methyl-	915
3	1912-24-9	Atrazine	771
4	6190-65-4	Desethylatrazine	629
5	58-08-2	Caffeine	546
6	3622-84-2	Benzenesulfonamide, N-butyl-	544
7	260-94-6	Acridine	431

Rang	CAS	Stofnaam	Aantal
8	119-61-9	Benzophenone	387
9	126-86-3	Surfynol 104	364
10	25265-77-4	2,2,4-Trimethyl-1,3-pentanediol monoisobutyrate	315
11	108-75-8	Pyridine, 2,4,6-trimethyl-	308
12	34590-94-8	Dipropyleenglycol monomethylether	306
13	6781-42-6	Ethanone, 1,1'-(1,3-phenylene)bis-	243
14	620-14-4	m-Ethyltolueen	211
15	122-34-9	Simazine	210
16	5131-66-8	2-Propanol, 1-butoxy-	210
17	115-96-8	Tri(2-chloroethyl) phosphate	193
18	1125-21-9	2,6,6-Trimethyl-2-cyclohexene-1,4-dione	188
19	591-22-0	3,5-lutidine	187
20	134-62-3	Diethyltoluamide	173
21	70-55-3	Benzenesulfonamide, 4-methyl-	146
22	78-40-0	Triethyl phosphate	145
23	104-76-7	1-Hexanol, 2-ethyl-	141
24	123-32-0	Pyrazine, 2,5-dimethyl-	129
25	108-48-5	2,6-lutidine	128
26	108-10-1	Methyl Isobutyl Ketone	121
27	14667-55-1	Pyrazine, trimethyl-	101
28	111-96-6	Ethane, 1,1'-oxybis[2-methoxy-	86
29	108-67-8	Benzene, 1,3,5-trimethyl-	82
30	95-53-4	o-Toluidine	79
31	105-05-5	Benzene, 1,4-diethyl-	78
32	114-26-1	Phenol, 2-(1-methylethoxy)-methylcarbamate	67
33	770-35-4	1-phenoxy-2-propanol	54
34	78-67-1	Propanenitrile, 2,2'-azobis[2-methyl-	48
35	78-70-6	(+/-)-Linalool	47
36	5915-41-3	Terbuthylazine	46
37	108-65-6	Propyleenglycol methylether acetate	43
38	95-63-6	Benzene, 1,2,4-trimethyl-	41
39	140-66-9	Phenol, 4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)-	41
40	103-83-3	Benzenemethanamine, N,N-dimethyl-	37
41	541-02-6	Cyclopentasiloxane, decamethyl-	37
42	62-53-3	Aniline	35
43	95-47-6	Benzene, 1,2-dimethyl-	34
44	78-59-1	Isoforon	32
45	120-12-7	Anthracene	26
46	499-75-2	Phenol, 2-methyl-5-(1-methylethyl)-	25
47	143-24-8	Tetraethyleenglycol dimethylether	25
48	126-73-8	Phosphoric acid tributyl ester	24
49	121-00-6	3-tert-Butyl-4-hydroxyanisole	19
50	103-65-1	Benzene, propyl-	19
51	78-51-3	Ethanol, 2-butoxy-, phosphate (3:1)	17
52	1127-76-0	Naphthalene, 1-ethyl-	16
53	761-65-9	Formamide, N,N-dibutyl-	15
54	107-49-3	Diphosphoric acid, tetraethyl ester	13
55	112-34-5	Ethanol, 2-(2-butoxyethoxy)-	13
56	108-94-1	Cyclohexanone	12
57	131-11-3	Dimethyl phthalate	12

De 4 stoffen die oorspronkelijk ook in de top 16 voorkwamen staan vermeld in Tabel 4. Voor de laatste stof (L-(-)-Menthol) geldt dat hij zeker niet aanwezig is, voor de overige stoffen geldt dat hun spectrum onvoldoende eenduidig is en /of de concentratie te laag om met redelijke zekerheid van aanwezigheid te kunnen spreken.

Tabel 4

Verbindingen die zijn verwijderd uit de oorspronkelijke toekenning om dat bij nadere controle door experts de toekenning in twijfel werd getrokken

CAS	Stofnaam	Aantal	Reden
80-05-7	Bisphenol-A	625	Concentraties te laag, niet eenduidig spectrum
18479-58-8	Dihydromyrcenol	479	Weinig specifiek spectrum toekenning twijfelachtig
100-47-0	Benzonitril	409	Concentraties te laag, niet eenduidig spectrum
2216-51-5 /89-78-2	L-(-)-Menthol	332	Afwezig, bij gebruik van meer dan 3 massapieken blijkt dat het meestal niet overeenstemt

3.1.3 Periode januari 2000 - december 2000

Bij het doorzoeken van de database met de in 2.3.2 genoemde instellingen worden 125 stoffen in de periode januari 2000 – december 2000 in één of meerdere monsters aangetroffen (zie bijlage 5). Echter een aantal van deze verbindingen worden te vaak ook aangetroffen in de blanco (in meer dan 10% van de blanco monsters), en zijn verder buiten beschouwing gelaten. Als ook de verbindingen die in minder dan 1% van de monsters voorkomen buiten beschouwing gelaten worden blijft er een lijst over met 64 stoffen. Van 16 stoffen van deze lijst (zie boven) is de toekenning handmatig gecontroleerd waarbij bij 4 verbindingen de toekenning in twijfel werd getrokken (zie Tabel 4). Er resteert dus een lijst van 60 stoffen.

Tabel 5

Verbindingen aangetroffen in Eijsden in de periode januari 2000 - december 2000, gesorteerd op aantal maal aangetroffen. De grijs gemarkeerde stoffen hebben een grotere zekerheid omdat de toekenning handmatig is gecontroleerd.

Rang	CAS	Stofnaam	Aantal
1	10543-57-4	TAED	317
2	84-66-2	phthalic acid, diethyl ester (diethyl ftalaat)	292
3	111-02-4	Squalene	282
4	91-57-6	Naphthalene, 2-methyl-	255
5	1912-24-9	Atrazine	246
6	106-42-3/108-38-3	p/m-Xylene	241
7	58-08-2	Caffeine	238
8	6190-65-4	Desethylatrazine	238
9	98-86-2	Acetophenone	215
10	4748-78-1/15764-16-6	4-Ethylbenzaldehyde/2,4-Dimethylbenzaldehyde	211
11	91-63-4	Quinoline, 2-methyl-	184
12	3622-84-2	Benzenesulfonamide, N-butyl-	143
13	126-86-3	Surfynol 104	112
14	260-94-6	Acridine	106
15	119-61-9	Benzophenone	87
16	108-75-8	Pyridine, 2,4,6-trimethyl-	86
17	6781-42-6	Ethanone, 1,1'-(1,3-phenylene)bis-	79
18	105-05-5	Benzene, 1,4-diethyl-	76
19	78-40-0	Triethyl phosphate	74

20	115-96-8	Tri(2-chloroethyl) phosphate	73
21	108-10-1	Methyl Isobutyl Ketone	61
22	122-34-9	Simazine	60
23	591-22-0	3,5-lutidine	57
24	5131-66-8	2-Propanol, 1-butoxy-	56
25	34590-94-8	Dipropyleenglycol monomethylether	53
26	134-62-3	Diethyltoluamide	50
27	620-14-4	m-Ethyltolueen	47
28	25265-77-4	2,2,4-Trimethyl-1,3-pentanediol monoisobutyrate	45
29	1125-21-9	2,6,6-Trimethyl-2-cyclohexene-1,4-dione	45
30	104-76-7	1-Hexanol, 2-ethyl-	42
31	108-48-5	2,6-lutidine	40
32	111-96-6	Ethane, 1,1'-oxybis[2-methoxy-	39
33	70-55-3	Benzenesulfonamide, 4-methyl-	32
34	111-44-4	s-Dichloroethyl ether	25
35	62-53-3	Aniline	23
36	78-67-1	Propanenitrile, 2,2'-azobis[2-methyl-	19
37	108-65-6	Propyleenglycol methylether acetate	19
38	108-67-8	Benzene, 1,3,5-trimethyl-	16
39	126-73-8	Phosphoric acid tributyl ester	16
40	770-35-4	1-phenoxy-2-propanol	12
41	333-41-5	Diazinon (Dimpylate)	12
42	1127-76-0	Naphthalene, 1-ethyl-	12
43	88-17-5	Benzenamine, 2-(trifluoromethyl)-	10
44	114-26-1	Phenol, 2-(1-methylethoxy)-, methylcarbamate	10
45	79-34-5	Ethane, 1,1,2,2-tetrachloro-	9
46	95-53-4	o-Toluidine	9
47	103-65-1	Benzene, propyl-	8
48	95-47-6	Benzene, 1,2-dimethyl-	7
49	107-49-3	Diphosphoric acid, tetraethyl ester	7
50	140-66-9	Phenol, 4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)-	7
51	103-83-3	Benzenemethanamine, N,N-dimethyl-	6
52	78-51-3	Ethanol, 2-butoxy-, phosphate (3:1)	6
53	120-83-2	Phenol, 2,4-dichloro-	6
54	123-32-0	Pyrazine, 2,5-dimethyl-	6
55	78-70-6	(+/-)-Linalool	5
56	121-00-6	3-tert-Butyl-4-hydroxyanisole	5
57	78-59-1	Isoforon	5
58	14667-55-1	Pyrazine, trimethyl-	5
59	583-58-4	Pyridine, 3,4-dimethyl-	5
60	79-01-6	Trichloroethylene	4

3.1.4 Vergelijking 2000 met hele periode (1998-2000)

Het ligt voor de hand om een vergelijk te maken van de stoffen die in het jaar 2000 aangetroffen zijn (Tabel 5) ten opzichte van de stoffen die over de gehele periode van 3 jaar zijn aangetroffen (Tabel 3). Het nazoeken van de oorzaken van deze verschillen blijkt echter veel werk te zijn en kan niet meer uitgevoerd worden in het kader van dit project. Mogelijke oorzaken kunnen zowel een gewijzigde aanwezigheid in het water zijn als kleine variaties in de

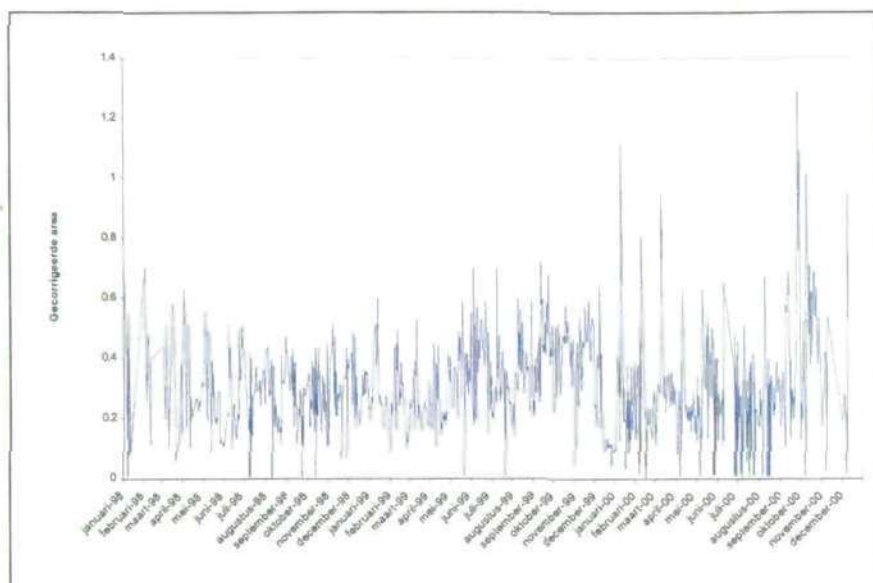
analysemethode waardoor stoffen net in of juist net buiten het zoekvenster vallen.

3.1.5 Verloop van piekoppervlaktes in de loop van het jaar

Van de top drie van de meest aangetroffen stoffen in de periode 1998-2000 wordt het verloop in de tijd in onderstaande figuren aangegeven. Van de stoffen TAED, 2-methyl-quinoline zijn geen concentraties bekend omdat niet bekend is wat de responsfactor van deze twee stoffen is. Wel zijn de piekoppervlaktes (area's) bekend. Van Atrazine zijn uiteraard wel concentraties bekend, maar voor de vergelijkbaarheid is deze stof op dezelfde manier geplott als de overige twee. Door een grafiek te maken van de voorkomende stoffen kan zichtbaar gemaakt worden of het een wel of niet seizoensgebonden stof betreft.

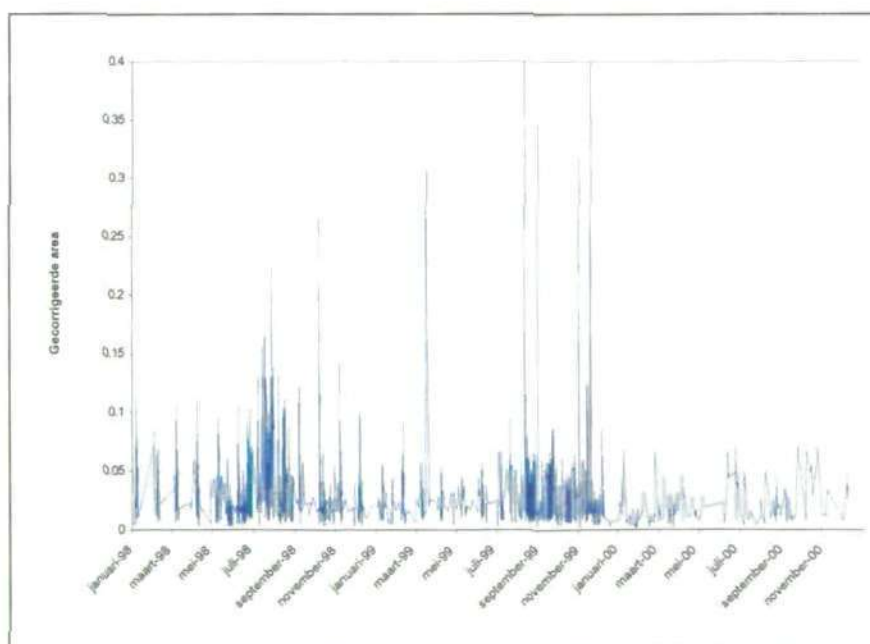
Figuur 3

Het verloop van de gecorrigeerde area van TAED (area TAED/area interne standaard). Een duidelijk patroon is er niet. TAED wordt gedurende de gehele periode in een vrij constant gehalte met een vrij constante frequentie aangetroffen in het maaswater bij Eijsden.



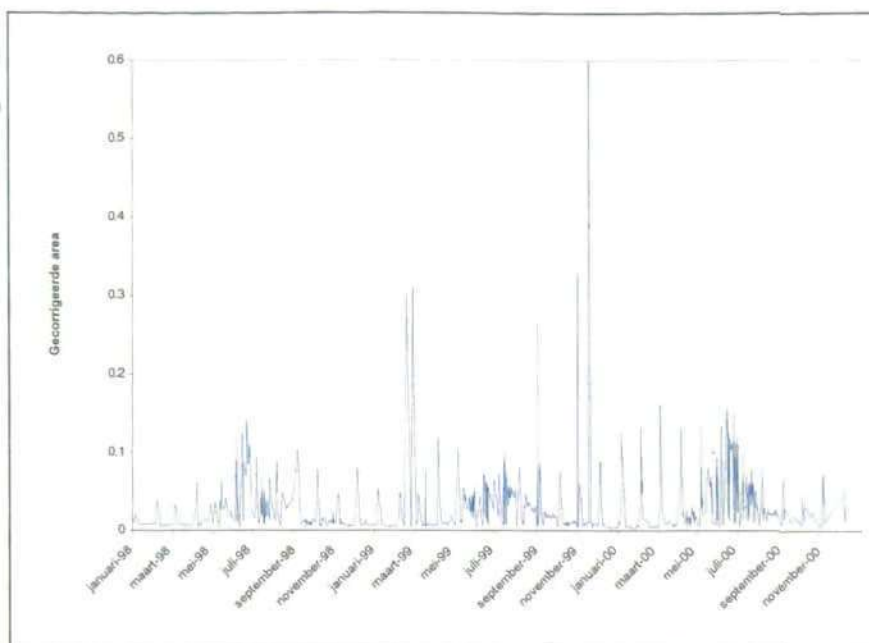
Figuur 4

Voor 2-methyl-quinoline geldt dat er twee periodes lijken te zijn waarin de stof vaker wordt aangetroffen. Tussen mei 1998 en september 1998 en in de periode van augustus 1999 tot december 1999. Hiervoor is niet direct een verklaring te geven.



Figuur 5

In het verloop van de gecorrigeerde areas van atrazine is duidelijk een seizoensfluctuatie te zien. Hogere gehalten worden aangetroffen in de periodes mei-augustus van alle jaren. Aangezien atrazine een bestrijdingsmiddel is dat vooral wordt gebruikt in het groeiseizoen is dit in overeenstemming met de verwachting.



3.1.6 Vergeten stoffen

Bij het doorzoeken van de RIZA-database is gebruik gemaakt van een lijst van 912 "bekende" stoffen (zie bijlage 6). Van deze stoffen is het massaspectrum en de Kovats-index opgenomen in de database. Echter er zijn nog veel meer stoffen die mogelijk in het Maaswater voorkomen. Om te kunnen vaststellen of deze stoffen inderdaad in het water voorkomen dienen de gegevens van deze stoffen, het massaspectrum en de Kovats-index, opgenomen te worden in de RIZA-database. Door het RIZA wordt continue aan verbetering gewerkt en de lijst met bekende stoffen wordt dan ook steeds langer. Er zijn echter ook veel stoffen waarvan de benodigde gegevens niet bekend of niet beschikbaar zijn. Het zal dan ook vrijwel onmogelijk zijn om alle in het water voorkomende organische microverontreinigingen te identificeren. Wellicht zijn er veel voorkomende stoffen waarvan geen gegevens beschikbaar zijn en die dus nu nog 'gemist' worden.

Uit het "vergeten stoffen" onderzoek (Barreveld et al., 2000) zijn een aantal stoffen naar voren gekomen die in dit onderzoek niet als vaak voorkomend naar voren zijn gekomen. Voor deze stoffen werden nog een aantal specifieke zoekacties op de RIZA-database uitgevoerd (met een iets breder Kovats venster van 2%).

HHCB (Galaxolide):

Kovats-window (%)	Aantal malen toegekend door RIZA-database 98 t/m 2000
2	866 (1 in blanco)

Deze belangrijke "vergeten stof" ontbrak dus nog in de database, op basis van zijn voorkomen hoort hij op de derde rang positie voor het aantal keren dat hij is aangetroffen.

bis(2-ethylhexyl) phthalate:

Kovats-window (%)	Aantal malen toegekend door RIZA-database 98 t/m 2000
2	1300 (920 in blanco)

Deze stof wordt te vaak aangetroffen in de blanco, namelijk in 80% van de blanco monsters, waardoor aantreffen van deze stof in het monster niet met zekerheid kan worden toegeschreven aan het daadwerkelijk aanwezig zijn van deze stof in het Maaswater.

Dibutyl phthalate:

Kovats-window (%)	Aantal malen toegekend door RIZA-database 98 t/m 2000
2	1146 (800 in blanco)

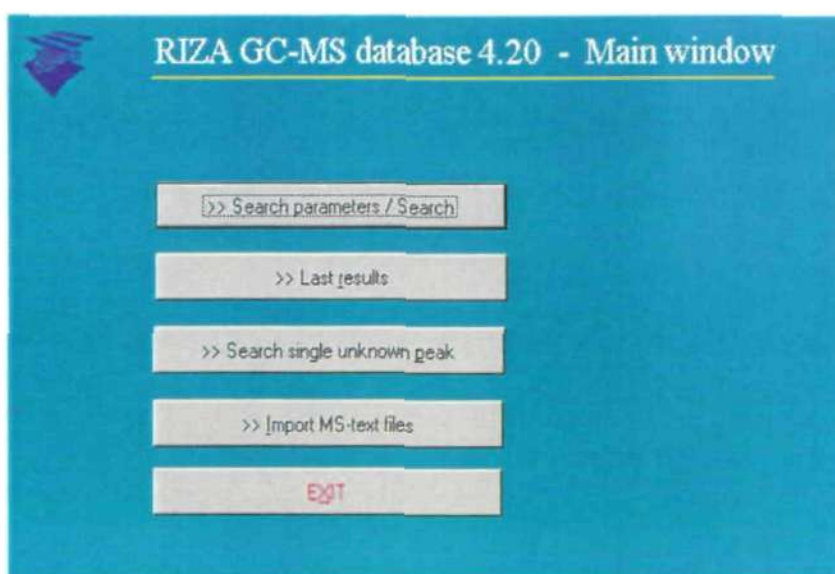
Echter dibutyl phthalate wordt te vaak aangetroffen in de blanco. In ruim 75% van de blanco monsters wordt deze stof aangetroffen. Het aantreffen van dibutyl phthalate kan dan ook niet met zekerheid worden toegeschreven aan het daadwerkelijk aanwezig zijn van deze stof in het Maaswater.

Het analyseren van ftalaten (de laatste twee stoffen en nog enkele in de screeningslijsten) is overigens een vak apart. Juist omdat deze weekmakers in ons moderne leven zo alom tegenwoordig zijn is het moeilijk om de blanco's onder controle te houden. Als ze toch gemeten moeten worden dient dit met speciale voorzorgsmaatregelen te gebeuren en niet in het kader van een brede screening.

3.2 Ontwikkelingen aan de RIZA GC/MS database

Begin 2001 is de database in zijn huidige vorm opgeleverd (Fig 6) en gebruikt om de zoekacties voor dit rapport uit te voeren. De belangrijkste ontwikkelingen waren dat (1) een sterk verbeterde vorm van piekdetectie is geïmplementeerd in de chemstation macro. Hierbij worden behalve de TIC ook alle aparte ion traces apart doorzocht op het voorkomen van pieken. De belangrijkste verbetering in de database is dat met instelbare zoekcriteria toekenning van onbekenden is mogelijk gemaakt (Fig 7-9).

Figuur 6
Hoofdscherm RIZA GCMS database.



Figuur 7

Zoekactie naar een verbinding gebruik makend van de NEN indicatie criteria (3 massa's, 1% Kovats window).

RIZA GC-MS database 4.20 - Search parameters

Compound parameters:

mass peaks to use: 3 [Apply to this compound] Apply to all compounds

	m/z	abundance %	window %
1	243	100	20
2	213	31	13
3	258	20	12
4			
5			
6			
7			
8			
9			
10			

Kovats index: 1836
Kovats window %: 1
Apply to all compounds

NEN GC-MS criteria:
Apply to Current compound
Apply to ALL compounds

Abundance windows:
Apply to Current compound
Apply to ALL compounds

GC Column: CP 545
CAS Number: a0001222-05-8
End Compound
Compound name: galaxolide (HHCB)

Figuur 8

Zoekactie naar een verbinding gebruik makend van de NEN identificatie criteria (3 massa's, 0.2% Kovats window).

RIZA GC-MS database 4.20 - Search parameters

Compound parameters:

mass peaks to use: 3 [Apply to this compound] Apply to all compounds

	m/z	abundance %	window %
1	243	100	20
2	213	31	13
3	258	20	12
4			
5			
6			
7			
8			
9			
10			

Kovats index: 1836
Kovats window %: 0.2
Apply to all compounds

NEN GC-MS criteria:
Apply to Current compound
Apply to ALL compounds

Abundance windows:
Apply to Current compound
Apply to ALL compounds

GC Column: CP 545
CAS Number: a0001222-05-5
End Compound
Compound name: galaxolide (HHCB)

Figuur 9

Zoekactie naar een verbinding gebruik makend van de EPA identificatie criteria (5 massa's, 15 sec (hier is 2% ingesteld) Kovats window).

RIZA GC-MS database 4.20 - Search parameters

Compound parameters:

mass peaks to use: 5 [Apply to this compound] Apply to all compounds

	m/z	abundance %	window %
1	243	100	50
2	213	31	16
3	258	20	10
4	244	18	9
5	128	12	6
6			
7			
8			
9			
10			

Kovats index: 1836
Kovats window %: 2
Apply to all compounds

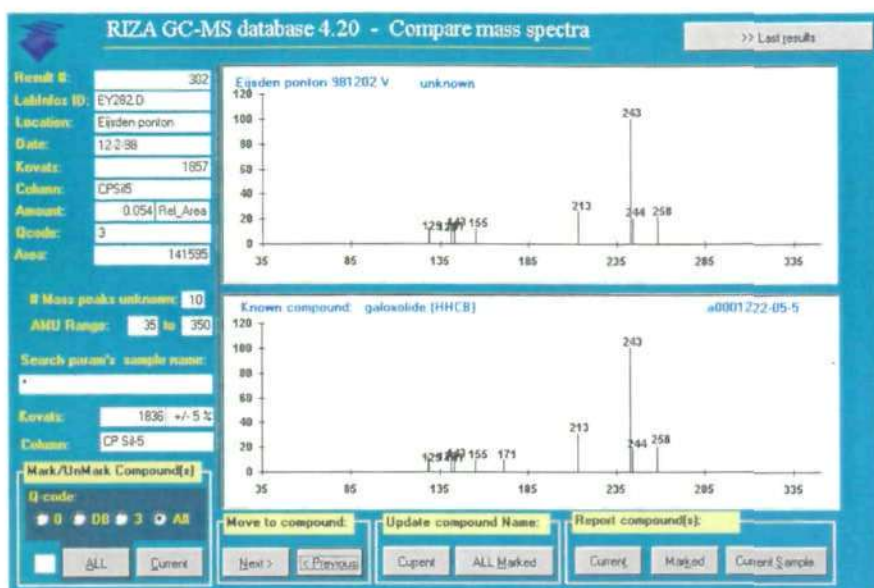
NEN GC-MS criteria:
Apply to Current compound
Apply to ALL compounds

Abundance windows:
Apply to Current compound
Apply to ALL compounds

GC Column: CP 545
CAS Number: a0001222-05-5
End Compound
Compound name: galaxolide (HHCB)

Na een zoekactie volgt er een resultatscherm waarin indien gewenst controles en correcties kunnen worden toegepast alvorens tot rapportage wordt overgegaan (Fig 10).

Figuur 10
Resultaten scherm. Met de back en forward button kunnen alle gevonden pieken worden langsgelopen en vergeleken met het bibliotheekspectrum en retentie index (Kovats). Pieken kunnen handmatig of automatisch worden gemarkeerd als toegekend waarna de naam in de database geupdate kan worden. Vervolgens zijn er enkele rapportagemogelijkheden



Op dit moment omvat het expert deel van de database 2512 verbindingen met bekende Kovats index in de RIZA tabel, een top lijst met de 149 meest aangetroffen verbindingen uit de RIZA tabel, én een tabel met ongecontroleerde literatuur spectra en Kovats indices van 33.000 records.

4 Conclusies

De database heeft over de onderzoeksperiode 22365 keer een organische verbinding gerapporteerd. Dit waren 174 verschillende stoffen. De 10 belangrijkste (qua aantal keer voorkomen) waren TAED, 2-methyl-Quinoline, atrazine, desethylatrazine, HHCb (Galaxolide), cafeïne, N-butylsulfonamide, Acridine, Benzophenon en Surfinol 104. Van de gerapporteerde stoffen zijn wel de mogelijke bronnen geïnventariseerd, maar een indeling naar milieurelevantie is in het kader van dit rapport niet uitgevoerd.

Het afgelopen jaar is naast de inventarisatie ook het RIZA GCMS database programma verder ontwikkeld. Op dit moment (dec 2001) omvat de lijst van de in het expertsysteem bekende verbindingen een aantal van 2512 verbindingen terwijl dat aantal ten tijde van het uitvoeren van de zoekacties voor het huidige rapport op 912 lag.

Het database systeem (versie 4.20) is op dit moment volledig functioneel. Er is wereldwijd geen ander systeem beschikbaar dat een zo groot aantal onbekende stoffen kan toekennen op basis van retentietijd en massaspectrum. Daarnaast is het systeem geheel open en zeer flexibel. Zo kan elke gebruiker zelf bepalen welke criteria hij toepast om naar stoffen te zoeken. Een exemplaar van de database is op aanvraag beschikbaar bij het RIZA.

5 Aanbevelingen

"Vergeten stoffen" mogen niet meer vergeten worden. Het zijn veelal door de mens geïntroduceerde stoffen waarvoor geen normen en monitoringsprogramma's bestaan. Desalniettemin hebben ze hun invloeden op het ecosysteem en daar dienen we alert op te zijn.

De RIZA GCMS database voldoet op dit moment aan zijn primaire doelstelling, te weten het mogelijk maken van semi geautomatiseerde toekenning van een groot aantal verbindingen. Er zijn echter nog een groot aantal zaken die beter en handiger zouden kunnen. Bij het inventariseren door verschillende gebruikers en belanghebbenden zijn de volgende (samengevatte) aandachtspunten genoemd die in de komende jaren afhankelijk van de mogelijkheden zullen worden aangepakt. Het RIZA beschouwt de GCMS database daarmee als een systeem dat door blijft groeien terwijl het systeem in zijn huidige opzet reeds aan zijn primaire doelstellingen voldoet.

- 1) Een afgeslankte versie van de database laten draaien op de meetstations en maandelijks de resultaten op Internet publiceren. De grote database blijft in Lelystad draaien.
- 2) Uniformiteit in analyse en verwerking nastreven tussen Lelystad, Eijsden, Bimmen, Keizersveer en eventueel anderen.
- 3) Nieuwe belangrijke stoffen toevoegen aan het expertsysteem zodat die ook herkend kunnen worden.
- 4) Kovats indices calibreren met standaarden en/of in het water voorkomende stoffen.
- 5) Ontbrekende CAS nummers van stoffen opzoeken om eenduidige stoffen te kunnen toekennen.
- 6) De eerste drie massa's van de massaspectra zijn niet altijd de meest relevante om mee te indiceren, deze nalopen en eventueel wijzigen.
- 7) Een rapportage over de meetresultaten van 2001 uitvoeren analoog aan het voorliggende rapport inclusief een uitgebreidere interpretatie gebruik makend van de methodiek uit vergeten stoffen.
- 8) De samenwerking met het RIKZ (QPID-project) voortzetten en uitbouwen.
- 9) Responsfactoren voor een geselecteerd aantal stoffen vaststellen en een schatting van de concentratie in de database inbouwen.
- 10) Invoermodule AMDIS in plaats van de RIZA macro.
- 11) De zoekacties van de database versnellen en nog een aantal andere wensen op het gebied van de database.

6 Literatuur

Barreveld, H.L., Berbee, R.P.M., Ferdinandy M.M.A., Meulen, J.H.M. van der, (2001)

Vergeten stoffen in Nederlands oppervlaktewater RIZA Lelystad, mei 2001, RIZA rapport 2001.020, ISBN 903695374x

Velde, L.E. van der, Staeb, J.A. (2000)

Organische micro-verontreinigingen in de Maas bij Eijsden, Evaluatie van GC/MS screeningsgegevens december 1998 - december 1999 met behulp van de IMLO database, RIZA Lelystad, juli 2000, RIZA Werkdocument 2000.049X

Kuijck, G van , Staeb, J.A. (2000)

Systeemvalidatie van de IMLO/QPID database voor organische microverontreinigingen, RIZA Lelystad, november 2000, RIZA werkdocument 2000.???X

Epema, O.E, Freriks, I.L. (1997)

MS access database, memo

Freriks, I.L. (1996)

Een decentrale database voor IMLO, voorstel, 30-8-1996

De Rijke, E. (1998)

Een database voor organische analyseresultaten, afstudeerverslag VUA. RIZA, werkdocument 98.074x. Lelystad, maart 1998

De Rijke, E. en O. Epema. (1999)

Evaluatie van GC/MS-metingen op meetstation Eijsden in de periode april-november 1998. Overzicht van geïdentificeerde, toegekende en onbenoemde verbindingen. Riza, intern document, maart 1999.

Breukel, R.M.A. en A.P.A. Mol (1999)

De waterkwaliteit van de Maas, Normtoetsingen in de periode 1993 t/m 1998. RIZA, werkdocument 99.181x. Lelystad, november 1999.

Sijpersma, A. (1998)

Validatierapport: Signalering van verhoogde gehalten aan organische microverontreinigingen (SIVEGOM) in oppervlaktewater met GC-MSD-FID. Met off-line extractie over XAD-hars. Februari 1998.

Sijpersma, A. (1998)

Werkvoorschrift: Signalering van verhoogde gehalten aan organische microverontreinigingen (SIVEGOM) in oppervlaktewater met GC-MSD-FID. Met off-line extractie over XAD-hars. Augustus 1998.

7 Bijlagen

Bijlage 1.	Verbindingen in de calibratiestandaard van het meetstation Eijsden
Bijlage 2.	Gebruiks informatie van de 25 meest aangetroffen verbindingen
Bijlage 3.	Gebruiks informatie van de overige aangetroffen verbindingen
Bijlage 4.	Aangetroffen verbindingen 1998 t/m 2000
Bijlage 5.	Aangetroffen verbindingen 2000
Bijlage 6.	De 912 bij het RIZA bekende stoffen gebruikt bij de zoekactie voor dit rapport

Bijlage 1 Overzicht van de stoffen die in Eijsden in de calibratiestandaard zitten

trichlooretheen	2-methylcholine
pyridine	1-methylnaftaleen
2-picoline	4-methylcholine
tetrachlooretheen	1,1-bifenyl
3-picoline	2,6-dimethylcholine
1-chloorhexaan	tetraethyleenglycoldimet
m/p-xyleen	acenafteen
2,6-dimethylpyridine	triisobutylfosfaat
2-ethoxy-ethylacetaat	dibenzofuran
2,4-dimethylpyridine	fluoreen
2,3-dimethylpyridine	2-methylthiobenzothiazol
aniline	tributylfosfaat
3,5-dimethylpyridine	atrazine-desethyl
2-chloorethylether	1-chloortetradecaan
2-aminobenzotrifluoride	simazine
3,4-dimethylpyridine	atrazine
indeen	N-butylbenzeensulfonamide
acetofenon	fenantreen
N,N-dimethylaniline	diazinon
triethylfosfaat	caffeine
2-(2-butoxy-ethoxy)-etha	1-chlooroctadecaan
naftaleen	trifenyfosfaat
2-methylnaftaleen	squaleen

Bijlage 2 Gebruiksgegevens van 25 meest aangetroffen stoffen

Van de top 25 van de meest aangetroffen stoffen in de periode 1998-2000 is gezocht naar informatie over het gebruik en de toepassing van de betreffende stof. Zie onderstaande tabel, waarin de stoffen staan gesorteerd op het aantal maal dat ze worden aangetroffen.

CAS-nummer	Stofnaam	Gebruik, toepassing
10543-57-4	TAED	Wasmiddel bestanddeel [2]
91-63-4	Quinoline, 2-methyl-	This compound is used as a solvent for decarboxylations, resins and terpenes; as a dehydrohalogenation reagent, as a preservative for anatomical specimens, as a flavoring and in medicine as an antimalarial agent. It is used in the manufacture of dyes, niacin, copper-8-quinolinolate, antiseptics, fungicides, pharmaceuticals and 8-hydroxyquinoline sulfate (which is used as an antiseptic, antiperspirant and deodorant). It is used in the manufacture of quinoline derivatives and in synthetic fuel manufacture.[3]
1912-24-9	Atrazine	High volume, consumer: herbicides for agric., garden and health service use [1]
6190-65-4	Desethylatrazine	Metaboliet Atrazine [2]
58-08-2	Caffeine	High volume, industry: Reprographic Agents Diazotype Materials - Solubilizers [1] Menselijke consumptie koffie, cola,.. [4]
3622-84-2	Benzenesulfonamide, N-butyl-	High volume, no data on use [1] Weekmaker, kunstharsen [4]
260-94-6	Acridine	Manufacture of dyes and intermediates; some dyes derived from it [3].
119-61-9	Benzophenone	high volume, consumer products: Hair mousse, Other indust. product finishes excl. pigment dispersions & ink vehicles. Packaging inks, screen printing inks, sheet-fed inks [1]
126-86-3	Surfynol 104 (2,4,7,9-Tetramethyl-5-decyne-4,7-diol)	High volume, no data on industrial use. Consumer products: flat water thinned interior paints and tinting bases, lithographic and offset inks. Other indust. product finishes excl. pigment dispersions & ink vehicles [1] Schuimremmer, gebruikt in industriële waterzuivering [4]
25265-77-4	2,2,4-Trimethyl-1,3-pentanediol monoisobutyrate	In lakken en latex verf [4] Solvent [6]
108-75-8	Pyridine, 2,4,6-trimethyl-	Metaboliet bestrijdingsmiddel ?
34590-94-8	Dipropyleenglycol monomethylether	Oplosmiddel [4]
6781-42-6	Ethanone, 1,1'-(1,3-phenylene)bis-	??
620-14-4	m-Ethyltolueen	??
122-34-9	1,3,5-Triazine-2,4-diamine, 6-chloro-N,N'-diethyl- (simazine)	high volume, used in pesticide products [1]
5131-66-8	2-Propanol, 1-butoxy-	High volume, industry: metal degreasing solvents, consumer products: flat water thinned interior paints and tinting bases, household hard

		surface cleaners (aerosol), household hard surface cleaners (liquid). Other automotive chemicals. Other specialty cleaning and sanitation products [1]
115-96-8	Tri(2-chloroethyl) phosphate	Tris(2-chloroethyl) phosphate (TRCP), a flame-retardant plasticizer used in plastics, polymeric foams, and synthetic fibers [3]
1125-21-9	2,6,6-Trimethyl-2-cyclohexene-1,4-dione	Some Perfumery Uses : Oriental; Tea; Amber; Honey. Natural Occurrence : Lemon Balm [5]
591-22-0	3,5-lutidine	??
134-62-3	Diethyltoluamide	This compound (DEET) is used as an insect repellent, as a resin solvent and in film formers. It is also used to impregnate clothing and as a leech repellent. [3]
70-55-3	Benzenesulfonamide, 4-methyl-	Geurstof [4]
78-40-0	Triethyl phosphate	Ethylating agent; formation of polyesters. Used as insecticides. Solvent; Plastics, gums; Catalyst; Lacquer remover [3]
104-76-7	1-Hexanol, 2-ethyl-	This compound is used as a solvent for dyes, resins, oils, antifoaming agents and nitrocellulose. It is also used as a wetting agent, in organic synthesis, in paints lacquers, baking finishes, plasticizers, inks, rubber, paper, lubricants, photography and dry cleaning, as a plasticizer for PVC resins, in textile finishing compounds and in mercerizing textiles. [3]
123-32-0	Pyrazine, 2,5-dimethyl-	Some Perfumery Uses : Potato; Beer; Fried; Chicken; Natural Occurrence : Roasted Products [5]
108-48-5	2,6-lutidine	??

[1]: www.scorecard.org, high volume: chemical with production exceeding 1 million pounds annually in the U.S.

[2] rapport vd Velde2000

[3]: <http://ntp-server.niehs.nih.gov/>

[4]: (Barreveld et al 2001) Vergeten stoffen

[5]: <http://www.execpc.com/~goodscent/index.html>

[6]: www.chemfinder.com

Bijlage 3 Informatie overige stoffen (op alfabetische volgorde)

Stoffen	CASnr	gebruiksinfo
1-butoxy-2-propanol	5131-66-8	high volume, industry: metal degreasing solvents, consumer products: Flat water thinned interior paints and tinting bases, household hard surface cleaners (aerosol), household hard surface cleaners (liquid), Other automotive chemicals, Other specialty cleaning and sanitation products [1]
2-methylnaftaleen	91-57-6	no data on industrial use, consumer products: Nonstructural caulking compounds and sealant, Synthetic resin and rubber adhesives, Wall coverings [1]
3-Methyl-2-butanon	563-80-4	high volume, no data on industrial or consumer use [1]
4,4'-(1-methylethylidene)bis-phenol / bis-phenol A	80-05-7	high volume, industry: Plastics Primary Antioxidants/Stabilizers, Printing Photopolymers Reprographic Agents, Thermographic Materials, Unspecified Process Regulators for Polyether Polyols [1]
Acetofenon	98-86-2	high volume, industry: paint stripping, solvent, consumer: paint and varnish removers [1]
Benzaldehyde	100-52-7	high volume, consumer: deodorants/air fresheners (non-personal, non-aerosol), Loose mineral wool fiber (blowing and pouring), ALMOND ARTIFICIAL ESSENTIAL OIL [1]
Benzene, 1,3-diethyl-	141-93-5	no data on industrial or consumer use [1]
Benzofenon	119-61-9	high volume, consumer products: Hair mousse, Other indust. product finishes excl. pigment dispersions & ink vehicles, Packaging inks Screen printing inks, Sheet-fed inks: packaging inks [1]
Bis(2-methoxyethyl) phthalate	117-82-8	Weekmaker [2]
bis(2-methoxyethyl)phthalate	34006-76-3	Weekmaker? [KB]
Di-(2-ethylhexyl)-adipaat	103-23-1	high volume, industry: softeners plasticizers, aliphatic esters, consumer products: Other indust. product finishes excl. pigment dispersions & ink vehicles [1]
Diethyl-ftalaat	84-66-2	high volume, industry: softeners (plasticizers), wood stains and varnishes (resin solvents) [1]
Hexamethyl-cyclotrisiloxaan	541-05-9	high volume, No data on industrial or consumer use [1]
Methyl-butyraat	623-42-7	no data on use [1]
o-allylphenol	1745-81-9	Bestanddeel plantaardige olie [2]
Octamethyl-cyclotetrasiloxaan	556-67-2	high volume, no data on use [1]

p/m-Xylene	106-42-3/108-38-3	high volume, industry: wood stains and varnishes (varnish solvents), consumer: Loose mineral wool fiber (blowing and pouring), Other automotive chemicals, Scatter rugs, bathmats, and sets (rugs 6 x 9 ft and smaller), Wood office furniture Wood office work surfaces (modular systems) m-Xylene: consumer: Aerosol paint concentrates, General performance sealants (PVAC, butyl, vinyl, etc.), Lubricating oils, Other automotive chemicals, Paint and varnish removers, Sheet vinyl flooring, Solvent thinned exterior undercoaters and primers, Solvent thinned interior clear finishes, Solvent thinned interior stains, Solvent thinned interior undercoaters and primers, Synthetic resin and rubber adhesives [1]
Squaleen	111-02-4	Benzine/oliecomponent
Tributyl-fosfaat	126-73-8	high volume, industry: Metalworking Fluids Extreme Pressure/Anti-wear Agents, Softeners Plasticizers - Phosphate Esters, consumer products: Herbicides for agric., garden and health service use Water thinned ext paints and tinting bases, incl barn and roof paints [1]

[1]: www.scorecard.org, high volume: chemical with production exceeding 1 million pounds annually in the U.S.

[2] rapport vd Velde2000

[3]: http://ntp-server.niehs.nih.gov/htdocs/CHEM_H&S/NTP_Chem9/Radian91-22-5.html

[4]: Vergeten stoffen

[5]: http://ntp-server.niehs.nih.gov/htdocs/CHEM_H&S/NTP_Chem2/Radian260-94-6.html

Bijlage 4 Overzicht van alle door de RIZA-database benoemde stoffen, met het aantal maal dat ze worden aangetroffen, in de periode 1998-2000

CompoundName	CASNumber	Aantal maal aangetroffen
Bis(2-methoxyethyl) phthalate	a0000117-82-8	1500
Cyclotrisiloxane, hexamethyl-TAED	a0000541-05-9	1146
Quinoline, 2-methyl-	a0010543-57-4	925
Acetophenone	a0000091-63-4	915
phthalic acid, diethyl ester	a0000098-86-2	873
Atrazine	a0000084-66-2	858
P/m-Xylene	a0001912-24-9	771
	a0000106-42-3/ a0000108-38-3	738
Squalene	a0000111-02-4	720
Benzaldehyde	a0000100-52-7	698
Desethylatrazine	a0006190-65-4	629
Phenol, 4,4'-(1-methylethylidene)bis-	a0000080-05-7	625
Cyclotetrasiloxane, octamethyl-	a0000556-67-2	608
Caffeine	a0000058-08-2	546
Benzenesulfonamide, N-butyl-	a0003622-84-2	544
Hexane, 1-chloro-	a0000544-10-5	543
4-Ethylbenzaldehyde/2,4-Dimethylbenzaldehyde	a0004748-78-1/ a0015764-16-6	474
Dihydromyrcenol	a0018479-58-8	470
Di-2-ethylhexyladipaat	a0000103-23-1	438
Acridine	a0000260-94-6	431
Naphthalene, 2-methyl-	a0000091-57-6	417
Benzonitrile	a0000100-47-0	409
Methylbutyrate	a0000623-42-7	402
Benzophenone	a0000119-61-9	387
Surfynol 104	a0000126-86-3	364
L-(-)-Menthol	a0002216-51-5	332
2,2,4-Trimethyl-1,3-pentenediol monoisobutyrate	a0025265-77-4	315
Pyridine, 2,4,6-trimethyl-	a0000108-75-8	308
Dipropyleenglycol monomethylether	a0034590-94-8	306
Ethanone, 1,1'-(1,3-phenylene)bis-	a0006781-42-6	243
m-Ethyltolueen	a0000620-14-4	211
Simazine	a0000122-34-9	210
2-Propanol, 1-butoxy-	a0005131-66-8	210
Tri(2-chloroethyl) phosphate	a0000115-96-8	193
2,6,6-Trimethyl-2-cyclohexene-1,4-dione	a0001125-21-9	188
3,5-lutidine	a0000591-22-0	187
Diethyltoluamide	a0000134-62-3	173
Benzenesulfonamide, 4-methyl-	a0000070-55-3	146
Triethyl phosphate	a0000078-40-0	145
1-Hexanol, 2-ethyl-	a0000104-76-7	141
Ethylbenzene	a0000100-41-4	134
2-Butanone, 3-methyl-	a0000563-80-4	132
Pyrazine, 2,5-dimethyl-	a0000123-32-0	129
2,6-lutidine	a0000108-48-5	128
Methyl Isobutyl Ketone	a0000108-10-1	121
Benzene, 1,3-diethyl-	a0000141-93-5	120
Pyrazine, trimethyl-	a0014667-55-1	101
Ethane, 1,1'-oxybis[2-methoxy-	a0000111-96-6	86
Benzene, 1,3,5-trimethyl-	a0000108-67-8	82
o-Toluidine	a0000095-53-4	79
Benzene, 1,4-diethyl-	a0000105-05-5	78
Styrene	a0000100-42-5	71
Phenol, 2-(1-methylethoxy)-, methylcarbamate	a0000114-26-1	67
Cyclohexanol	a0000108-93-0	62
1-phenoxy-2-propanol	a0000770-35-4	54

Octadecanoic acid, butyl ester	a0000123-95-5	52
Propanenitrile, 2,2'-azobis[2-methyl-	a0000078-67-1	48
(+/-)-Linalool	a0000078-70-6	47
Terbutylazine	a0005915-41-3	46
n-Octacosane	a0000063-02-4	44
Propyleenglycol methylether acetate	a0000108-65-6	43
Benzene, 1,2,4-trimethyl-	a0000095-63-6	41
Phenol, 4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)-	a0000140-66-9	41
Benzenemethanamine, N,N-dimethyl-	a0000103-83-3	37
Cyclopentasiloxane, decamethyl-	a0000541-02-6	37
Aniline	a0000062-53-3	35
Benzene, 1,2-dimethyl-	a0000095-47-6	34
s-Dichloroethyl ether	a0000111-44-4	34
Isoforon	a0000078-59-1	32
Ethane, 1,1,2,2-tetrachloro-	a0000079-34-5	30
Anthracene	a0000120-12-7	26
Phenol, 2-methyl-5-(1-methylethyl)-	a0000499-75-2	25
Tetraethyleenglycol dimethylether	a0000143-24-8	25
Phosphoric acid tributyl ester	a0000126-73-8	24
3-tert-Butyl-4-hydroxyanisole	a0000121-00-6	19
Benzene, propyl-	a0000103-65-1	19
Benzene, 1,2-diethyl-	a0000135-01-3	18
Ethanol, 2-butoxy-, phosphate (3:1)	a0000078-51-3	17
Naphthalene, 1-ethyl-	a0001127-76-0	16
3-Pentanone, 2,2,4,4-tetramethyl-	a0000815-24-7	16
Di-n-octyl phthalate	a0000117-84-0	16
Formamide, N,N-dibutyl-	a0000761-65-9	15
Dimpylate	a0000333-41-5	15
Benzenamine, 2-(trifluoromethyl)-	a0000088-17-5	14
Diphosphoric acid, tetraethyl ester	a0000107-49-3	13
Ethanol, 2-(2-butoxyethoxy)-	a0000112-34-5	13
Cyclohexanone	a0000108-94-1	12
Dimethyl phthalate	a0000131-11-3	12
Benzylcyanide	a0000140-29-4	11
Tributylamine	a0000102-82-9	11
Chrysene	a0000218-01-9	9
Eucalyptol	a0000470-82-6	9
Phenol, 2,4-dichloro-	a0000120-83-2	9
Phosphine oxide, triphenyl-	a0000791-28-6	9
Trichloroethylene	a0000079-01-6	9
Benzene, (1-methylethyl)-	a0000098-82-8	8
1,2,4-Triazin-5(4H)-one, 4-amino-3-methyl-6-phenyl-	a0041394-05-2	7
Benzene, 1,1'-(chloromethylene)bis-	a0000090-99-3	7
Ethanol, 2-(2-butoxyethoxy)-, acetate	a0000124-17-4	7
Pyridine, 3,4-dimethyl-	a0000583-58-4	7
Benzenemethanol, alpha,alpha-dimethyl-	a0000617-94-7	6
o-Hydroxybiphenyl	a0000090-43-7	6
1-Hexanol	a0000111-27-3	5
2,4/2,5-xylenol	a0000105-67-9/a0000095-87-4	5
Disulfide, dimethyl	a0000624-92-0	5
Ethanol, 2-phenoxy-	a0000122-99-6	5
Isooctane	a0000540-84-1	5
Phenol, 2-(1-methylethyl)-	a0000088-69-7	5
1,4-Naphthalenedione	a0000130-15-4	4
2,4-lutidine	a0000108-47-4	4
Benzene, 1,3-bis(1-methylethyl)-	a0000099-62-7	4
Bis(2-ethylhexyl) phthalate	a0000117-81-7	4
Carbofuran	a0001563-66-2	4
Ethanol, 2-butoxy-	a0000111-76-2	4
3,4-xylenol	a0000095-65-8	3
alpha-Methylstyrene	a0000098-83-9	3

Caprolactam	a0000105-60-2	3
Carbon Tetrachloride	a0000056-23-5	3
Ethanol, 2-[2-(2-butoxyethoxy)ethoxy]-	a0000143-22-6	3
Isoquinoline	a0000119-65-3	3
Naphthalene	a0000091-20-3	3
Nikethamide	a0000059-26-7	3
o-allylphenol	a0001745-81-9	3
p-dichlorobenzene	a0000106-46-7	3
Phenol, 4-(1-methylethyl)-	a0000099-89-8	3
Propane, 1,2-dichloro-	a0000078-87-5	3
Pyridine, 2-ethyl-	a0000100-71-0	3
1-Propanamine, N,N-dipropyl-	a0000102-69-2	2
2,3-xylenol	a0000526-75-0	2
2-Heptanone	a0000110-43-0	2
2-Propenoic acid, 2-methyl-, methyl ester	a0000080-62-6	2
Benzaldehyde, 2,4-dimethyl-	a0015764-16-6	2
Benzene, 1-(1,1-dimethylethyl)-3,5-dimethyl-	a0000098-19-1	2
Butylated Hydroxytoluene	a0000128-37-0	2
Crotamiton	a0000483-63-6	2
D-Limonene	a0005989-27-5	2
Ftaalzuur anhydride	a0000085-44-9	2
Phenylethyl Alcohol	a0000060-12-8	2
Pyridine, 2,3-dimethyl-	a0000583-61-9	2
Tris(2-chloroisopropyl)phosphate	a0006145-73-9	2
1,3-Benzodioxole, 5-(1-propenyl)- (trans)	a0000120-58-1t	1
1-Hydroxyisochinoline	a0000491-30-5	1
2-Butanone, 1-(4-chlorophenoxy)-3,3-dimethyl-1-(1H-	a0043121-43-3	1
3,5-xylenol	a0000108-68-9	1
5,5-Dimethyl-1,3-dioxane	a0000872-98-0	1
Benzamide, 2,6-dichloro-	a0002008-58-4	1
Benzenamine, 3-(trifluoromethyl)-	a0000098-16-8	1
Benzene, 1,2,4-trichloro-	a0000120-82-1	1
Benzene, 1,4-bis(1-methylethyl)-	a0000100-18-5	1
Benzene, nitro-	a0000098-95-3	1
Benzyl Alcohol	a0000100-51-6	1
Butyl citrate	a0000077-94-1	1
Chlorpropham	a0000101-21-3	1
Docosane	a0000629-97-0	1
Ethanol, 2-(2-ethoxyethoxy)-	a0000111-90-0	1
Fenchon	a0007787-20-4	1
Foron	a0000504-20-1	1
Hexanedioic acid, dibutyl ester	a0000105-99-7	1
m/p-Cresol	a0000108-39-4/a0000106-44-5	1
m-Chloroaniline	a0000108-42-9	1
m-Toluidine	a0000108-44-1	1
N,N-Dimethylnitrosoamine	a0000062-75-9	1
N-Nitrosodiphenylamine	a0000086-30-6	1
Phenanthrene	a0000085-01-8	1
Phenol	a0000108-95-2	1
Phenol, 2-(1,1-dimethylethyl)-	a0000088-18-6	1
Phenol, 2,4-bis(1,1-dimethylpropyl)-	a0000120-95-6	1
Phenol, 2,6-dichloro-	a0000087-65-0	1
Phenol, p-tert-butyl-	a0000098-54-4	1
p-Hydroxybiphenyl	a0000092-69-3	1
Pyrene	a0000129-00-0	1
Pyridine, 2-chloro-	a0000109-09-1	1

Bijlage 5 Overzicht van alle door de RIZA-database benoemde stoffen, met het aantal maal dat ze worden aangetroffen in 2000

CompoundName	CASNumber	Aantal maal aangetroffen
Bis(2-methoxyethyl) phthalate	a0000117-82-8	588
Cyclotrisiloxane, hexamethyl-	a0000541-05-9	433
TAED	a0010543-57-4	317
phthalic acid, diethyl ester	a0000084-66-2	292
2,6,10,14,18,22-Tetracosahexaene, 2,6,10,15,19,23-h	a0000111-02-4	282
Naphthalene, 2-methyl-	a0000091-57-6	255
Hexane, 1-chloro-	a0000544-10-5	252
Atrazine	a0001912-24-9	246
p/m-Xylene	a0000106-42-3/ a0000108-38-3	241
Caffeine	a0000058-08-2	238
Desethylatrazine	a0006190-65-4	238
Methylbutyrate	a0000623-42-7	223
Phenol, 4,4'-(1-methylethylidene)bis-	a0000080-05-7	223
Benzaldehyde	a0000100-52-7	218
Acetophenone	a0000098-86-2	215
4-Ethylbenzaldehyde/2,4-Dimethylbenzaldehyde	a0004748-78-1/ a0015764-16-6	211
Quinoline, 2-methyl-	a0000091-63-4	184
Di-2-ethylhexyladipaat	a0000103-23-1	158
Benzenesulfonamide, N-butyl-	a0003622-84-2	143
Benzene, 1,3-diethyl-	a0000141-93-5	115
(+,-,meso)2,4,7,9-Tetramethyl-5-decyne-4,7-diol (Surfynol 104)	a0000126-86-3	112
Acridine	a0000260-94-6	106
Cyclotetrasiloxane, octamethyl-	a0000556-67-2	103
Dihydromyrcenol	a0018479-58-8	100
Benzonitrile	a0000100-47-0	87
Benzophenone	a0000119-61-9	87
Pyridine, 2,4,6-trimethyl-	a0000108-75-8	86
Ethanone, 1,1'-(1,3-phenylene)bis-	a0006781-42-6	79
Benzene, 1,4-diethyl-	a0000105-05-5	76
L-(-)-Menthol	a0002216-51-5	76
Triethyl phosphate	a0000078-40-0	74
Tri(2-chloroethyl) phosphate	a0000115-96-8	73
2-Butanone, 3-methyl-	a0000563-80-4	64
Ethylbenzene	a0000100-41-4	63
Methyl Isobutyl Ketone	a0000108-10-1	61
Simazin	a0000122-34-9	60
3,5-lutidine	a0000591-22-0	57
2-Propanol, 1-butoxy-	a0005131-66-8	56
Dipropyleenglycol monomethylether	a0034590-94-8	53
Diethyltoluamide	a0000134-62-3	50
m-Ethyltolueen	a0000620-14-4	47
2,2,4-Trimethyl-1,3-pentanediol monoisobutyrate	a0025265-77-4	45
2,6,6-Trimethyl-2-cyclohexene-1,4-dione	a0001125-21-9	45
1-Hexanol, 2-ethyl-	a0000104-76-7	42
2,6-lutidine	a0000108-48-5	40

Ethane, 1,1'-oxybis[2-methoxy-	a0000111-96-6	39
Benzenesulfonamide, 4-methyl-	a0000070-55-3	32
Octadecanoic acid, butyl ester	a0000123-95-5	25
s-Dichloroethyl ether	a0000111-44-4	25
Aniline	a0000062-53-3	23
Styrene	a0000100-42-5	23
n-Octacosane	a0000063-02-4	19
Propanenitrile, 2,2'-azobis[2-methyl-	a0000078-67-1	19
Propyleenglycol methylether acetate	a0000108-65-6	19
Benzene, 1,2-diethyl-	a0000135-01-3	18
Benzene, 1,3,5-trimethyl-	a0000108-67-8	16
Phosphoric acid tributyl ester	a0000126-73-8	16
1-phenoxy-2-propanol	a0000770-35-4	12
Dimpylate	a0000333-41-5	12
Naphthalene, 1-ethyl-	a0001127-76-0	12
Benzenamine, 2-(trifluoromethyl)-	a0000088-17-5	10
3-Pentanone, 2,2,4,4-tetramethyl-	a0000815-24-7	10
Phenol, 2-(1-methylethoxy)-, methylcarbamate	a0000114-26-1	10
Ethane, 1,1,2,2-tetrachloro-	a0000079-34-5	9
o-Toluidine	a0000095-53-4	9
Benzene, propyl-	a0000103-65-1	8
Benzene, 1,2-dimethyl-	a0000095-47-6	7
Diphosphoric acid, tetraethyl ester	a0000107-49-3	7
Phenol, 4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)-	a0000140-66-9	7
Benzenemethanamine, N,N-dimethyl-	a0000103-83-3	6
Ethanol, 2-butoxy-, phosphate (3:1)	a0000078-51-3	6
Phenol, 2,4-dichloro-	a0000120-83-2	6
Anthracene	a0000120-12-7	6
Pyrazine, 2,5-dimethyl-	a0000123-32-0	6
Cyclohexanol	a0000108-93-0	6
(+/-)-Linalool	a0000078-70-6	5
3-tert-Butyl-4-hydroxyanisole	a0000121-00-6	5
Isoforon	a0000078-59-1	5
Pyrazine, trimethyl-	a0014667-55-1	5
Pyridine, 3,4-dimethyl-	a0000583-58-4	5
Benzenemethanol, alpha,alpha-dimethyl-	a0000617-94-7	5
Trichloroethylene	a0000079-01-6	4
1,4-Naphthalenedione	a0000130-15-4	3
Benzene, 1,1'-(chloromethylene)bis-	a0000090-99-3	3
Benzene, 1,2,4-trimethyl-	a0000095-63-6	3
Benzylcyanide	a0000140-29-4	3
Caprolactam	a0000105-60-2	3
Di-n-octyl phthalate	a0000117-84-0	3
Ethanol, 2-(2-butoxyethoxy)-	a0000112-34-5	3
Isooctane	a0000540-84-1	3
p-dichlorobenzene	a0000106-46-7	3
Terbuthylazine	a0005915-41-3	3
1,2,4-Triazin-5(4H)-one, 4-amino-3-methyl-6- phenyl-	a0041394-05-2	2
2,4-lutidine	a0000108-47-4	2
Benzene, (1-methylethyl)-	a0000098-82-8	2
Cyclopentasiloxane, decamethyl-	a0000541-02-6	2
Ethanol, 2-[2-(2-butoxyethoxy)ethoxy]-	a0000143-22-6	2

Ethanol, 2-butoxy-	a0000111-76-2	2
o-allylphenol	a0001745-81-9	2
1,3-Benzodioxole, 5-(1-propenyl)- (trans)	a0000120-58-1t	1
1-Hexanol	a0000111-27-3	1
1-Propanamine, N,N-dipropyl-	a0000102-69-2	1
2-Butanone, 1-(4-chlorophenoxy)-3,3-dimethyl-1-(1H-	a0043121-43-3	1
2-Heptanone	a0000110-43-0	1
Benzamide, 2,6-dichloro-	a0002008-58-4	1
Benzenamine, 3-(trifluoromethyl)-	a0000098-16-8	1
Benzyl Alcohol	a0000100-51-6	1
Crotamiton	a0000483-63-6	1
Cyclohexanone	a0000108-94-1	1
Disulfide, dimethyl	a0000624-92-0	1
Ethanol, 2-(2-ethoxyethoxy)-	a0000111-90-0	1
Formamide, N,N-dibutyl-	a0000761-65-9	1
Foron	a0000504-20-1	1
Hexanedioic acid, dibutyl ester	a0000105-99-7	1
m-Chloroaniline	a0000108-42-9	1
N,N-Dimethylnitrosoamine	a0000062-75-9	1
Naphthalene	a0000091-20-3	1
o-Hydroxybiphenyl	a0000090-43-7	1
Phenol, 2-(1-methylethyl)-	a0000088-69-7	1
Phenol, 2,6-dichloro-	a0000087-65-0	1
Phenylethyl Alcohol	a0000060-12-8	1
p-Hydroxybiphenyl	a0000092-69-3	1
Pyridine, 2-chloro-	a0000109-09-1	1
Pyridine, 2-ethyl-	a0000100-71-0	1
Tetraethylenglycol dimethylether	a0000143-24-8	1

Bijlage 6 Overzicht van alle 912 bij het RIZA bekende stoffen (in de RIZA GCMS database op 10 januari 2001)

Stofnaam	CAS	Stofnaam	CAS	Stofnaam	CAS	Stofnaam	CAS
Surfynol 104	126-86-3	Benzamide, 2,6-dichloro-	2008-58-4	Carbon Tetrachloride	56-23-5	Naphthalene, 1-chloro-	90-13-1
(+/-)-2-Methylbutanezuur methylester	5395-81-0	Benzamide, N,N-dimethyl-	611-74-5	Carbonochloridic acid, phenyl ester	1885-14-9	Naphthalene, 1-ethyl-	1127-76-0
(+/-)-Linalool	78-70-6	Benzenamine, 2-(trifluoromethyl)-	88-17-5	Carbophenothion	786-19-6	Naphthalene, 1-iodo-	90-14-2
(1S)-endo(-)-Borneoiacetaat	5655-61-8	Benzenamine, 2,3-dichloro-	608-27-5	Chlorfenvinphos	470-90-6	Naphthalene, 1-methoxy-	2216-69-5
[1,1'-Biphenyl]-4,4'-diamine	92-87-5	Benzenamine, 2,6-bis(1-methylethyl)-	24544-04-5	Chlorobenzilate	510-15-6	Naphthalene, 1-methyl-	90-12-0
[1,1'-Biphenyl]-4,4'-diamine, 3,3'-dimethoxy-	119-90-4	Benzenamine, 2-bromo-	615-36-1	Chlorophenothane	50-29-3	Naphthalene, 1-nitro-	86-57-7
[1,1'-Biphenyl]-4,4'-diamine, 3,3'-dimethyl-	119-93-7	Benzenamine, 2-bromo-4-methyl-	583-68-6	Chlorpropham	101-21-3	Naphthalene, 2-chloro-	91-58-7
[1,1'-Biphenyl]-4-amine	92-67-1	Benzenamine, 2-methoxy-5-nitro-	99-59-2	Chlorpyrifos	2921-88-2	Naphthalene, 2-ethenyl-	827-54-3
1,1,3,4,4,6-Hexamethyl-7-acetyltetraline	1506-02-1	Benzenamine, 2-methyl-5-nitro-	99-55-8	Chrysene	218-01-9	Naphthalene, 2-ethyl-	939-27-5
1,1'-Bicyclohexyl	92-51-3	Benzenamine, 3-(trifluoromethyl)-	98-16-8	Chrysene-d12	218-01-9D	Naphthalene, 2-methoxy-	93-04-9
1,1'-Biphenyl, 2,2',3,4,4',5,5'-heptachloro-	35065-29-3	Benzenamine, 3,4-dichloro-	95-76-1	cis-Chlorfenvinphos	18708-87-7	Naphthalene, 2-methyl-	91-57-6
1,1'-Biphenyl, 2,2',3,4,4',5'-hexachloro-	35065-28-2	Benzenamine, 3,5-bis(trifluoromethyl)-	328-74-5	Clorophene	120-32-1	Naphthalene, decahydro-, cis-	493-01-6
1,1'-Biphenyl, 2,2',4,4',5,5'-hexachloro-	35065-27-1	Benzenamine, 3-bromo-	591-19-5	Cotinine	486-56-6	Naphthalene, decahydro-, trans-	493-02-7
1,1'-Biphenyl, 2,2',4,5,5'-pentachloro-	37680-73-2	Benzenamine, 3-iodo-	626-01-7	Coumaphos	56-72-4	n-Butylbenzylamine	2403-22-7
1,1'-Biphenyl, 2,2',5,5'-tetrachloro-	35693-99-3	Benzenamine, 4-(phenylazo)-	60-09-3	Coumarine	91-64-5	N-ethyl-m-toluidine	102-27-2
1,1'-Biphenyl, 2,3,3'-trichloro-	38444-84-7	Benzenamine, 4-(trifluoromethyl)-	455-14-1	Crotamiton	483-63-6	Nicotinic acid benzyl ester	94-44-0
1,1'-Biphenyl, 2,3',4,4',5-pentachloro-	31508-00-6	Benzenamine, 4,4'-methylenebis[2-chloro-	101-14-4	Cyanazine	21725-46-2	Nikethamide	59-26-7
1,1'-Biphenyl, 2,4,4'-trichloro-	7012-37-5	Benzenamine, 4-methyl-2-nitro-	89-62-3	Cycloate	1134-23-2	N-Nitrosodiphenylamine	86-30-6
1,1'-Biphenyl, 2,4'-dichloro-	34883-43-7	Benzenamine, N,N-diethyl-	91-66-7	Cyclobutanecarbonitrile, 1-phenyl-	14377-68-5	n-Octacosane	63-02-4
1,1'-Biphenyl, 2-methoxy-	86-26-0	Benzenamine, N,N-diethyl-3-methyl-	91-67-8	Cycloheptane	291-64-5	Nonanedioic acid, dibutyl ester	2917-73-9
1,1'-Biphenyl, 3,3',4-Trichloro-	x20	Benzenamine, N,N-diethyl-4-methyl-	613-48-9	Cyclohexanamine, N,N-diethyl-	91-65-6	Norbornane	279-23-2
1,1'-Biphenyl, 3-methyl-	643-93-6	Benzenamine, N,N-dimethyl-	121-69-7	Cyclohexanamine, N-cyclohexyl-	101-83-7	Norflurazon	27314-13-2
1,1'-Biphenyl, 4-nitro-	92-93-3	Benzenamine, N,N-dimethyl-4-(phenylazo)-	60-11-7	Cyclohexane	110-82-7	N-phenylbenzenesulfonamide	1678-25-7
1,1-bis(p-chlorophenyl)-2,2-dichloroethylene	72-55-9	Benzenamine, N-ethyl-	103-69-5	Cyclohexane, 1,2,3,4,5,6-hexachloro-, (1alpha,2,b	319-85-7	O,O,O-Trimethyl thiophosphate	152-18-1
1,1-Dichloro-2,2-bis(p-chlorophenyl)ethane	72-54-8	Benzene	71-43-2	Cyclohexane, iodo-	626-62-0	o,p'-DDE	3424-82-6
1,2,3,4,10,10-hexachloro-6,7-epoxy-1,4-4a,5,6,7,8,8a-octahydro-1,4-endo-5,8-endo-dimethanonaphthalene	72-20-8	Benzene, (1-methylethyl)-	98-82-8	Cyclohexane, 1,2-dibromo-,trans-	7429-37-0	o-allylphenol	1745-81-9
1,2,3,4,10,10-hexachloro-6,7-epoxy-1,4-4a,5,6,7,8,8a-octahydro-1,4-endo-5,8-exo-dimethanonaphthalene	60-57-1	Benzene, (2-bromoethyl)-	103-64-0	Cyclohexanol	108-93-0	o-Chloroaniline	95-51-2
1,2,4-Methenocyclopenta[cd]pentaen e-5-carboxaldehy	7421-93-4	Benzene, (2-chloroethoxy)-	622-86-6	Cyclohexanone	108-94-1	o-cresol	95-48-7
1,2,4-Triazin-5(4H)-one, 4-amino-3-methyl-6-phenyl-	41394-05-2	Benzene, (2-methoxyethoxy)-	41532-81-4	Cyclohexanone, 4-(1,1-dimethylethyl)-	98-53-3	Octadecanoic acid, butyl ester	123-95-5
1,2,4-Trimethoxybenzene	135-77-3	Benzene, (3-bromopropyl)-	637-59-2	Cyclohexanone, 5-methyl-2-(1-methylethylidene)-	15932-80-6	Octanal, 2-(phenylmethylene)-	101-86-0
1,2-Benzenedicarboxylic acid, bis(2-methylpropyl) e	84-69-5	Benzene, (3-chloro-1-propenyl)-	9-12-87	Cyclopentasiloxane, decamethyl-	541-02-6	o-dichlorobenzene	95-50-1
1,2-Benzenedicarboxylic acid, di-2-propenyl ester	131-17-9	Benzene, (3-chloropropyl)-	104-52-9	Cyclopropanecarboxylic acid, 2,2,3,3-tetramethyl-	39515-41-8	o-Hydroxybiphenyl	90-43-7
1,2-Ethanediol, diacetate	111-55-7	Benzene, (dichloromethyl)-	98-87-3	Cyclopropyl 2-thienyl ketone	6193-47-1	Omethoate	1113-02-6
1,2-Hexanediol	6920-22-5	Benzene, (trichloromethyl)-	98-07-7	Cyclotetrasiloxane, octamethyl-	556-67-2	o-Nitroaniline	88-74-4
1,3,4,6,7,8-Hexahydro-4,6,6,7,8,8-hexamethyl-	1222-05-5	Benzene, (trimethoxymethyl)-	707-07-3	Cyclotrisiloxane, hexamethyl-	541-05-9	ortho-Hydroxypropiophenone	610-99-1

1,3,5-Triazine-2,4,6(1H,3H,5H)-trione, 1,3,5-tri-2-	1025-15-6	Benzene, [(chloromethyl)sulfonyl]-	7205-98-3	cyfluthrin	68359-37-5	o-Toluidine	95-53-4
1,3,5-Triazine-2,4-diamine, 6-chloro-N,N'-bis(1-methyl-)	139-40-2	Benzene, 1-(1,1-dimethylethyl)-3,5-dimethyl-	98-19-1	cyhalothrin	68085-85-8	o-Tolylisocyanat	614-68-6
1,3,5-Triazine-2,4-diamine, 6-chloro-N,N'-diethyl-	122-34-9	Benzene, 1-(1,1,1-dimethylethyl)-3-ethyl-5-methyl-	9-1-30	Decanedioic acid, dibutyl ester	109-43-3	Oxirane, (phenoxymethyl)-	122-60-1
1,3,5-Triazine-2,4-diamine, 6-chloro-N-ethyl-	1007-28-9	Benzene, 1,1'-(chloromethylene)bis-	90-99-3	Decanedioic acid, dimethyl ester	106-79-6	Oxirane, [[4-(1,1-dimethylethyl)phenoxy]methyl]-	3101-60-8
1,3,5-Triazine-2,4-diamine, N,N'-bis(1-methylethyl)	7287-19-6	Benzene, 1,1'-sulfonylbis[4-chloro-	80-07-9	delta-Lindane	319-86-8	Oxyquinoline	148-24-3
1,3,5-Triazine-2,4-diamine, N-ethyl-N'-(1-methylethyl)	834-12-8	Benzene, 1,2,3,4-tetrachloro-	634-66-2	Demeton-S	126-75-0	p/m-Xylene	106-42-3/108-38-3
1,3,5-triazine-2,4-diamine, N'-isopropyl-N''-(3-methoxypropyl)-6-methylthio-	841-06-5	Benzene, 1,2,3,5-tetrachloro-	634-90-2	Desethylatrazine	6190-65-4	paclobutrazool	76738-62-0
1,3,5-trinitrobenzene	99-35-4	Benzene, 1,2,3-trichloro-	87-61-6	Desmetryn	1014-69-3	Parathion-ethyl	56-38-2
1,3,5-Trioxane	110-88-3	Benzene, 1,2,3-trimethyl-	526-73-8	Di-2-ethylhexyladiapaat	103-23-1	p-Cresyl glycidyl ether	2186-24-5
1,3-Benzenediol, diacetate	108-58-7	Benzene, 1,2,4,5-tetrachloro-	95-94-3	diacetone alcohol	123-42-2	p-dichlorobenzene	106-46-7
1,3-Benzodioxole, 5-(1-propenyl)- (cis)	120-58-1	Benzene, 1,2,4,5-tetrachloro-3-nitro-	117-18-0	Diallate	2303-16-4	p-dioxane	123-91-1
1,3-Benzodioxole, 5-(1-propenyl)- (trans)	120-58-1t	Benzene, 1,2,4,5-tetramethyl-	95-93-2	Dibemethine	102-05-6	Penconazole	66246-88-6
1,3-Benzodioxole, 5-(2-propenyl)-	94-59-7	Benzene, 1,2,4-trichloro-	120-82-1	Dibenz[a,h]anthracene	53-70-3	pentachloronitrobenzene	82-59-7
1,3-Butadiene, 1,1,2,3,4,4-hexachloro-	87-68-3	Benzene, 1,2,4-trimethyl-	95-63-6	Dibenzofuran	132-64-9	Pentachlorothioanisole	1825-19-0
1,3-Cyclopentadiene, 1,2,3,4,5,5-hexachloro-	77-47-4	Benzene, 1,2-dibromo-	583-53-9	Dibutyl butanephosphonate	78-46-6	Pentane, 1,5-dibromo-	111-24-0
1,3-Dioxolane, 2-ethyl-4-methyl-	4359-46-0	Benzene, 1,2-dibromo-3,4,5,6-tetrafluoro-	827-08-7	Dibutyl phthalate	84-74-2	Pentoxifyllin	6-5-93
1,3-Dioxolane, 2-methyl-	497-26-7	Benzene, 1,2-dichloro-3-nitro-	3209-22-1	Dichlofenthion	97-17-6	Permethrin (cis)	52645-53-1
1,4-Benzenediamine, N,N-diethyl-	93-05-0	Benzene, 1,2-dichloro-4-(chloromethyl)-	102-47-6	dichlofluanide	1058-98-9	Perylene-d12	198-55-0D
1,4-Naphthalenedione	130-15-4	Benzene, 1,2-dichloro-4-(trichloromethyl)-	13014-24-9	Diethyl butylmalonate	133-08-4	Phenacetin	62-44-2
1,4-Naphthalenedione, 2,3-dichloro-	117-80-6	Benzene, 1,2-dichloro-4-methyl-	95-75-0	Diethyl isobutylmalonate	10203-58-4	Phenanthrene	85-01-8
1,5,9-Cyclododecatriene, 1,5,9-trimethyl-	21064-19-7	Benzene, 1,2-dichloro-4-nitro-	99-54-7	Diethyl isopropylmalonate	759-36-4	Phenanthrene-d10	85-01-8D
1-Decanamine	2016-57-1	Benzene, 1,2-diethyl-	135-01-3	Diethyl sec-butylmalonate	83-27-2	Phenol	108-95-2
1-Dodecanamine, N,N-dimethyl-	112-18-5	Benzene, 1,2-dimethoxy-4-(1-propenyl)-	93-16-3	Diethyltoluamide	134-62-3	Phenol, 2-(1,1-dimethylethyl)-	88-18-6
1H-1,2,4-Triazole, 1-[[2-(2,4-dichlorophenyl)-4-pro	60207-90-1	Benzene, 1,2-dimethoxy-4-(2-propenyl)-	93-15-2	difenconazole	119446-68-3	Phenol, 2-(1,1-dimethylethyl)-5-methyl-	88-60-8
1H-1,2,4-Triazole-1-ethanol, beta-(4-chlorophenox	55219-65-3	Benzene, 1,2-dimethoxy-4-nitro-	709-09-1	Dihydromyrcenol	18479-58-8	Phenol, 2-(1,1,8-dimethylethyl)-6-methyl-	2219-82-1
1-Hexanol	111-27-3	Benzene, 1,2-dimethyl-	95-47-6	Dimethyl phthalate	131-11-3	Phenol, 2-(1-methylethoxy)-, methylcarbamate	114-26-1
1-Hexanol, 2-ethyl-	104-76-7	Benzene, 1,2-dinitro-	528-29-0	Dimethyl succinaat	106-65-0	Phenol, 2-(1-methylethyl)-	88-69-7
1-Hexen-3-one, 5-methyl-1-phenyl-	2892-18-4	Benzene, 1,3,5-trichloro-	108-70-3	Dimpylate	333-41-5	Phenol, 2-(1-methylpropyl)-4,6-dinitro-	88-85-7
1H-Inden-1-one, 2,3-dihydro-	83-33-0	Benzene, 1,3,5-triethyl-	102-25-0	Di-n-octyl phthalate	117-84-0	Phenol, 2,3,4,6-tetrachloro-	58-90-2
1H-Indole, 2,3-dihydro-1,3,3-trimethyl-2-methylene-	118-12-7	Benzene, 1,3,5-trimethyl-	108-67-8	Diphenyl ether	101-84-8	Phenol, 2,3-dichloro-	576-24-9
1H-Phenalen-1-one	548-39-0	Benzene, 1,3,5-tris(1-methylethyl)-	717-74-8	Diphenyl sulfide	139-66-2	Phenol, 2,4,5-trichloro-	95-95-4
1H-Pyrazole, 3,5-dimethyl-1-phenyl-	1131-16-4	Benzene, 1,3-bis(1-methylethyl)-	99-62-7	Diphenyl sulfone	127-63-9	Phenol, 2,4,6-trichloro-	88-06-2
1-Hydroxyisochinoline	491-30-5	Benzene, 1,3-bis(trifluoromethyl)-	402-31-3	Diphenylamine	122-39-4	Phenol, 2,4-bis(1,1-dimethylpropyl)-	120-95-6
1-Naphthalenamine, N,N-dimethyl-	86-56-6	Benzene, 1,3-dibromo-	108-36-1	Diphenylmethane	101-81-5	Phenol, 2,4-dichloro-	120-83-2
1-Naphthalenamine, N-ethyl-	118-44-5	Benzene, 1,3-dichloro-2-methoxy-	1984-65-2	Diphosphoric acid, tetraethyl ester	107-49-3	Phenol, 2,4-dichloro-6-methyl-	1570-65-6
1-Naphthaleneacetic acid, methyl ester	2876-78-0	Benzene, 1,3-dichloro-2-methyl-	118-69-4	Dipropyleenglycol monomethylether	34590-94-8	Phenol, 2,4-dinitro-	51-28-5
1-Naphthaleneacetonitrile	132-75-2	Benzene, 1,3-diethyl-	141-93-5	Disulfide, bis(2-methylpropyl)	1518-72-5	Phenol, 2,5-dichloro-	583-78-8
1-Naphthalenecarboxaldehyde	66-77-3	Benzene, 1,3-dimethoxy-	151-10-0	Disulfide, bis(3-methylbutyl)	9-4-51	Phenol, 2,5-dinitro-	329-71-5
1-Octanamine, N-methyl-N-octyl-	4455-26-9	Benzene, 1,3-dimethyl-2-nitro-	81-20-9	Disulfide, dibutyl	629-45-8	Phenol, 2,6-dichloro-	87-65-0
1-phenoxy-2-propanol	770-35-4	Benzene, 1,3-dinitro-	99-65-0	Disulfide, dimethyl	624-92-0	Phenol, 2,6-dimethoxy-4-(2-propenyl)-	6627-88-9

1-Phenylcyclopentanenitrile	77-57-6	Benzene, 1,4-bis(1-methylethyl)-	100-18-5	Disulfide, dipentyl	112-51-6	Phenol, 2,6-dinitro-	573-56-8
1-Propanamine, N,N-dipropyl-	102-69-2	Benzene, 1,4-dibutoxy-	104-36-9	DL-Alanine, N-(2,6-dimethylphenyl)-N-(methoxyacetyl)	57837-19-	Phenol, 2-bromo-1	95-56-7
1-Propanone, 1-(4-fluorophenyl)-	456-03-1	Benzene, 1,4-dichloro-2,3,5,6-tetradeutero	106-46-7D	D-Limonene	5989-27-5	Phenol, 2-bromo-4-methyl-	6627-55-0
1-Propanone, 1-(4-methoxyphenyl)-	121-97-1	Benzene, 1,4-dichloro-2-methyl-	19398-61-9	Docosane	629-97-0	Phenol, 2-chloro-5-methyl-	615-74-7
1-Propene, 1,1,2,3,3,3-hexachloro-	1888-71-7	Benzene, 1,4-dichloro-2-nitro-	89-61-2	Dodecanoyl chloride	112-16-3	Phenol, 2-methyl-4,6-dinitro-	534-52-1
1-Propene, 2,3-dibromo-	513-31-5	Benzene, 1,4-diethoxy-	122-95-2	Dodemorphan	1593-77-7	Phenol, 2-methyl-5-(1-methylethyl)-	499-75-2
1-Propene, 3-chloro-2-(chloromethyl)-	1871-57-4	Benzene, 1,4-diethyl-	105-05-5	Endosulfan	115-29-7	Phenol, 3,4-dichloro-	95-77-2
1-t-Butyl-1-cyclohexene	3419-66-7	Benzene, 1,4-dinitro-	100-25-4	Endosulfan I	959-98-8	Phenol, 3,5-dichloro-	591-35-5
2-(2-chlorophenyl)-2-(4-chlorophenyl)-1,1,1-trichloroethane (o,p-DDT) 2'-	784-02-6	Benzene, 1-bromo-2-ethyl-	1973-22-4	Endosulfan sulfate	1031-07-8	Phenol, 3-bromo-	591-20-8
(Trifluoromethyl)acetophenone	17408-14-9	Benzene, 1-bromo-2-iodo-	583-55-1	Enilconazole	35554-44-	Phenol, 4-(1,1,3,3,0 tetramethylbutyl)-	140-66-9
2,2,4-Trimethyl-1,3-pentanediol monoisobutyrate	25265-77-4	Benzene, 1-bromo-2-methyl-	95-46-5	Esfenvalerate	66230-04-	Phenol, 4-(1,1,4 dimethylethyl)-2-methyl-	98-27-1
2,2,4-Trimethylpentane-1,3-diol diisobutyrate	6846-50-0	Benzene, 1-bromo-3-methyl-	591-17-3	Ethane, 1,1,1-trichloro-	71-55-6	Phenol, 4-(1-methyl-1-phenylethyl)-	599-64-4
2,2,6,6-Tetramethyl-4-piperidinon monohydrate	10581-38-1	Benzene, 1-bromo-4-(trifluoromethyl)-	402-43-7	Ethane, 1,1,2,2-tetrachloro-	79-34-5	Phenol, 4-(1-methylethyl)-	99-89-8
2,2-Dimethoxybutane	3453-99-4	Benzene, 1-bromo-4-ethoxy-	588-96-5	Ethane, 1,1,2,2-tetrachloro-1,2-difluoro-	76-12-0	Phenol, 4,4'-(1-methylethylidene)bis-	80-05-7
2,3,4,5,6-Pentachloroaniline	527-20-8	Benzene, 1-bromo-4-methoxy-	104-92-7	Ethane, 1,1,2-trichloro-	79-00-5	Phenol, 4-butoxy-	122-94-1
2,3,4,6-Di-O-isopropylidene-a-L-sorbofuranose	17682-70-1	Benzene, 1-bromo-4-phenoxy-	101-55-3	Ethane, 1,1'-oxybis[2-methoxy-	111-96-6	Phenol, 4-methyl-2-nitro-	119-33-5
2,3,5,6-Tetrafluorothiophenol	769-40-4	Benzene, 1-chloro-2-(trichloromethyl)-	2136-89-2	Ethane, 1,2-bis(ethylthio)-	5395-75-5	Phenol, pentachloro-	87-86-5
2,3-xyleneol	526-75-0	Benzene, 1-chloro-2-(trifluoromethyl)-	88-16-4	Ethane, hexachloro-	67-72-1	Phenol, p-tert-butyl-	98-54-4
2,4,8,10-Tetraoxaspiro[5.5]undecane	126-54-5	Benzene, 1-chloro-2,4-dinitro-	97-00-7	Ethane, pentachloro-	76-01-7	Phenylethyl Alcohol	60-12-8
2,4,2,5-xyleneol	105-67-9/95-87-4	Benzene, 1-chloro-2-iodo-	615-41-8	Ethanedioic acid, dibutyl ester	2050-60-4	Phorate	298-02-2
2,4,2,6-Dimethylaniline	95-68-1/87-62-7	Benzene, 1-chloro-2-nitro-	88-73-3	Ethanol, 2-(2-butoxyethoxy)-	112-34-5	Phosalone	2310-17-0
2,4-Bis-t-butylphenol	95-76-4	Benzene, 1-chloro-2-nitro-4-(trifluoromethyl)-	121-17-5	Ethanol, 2-(2-butoxyethoxy)-, acetate	124-17-4	Phosmet	732-11-6
2,4-diamino-N'-tertbutyl-N-cyclopropyl-6-methylthio-1,3,5-triazine	28159-98-0	Benzene, 1-chloro-3-(trifluoromethyl)-	98-15-7	Ethanol, 2-(2-ethoxyethoxy)-	111-90-0	Phosphamidon	13171-21-6
2,4-lutidine	108-47-4	Benzene, 1-chloro-3-nitro-	121-73-3	Ethanol, 2-(2-methoxyethoxy)-	111-77-3	Phosphine oxide, triphenyl-	791-28-6
2,5,5-Trimethyl-1,3-dioxane	766-33-6	Benzene, 1-chloro-4-(1-methylethenyl)-	1712-70-5	Ethanol, 2-(phenylmethoxy)-	622-08-2	Phosphine sulfide, triphenyl-	3878-45-3
2,5,8,11-Tetraoxadodecane	112-49-2	Benzene, 1-chloro-4-(chlorophenylmethyl)-	134-83-8	Ethanol, 2-[2-(2-butoxyethoxy)ethoxy]-	143-22-6	Phosphinic acid, diphenyl-, ethyl ester	1733-55-7
2,6,10,14,18,22-Tetracosahexaene, 2,6,10,15,19,23-h	111-02-4	Benzene, 1-chloro-4-(trichloromethyl)-	5216-25-1	Ethanol, 2-[4-(1,1-dimethylethyl)phenoxy]-	713-46-2	Phosphonic acid, ethenyl-, bis(2-chloroethyl) ester	115-98-0
2,6,6-Trimethyl-2-cyclohexene-1,4-dione	1125-21-9	Benzene, 1-chloro-4-(trifluoromethyl)-	98-56-6	Ethanol, 2-[4-(1-methylpropyl)phenoxy]-	5349-63-3	Phosphonic acid, methyl-, dimethyl ester	756-79-6
2,6,2,7-Dimethyl quinoline	877-43-0/93-37-8	Benzene, 1-chloro-4-[(chloromethyl)thio]-	7205-90-5	Ethanol, 2-butoxy-	111-76-2	Phosphonic dichloride, phenyl-	824-72-6
2,6-Dichloro-4-nitroaniline	99-30-9	Benzene, 1-chloro-4-ethoxy-	622-61-7	Ethanol, 2-butoxy-, phosphate (3:1)	78-51-3	Phosphoric acid tributyl ester	126-73-8
2,6-diethyl-p-toluidine	24544-08-9	Benzene, 1-chloro-4-methyl-2-nitro-	89-60-1	Ethanol, 2-phenoxy-	122-99-6	phosphoric acid, 2,2-dichlorovinyl dimethyl ester	62-73-7
2,6-di-tert-butyl-p-cresol	489-01-0	Benzene, 1-chloro-4-nitro-	100-00-5	Ethanone, 1-(2,4,6-trimethylphenyl)-	1667-01-2	Phosphoric acid, triphenyl ester	115-86-6
2,6-lutidine	108-48-5	Benzene, 1-chloro-4-nitro-2-(trifluoromethyl)-	777-37-7	Ethanone, 1-(2,4-dichlorophenyl)-	2234-16-4	Phosphorochloridithioic acid, O,O-dimethyl ester	2524-03-0
2-Butanone, 1-(4-chlorophenoxy)-3,3-dimethyl-1-(1H)-	43121-43-3	Benzene, 1-chloro-4-phenoxy-	7005-72-3	Ethanone, 1-(2,4-dimethylphenyl)-	89-74-7	Phosphorothioic acid, O-(4-bromo-2-chlorophenyl) O-	41198-08-7
2-Butanone, 3-methyl-	563-80-4	Benzene, 1-ethoxy-4-nitro-	100-29-8	Ethanone, 1-(2,5-dichlorophenyl)-	2476-37-1	Phosphorothioic acid, O-(6-ethoxy-2-ethyl-4-pyrimid	38260-54-7
2-Butenedioic acid (E)-, dibutyl ester	105-75-9	Benzene, 1-iodo-2-methyl-	615-37-2	Ethanone, 1-(2,5-dimethoxyphenyl)-	1201-38-3	phosphorothioic acid, o,o,o-triethyl ester	126-68-1
2-Cyclohexen-1-ol, 3,5,5-trimethyl-	470-99-5	Benzene, 1-iodo-3-(trifluoromethyl)-	401-81-0	Ethanone, 1-(2-bromophenyl)-	2142-69-0	Phosphorothioic acid, O,O-dimethyl O-(3,5,6-trichlo	5598-13-0

3-Methyl-p-anisaldehyde	32723-67-4	Benzenemethanol, 4-(1,1-dimethylethyl)-	877-65-6	geraniol	106-24-1	Pyridine, 2,3-dimethyl-	583-61-9
3-Octanone	106-68-3	Benzenemethanol, 4-bromo-alpha-methyl-	5391-88-8	Germane, tetraethyl-	597-63-7	Pyridine, 2,4,6-trimethyl-	108-75-8
3-pentanone	96-22-0	Benzenemethanol, 4-chloro-alpha-methyl-	4-10-91	Germane, tetrapropyl-	994-65-0	Pyridine, 2-bromo-	109-04-6
3-Pentanone, 2,2,4,4-tetramethyl-	815-24-7	Benzenemethanol, 4-methoxy-, acetate	104-21-2	Heptachlor	76-44-8	Pyridine, 2-chloro-	109-09-1
3-Penten-2-one	625-33-2	Benzenemethanol, 4-methoxy-, formate	122-91-8	Heptachlor epoxide	1024-57-3	Pyridine, 2-chloro-6-methyl-	18368-63-3
3-tert-Butyl-4-hydroxyanisole	121-00-6	Benzenemethanol, alpha,alpha-dimethyl-	617-94-7	Hexadecanoic acid	57-10-3	Pyridine, 2-ethenyl-	100-69-6
4,4'-(oxidi-2,1-ethanediy)bis morpholine	6425-39-4	Benzenemethanol, alpha-phenyl-	91-01-0	Hexadecanoic acid, butyl ester	111-06-8	Pyridine, 2-ethyl-	100-71-0
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	77-73-6	Benzenepropanethiol	24734-68-7	Hexamethylphosphoric triamide	680-31-9	Pyridine, 2-phenyl-	1008-89-5
4-Chloro-3-iodobenzotrifluoride	672-57-1	Benzenepropanol, gamma-phenyl-	20017-67-8	Hexane, 1-chloro-	544-10-5	Pyridine, 3-(1-methyl-2-pyrrolidinyl)-, (S)-	54-11-5
4-Chlorobenzyl mercaptan	6258-66-8	Benzenesulfonamide, 4-methyl-	70-55-3	Hexane, 1-iodo-	638-45-9	Pyridine, 3,4-dimethyl-	583-58-4
4-Chlorophenyl cyclopropyl ketone	6640-25-1	Benzenesulfonamide, N-(2-methylphenyl)-	18457-86-	Hexanedioic acid, bis(2-methylpropyl) ester	141-04-8	Pyridine, 4-(3-phenylpropyl)-	2057-49-0
4-Ethylbenzaldehyde/2,4-Dimethylbenzaldehyde	4748-78-1/15764-16-6	Benzenesulfonamide, N-butyl-	3622-84-2	Hexanedioic acid, dibutyl ester	105-99-7	Pyrimidine	91-84-9
4-Pyridinecarboxylic acid, ethyl ester	1570-45-2	Benzenesulfonic acid, 4-methyl-, butyl ester	778-28-9	Hexanedioic acid, diethyl ester	141-28-6	pyrimethanil	53112-28-0
5,5-Dimethyl-1,3-dioxane	872-98-0	Benzenesulfonic acid, 4-methyl-, methyl ester	80-48-8	Hexanoic acid, 2-bromo-, ethyl ester	615-96-3	Quinalphos	13593-03-8
5-Butyl-2-ethylamino-6-methylpyrimidin-4-yl dimethyl	41483-43-	Benzenesulfonic acid, methyl ester	80-18-2	Hydroxypivalyl hydroxypivalaat	1115-20-4	Quinoline, 2,4-dimethyl-	1198-37-4
5-Nonanol	623-93-8	Benzenesulfonyl fluoride	368-43-4	Iminostilbeen	256-96-2	Quinoline, 2-methyl-	91-63-4
5-Pyrimidinemethanol, alpha-(2-chlorophenyl)-,alp	60168-88-	Benzenethiol, 4-(1,1-dimethylethyl)-	2396-68-1	indane	496-11-7	Quinoline, 3-bromo-	5332-24-1
6-Bromo-alpha,alpha,alpha-trifluoro-m-toluidi	454-79-5	Benzenethiol, pentafluoro-	771-62-0	Indene	95-13-6	Quinoline, 4-nitro-, 1-oxide	56-57-5
6-ethyl-o-toluidine	24549-06-2	Benzo[a]pyrene	50-32-8	Indeno[1,2,3-cd]pyrene	193-39-5	Quinoline, 6-methoxy-	5263-87-6
6-tert-Butyl-2,4-dimethylphenol	1879-09-0	Benzo[b]thiophene	95-15-8	Iodofenphos	18181-70-9	Quinoline, 8-chloro-	611-33-6
7-Benzofuranol, 2,3-dihydro-2,2-dimethyl-	1563-38-8	Benzo[ghi]perylene	191-24-2	Isobenzan	297-78-9	Quinomethionate	2-1-39
9,10-Anthracenedione	84-65-1	Benzo[k]fluoranthene	207-08-9	Isocineol	470-67-7	Quinoxaline, 2,3-dimethyl-	2379-55-7
9,12,15-Octadecatrienoic acid, methyl ester, (Z,Z,Z)	301-00-8	Benzoic acid, 2,4-dimethoxy-, methyl ester	2150-41-6	Isodrin	465-73-6	Resorcinol Monoacetate	102-29-4
9H-Fluorene-2,7-diamine	525-64-4	Benzoic acid, 2-[[ethoxy(1-methylethyl)amino]phosp	25311-71-1	Isoforon	78-59-1	S-benzylidipropylthiocarbamate	52888-80-9
Acenaphthene	83-32-9	Benzoic acid, 2-amino-, 2-methylpropyl ester	7779-77-3	Isooctane	540-84-1	s-Dichloroethyl ether	111-44-4
Acenaphthene-d10	83-32-9D	Benzoic acid, 2-amino-, 2-propenyl ester	7493-63-2	Isooctanol	26952-21-6	Silane, 6 ethenyltriethoxy-	78-08-0
Acenaphthylene	208-96-8	Benzoic acid, 2-amino-, ethyl ester	87-25-2	Isopropyl Myristate	110-27-0	Silane, triethoxyethyl-	78-07-9
Acenaphthylene, 1,2,2a,3,4,5-hexahydro-	480-72-8	Benzoic acid, 2-amino-, methyl ester	134-20-3	Isoquinoline	119-65-3	Silane, triethoxymethyl-	2031-67-6
Acetal	105-57-7	Benzoic acid, 2-hydroxy-, ethyl ester	118-61-6	Kamfer	464-48-2	Silicic acid (H4SiO4), tetraethyl ester	78-10-4
Acetaldehyde, tribromo-	115-17-3	Benzoic acid, 2-hydroxy-, phenylmethyl ester	118-58-1	Kepone	143-50-0	Silicic acid (H4SiO4), tetramethyl ester	681-84-5
Acetamide	60-35-5	Benzoic acid, 2-hydroxy-3-methyl-, methyl ester	23287-26-5	L-(-)-Menthol	2216-51-5	Silicic acid (H4SiO4), tetrapropyl ester	682-01-9
Acetamide, 2-chloro-N-(1-methylethyl)-N-phenyl-	1918-16-7	Benzoic acid, 2-methoxy-, methyl ester	606-45-1	Lenacil	1-8-64	Stannane, tetrabutyl-	1461-25-2
Acetamide, 2-chloro-N-(2,6-dimethylphenyl)-N-(1H-py	67129-08-	Benzoic acid, 2-methyl-, methyl ester	89-71-4	Lepidine	491-35-0	Stannane, tetramethyl-	594-27-4
Acetamide, N-(4-methoxy-2-nitrophenyl)-	119-81-3	Benzoic acid, 2-nitro-, methyl ester	606-27-9	Linalyl acetaat	115-95-7	Stannane, tributylchloro-	1461-22-9
Acetamide, N-(4-methylphenyl)-	103-89-9	Benzoic acid, 3,5-dimethyl-, methyl ester	25081-39-4	m/p-Cresol	108-39-4/106-44-5	Stirofos	22248-79-9
Acetamide, N,N-dimethyl-	127-19-5	Benzoic acid, 3-amino-, ethyl ester	582-33-2	Malathion	121-75-5	Styrene	100-42-5
Acetamide, n-ethyl-N-phenyl-	529-65-7	Benzoic acid, 3-methyl-, methyl ester	99-36-5	m-Chloroaniline	108-42-9	sulfolaan	126-33-0
Acetic acid, (2,4-dichlorophenoxy)-	94-75-7	Benzoic acid, 4-fluoro-, ethyl ester	451-46-7	Mecarbam	2595-54-2	Sulfotep	3689-24-5
Acetic acid, (diethoxyphosphinyl)-, ethyl ester	867-13-0	Benzoic acid, ethyl ester	93-89-0	Mesityloxyde	141-79-7	TAED	10543-57-4
Acetic acid, iodo-, ethyl ester	623-48-3	Benzonitrile	100-47-0	Methacrylzuur hydroxypropylester	27813-02-1	Terbufos	13071-79-9
Acetic acid, phenylmethyl ester	140-11-4	Benzonitrile, 2,6-dichloro-	1194-65-6	Methane, bromotrichloro-	75-62-7	Terbutylazine	5915-41-3

Acetic acid, trichloro-, ethyl ester	515-84-4	Benzophenone	119-61-9	Methane, dibromo-	74-95-3	Terbutryn	886-50-0
Acetophenone	98-86-2	Benzothiazole	95-16-9	Methane, dibromochloro-	124-48-1	Tetrachloroethylene	127-18-4
Acetyl chloride, phenoxy-	701-99-5	Benzothiazole, 2-(methylthio)-	615-22-5	Methane, diiodo-	75-11-6	Tetrachloroisophthaloni trile	1897-45-6
Acetylcedreen	32388-55-9	Benzyl Alcohol	100-51-6	Methane, tribromo-	75-25-2	Tetradifon	116-29-0
Acridine	260-94-6	Benzylcyanide	140-29-4	Methane, triiodo-	75-47-8	Tetraethylenglycol dimethylether	143-24-8
Adamantane, 1,3-dimethyl-	702-79-4	beta-Mevinphos	26718-65-0	Methanediazamine, N,N,N',N'-0 tetramethyl-	51-80-9	Tetralin	119-64-2
Alachlor	15972-60-8	Bibenzyl	103-29-7	Methanone, (2-methylphenyl)phenyl-	131-58-8	Tetramethrin	7696-12-0
Aldrin-R	309-00-2	Bicyclo[2.2.1]hept-2-ene, 2-phenyl-	5-8-37	Methanone, cyclopentylphenyl-	5422-88-8	Tetrasul	2227-13-6
alpha, alpha-Dichloroacetophenone	2648-61-5	Bicyclo[2.2.1]heptan-2-one, 1,3,3-trimethyl-	4695-62-9	Methapyrilene	91-80-5	Thiabendazole	148-79-8
alpha-Lindane	319-84-6	bifenthrin	82657-04-3	Methiocarb	2032-65-7	Thionazin	297-97-2
alpha-Methylstyrene	98-83-9	Biphenyl	92-52-4	Methoxychlor	72-43-5	Thiophene, 2,5-dichloro-	3172-52-9
Aminodiphenylmethane	91-00-9	Bis(2-ethylhexyl) phthalate	117-81-7	Methyl abietate	127-25-3	Thiophene, 2-bromo-	1003-09-4
Anilin, N-(1-ethylpropyl)-3,4-dimethyl-2,6-dinitro-	40487-42-1	Bis(2-methoxyethyl) phthalate	117-82-8	Methyl Isobutyl Ketone	108-10-1	Thiophene, 2-iodo-	3437-95-4
Aniline	62-53-3	bitertanol	55179-31-2	Methyl Salicylate	119-36-8	Toluene	108-88-3
Aniline, N-methyl-	100-61-8	Bromacil	314-40-9	Methylbutyrate	623-42-7	tolylfluaniid	731-27-1
Anisyl butyrate	6963-56-0	Bromophos	2104-96-3	Methylcrotonaat	623-43-8	Traseolide	68140-48-7
Anthracene	120-12-7	Bromophos-ethyl	4824-78-6	Methyl-parathion	298-00-0	Tri(2-chloroethyl) phosphate	115-96-8
a-Terpineol	10482-56-1	Butane, 1,4-diiodo-	628-21-7	methyl-tolclophos	57018-04-9	Triallate	2303-17-5
Atrazine	1912-24-9	Butane, 1-iodo-	542-69-8	m-Ethyltolueen	620-14-4	Triazophos	24017-47-8
Azinphos-ethyl	2642-71-9	Butanedioic acid, acetyl-, diethyl ester	1115-30-6	Metolachlor	51218-45-2	Tributyl acetylcitrate	77-90-7
Azinphos-Methyl	86-50-0	Butanedioic acid, dibutyl ester	141-03-7	Metribuzin	21087-64-9	Tributylamine	102-82-9
Azulene	275-51-4	Butanoic acid, 2-bromo-, ethyl ester	533-68-6	Mevinphos	7786-34-7	Tributyryn	60-01-5
b-Citronellol	106-22-9	Butanoic acid, 2-bromo-3-methyl-, ethyl ester	609-12-1	Mirex	2385-85-5	Trichloroethylene	79-01-6
Benfluralin	1861-40-1	Butanoic acid, heptafluoro-	375-22-4	Mitotane	53-19-0	Triethyl methanetricarboxylate	6279-86-3
Bentazone	25057-89-0	Butralin	33629-47-9	m-Pyrol	872-50-4	Triethyl phosphate	78-40-0
Benz[a]anthracene	56-55-3	Butyl citrate	77-94-1	m-Pyrol	872-50-4	Triethylamine	121-44-8
Benz[a]anthracene, 7,12-dimethyl-	57-97-6	Butylated Hydroxytoluene	128-37-0	m-Toluidine	108-44-1	Trifluralin	1582-09-8
Benz[e]acephenanthrylene	205-99-2	Caffeine	58-08-2	m-Trifluoromethylbenzonitrile	368-77-4	Triisobutylphosphate	126-71-6
Benzaldehyde	100-52-7	Caprolactam	105-60-2	N,N'-Diethyl-N,N'-diphenylurea	85-98-3	Triphenylmethane	519-73-3
Benzaldehyde, 2,4-dimethyl-	15764-16-6	Carbamazepine	298-46-4	N,N-Diisobutylformamide	2591-76-6	Tris(2-chloroisopropyl)phosphate	6145-73-9
Benzaldehyde, 2-bromo-	6630-33-7	Carbamic acid, phenyl-, 1-methylethyl ester	122-42-9	N,N-Dimethylnitrosoamine	62-75-9	Urea, N'-(4-bromophenyl)-N-methoxy-N-methyl-	3060-89-7
Benzaldehyde, 2-ethoxy-	613-69-4	Carbamodithioic acid, diethyl-, methyl ester	686-07-7	N-2-Fluorenylacetamide	53-96-3	Urea, tetrabutyl-	4559-86-8
Benzaldehyde, 3-bromo-	3132-99-8	Carbamodithioic acid, dimethyl-, methyl ester	3735-92-0	Naphthalene	91-20-3	Urea, tetramethyl-	632-22-4
Benzaldehyde, 3-hydroxy-4-methoxy-	621-59-0	Carbazole	86-74-8	Naphthalene, 1-(2-propenyl)-	2489-86-3	Urethane	51-79-6
Benzamide	55-21-0	Carbofuran	1563-66-2	Naphthalene, 1-bromo-	90-11-9	Vinclozoline	50471-44-8